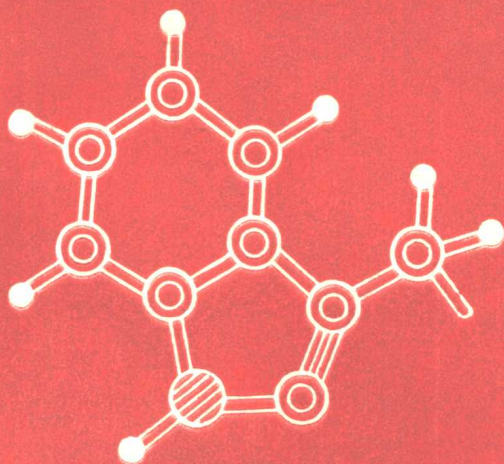




生物学与 量子力学

[苏] A C 达维多夫 著

Q61
LPL

科学出版社

115614

生物学与量子力学

〔苏〕A. C. 达维多夫 著

李培廉 李景惠 译
张维华 李德武

科学出版社

1990

内 容 简 介

本书试图用量子力学的观点和方法阐述分子中原子之间以及分子之间的相互作用、蛋白质的结构与功能、物质的跨膜运动、生物力学、肌肉收缩的分子机制以及生物系统中能量与电子转移等生物学重大问题。

本书适合于物理与生物学方面的专业人员、教师及高年级大学生阅读。

A. C. Давыдов

БИОЛОГИЯ И КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Наукова Думка, 1979

生物学与量子力学

[苏] A. C. 达维多夫 著

李培廉 李景惠 张维华 李德武 译

责任编辑 张邦固

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1990年6月第一版 开本: 787×1092 1/32

1990年6月第一次印刷 印张: 10 1/4

印数: 000—1,200 字数: 233 000

ISBN 7-03-001673-4/O · 333

定价: 10.30元

序

在分子水平上对生物客体作全面而深入的研究吸引了越来越多的物理学家。然而，由于进入这一领域的物理学家对生物现象所知甚少，这一现实至今仍然妨碍着分子生物学研究的卓有成效的发展。相当复杂而又专门的术语极大地阻碍了物理学家去阅读生物学家、生物化学家和生理学家的原著。另一方面，生物学家们通常又对量子分子物理中一些近代理论和概念缺乏足够的了解，所以他们不是总能理解这样一些著作的内容，在这些著作中应用了量子力学的数学工具来刻画关于生物学的模型系统。由此可见，出版由在生物学领域内工作的物理学家们来写的通论性的书籍的必要性已经成熟了。近来出版了由 M. B. 伏肯斯坦 (Волькенштейн)^[12] 及 Л. А. 布鲁门菲尔 (Блумсафельд)^[10] 分别撰写的好书，书中叙述了分子生物物理的理论基础，并对若干问题进行了分析。这种书增进了物理学家与生物学家的相互了解，大大促进了分子生物物理的发展。

本书试图以一种既能为不懂生物学的物理学家，又能为不完全掌握现代量子力学的数学工具的生物学家所能理解的语言来讲述生物物理学的一些问题。

本书的一个基本观点是，生物机体的一切不同于无生物的特征都是由复杂的分子系统的特殊组织所引起的。在这些系统中仍然是由那些决定无生物界物体的原子与分子性质的基本规律在起作用。因此在叙述基本的生物现象之前，要对原子与分子之间以及它们与水介质之间的相互作用作初步的

讲述。在讲述蛋白质分子的构造、酶与细胞膜的结构与性质、光合作用以及神经冲动传递的分子基础时，对在生物机体的生命活动中起重大作用的大蛋白分子中的集体元激发的研究给予了充分的注意。

在开创性研究的基础上，作者与其合作者确立了在某类化学反应下会在蛋白质分子中产生孤立子型的集体元激发。这种元激发携带着激发的能量沿蛋白质分子移动。孤立子的异乎寻常的稳定性解释了它们的能量转化为无规则热运动的几率很小的原因。激发能量沿蛋白质分子传递的效率很高，如何解释这种现象是近代生物物理学的中心任务之一。

本书也相当重视描述动物肌肉收缩的分子机制，书中的叙述是以作者关于孤立子在化学能转化为机械能中所起作用的假设为基础的。

作者真挚地感谢生物学博士 В. К. 利希科 (Лышко) 和物理数学博士 Э. Г. 彼得罗夫 (Петров)，他们阅读了手稿，并提出了宝贵的意见。

如果本书能引起年轻的研究者们的兴趣，并对他们在分子生物物理领域内独立开展工作有所帮助，作者将感到莫大的欣慰。

A. C. 达维多夫

目 录

序.....	iii
第一章 生物学与物理学的关系.....	1
§ 1 生物机体与无生物的差异	1
§ 2 在分子水平上描述生物现象的可能性	4
第二章 分子内原子间的相互作用和分子之间的 相互作用.....	13
§ 3 生命的化学元素	13
§ 4 生物分子中基本原子的电子结构	15
§ 5 原子间的相互作用	20
§ 6 分子间的相互作用	33
§ 7 离子和分子与水的相互作用	43
第三章 蛋白质及其生物功能.....	52
§ 8 蛋白质结构	53
§ 9 蛋白质的某些生物功能	68
§ 10 已知空间结构的酶.....	91
第四章 细胞膜.....	103
§ 11 细胞的表面.....	103
§ 12 细胞膜的组成与结构	107
§ 13 分子和离子穿过膜的被动转运	117
§ 14 分子和离子透过膜的主动转运	134
第五章 生物力能学.....	149
§ 15 细胞内的代谢反应.....	149
§ 16 线粒体——细胞的能量制造厂	160
§ 17 光合作用机理	180
§ 18 神经冲动的传导	211

第六章 肌肉收缩的分子机制.....	228
§ 19 横纹肌的结构组织	228
§ 20 肌肉收缩机制的现代观念	242
§ 21 非骨骼肌的收缩系统	254
第七章 生物系统中能量和电子的迁徙.....	264
§ 22 一维分子系统中能量的迁徙	265
§ 23 生物系统中电子的输运	289
参考文献.....	311

第一章 生物学与物理学的关系

§1 生物机体与无生物的差异

在生物学中广泛采用物理学研究方法，使我们有可能在分子水平上研究生物现象。由于有生物化学家、生理学家、生物物理学家以及结晶学家们的卓越工作，才逐渐确立了一系列生物客体的分子结构。例如，已经查明作为遗传信息基本载体的脱氧核糖核酸（DNA）的结构，此外，动物肌肉中储存氧气的肌球蛋白分子的结构，作为红血球的组成部分并将氧气由肺部输送给组织的血红蛋白的结构，横纹肌以及其内部的蛋白分子的结构，还有若干酶、维生素和一系列其他重要生物分子的结构，现在也都已经弄清楚了。

在分子水平上来研究生物过程已经取得了大量新的实验结果，解释它们的任务已经提上议事日程。由于一切生物机体都是由分子和原子组成的，要从分子水平上阐明生物过程的机制，只有依靠在描述构造原子与分子的电子及原子核的运动上取得了成功的量子理论才有可能。

生物学与物理学间的紧密联系，在自然科学发展的早期就已经显露端倪。然而，除了唯物主义的理解外，还长期存在着一种极端错误的，叫做“活力论”的反科学观点。活力论者认为，生物体与无生物体被一条不可逾越的鸿沟隔开，生物体不服从自然规律，而是由一种“活力”来支配，因而是人类所不可理解的。

活力论者的观点早就受到了科学的批驳。今天已再没有人怀疑，生命是复杂的分子系统内发生的物理过程与化学过

程的一种特殊表现，这种复杂的分子系统通过能量和物质的交换而与其他系统相互作用。不过今天仍有一些学者持有这样的看法：生物系统的复杂性排除了在分子水平之上来认识它们的可能性。

自然，必须看到，生物客体具有一系列不同于无生物的独特特征。在这些特征中，首先是自我复制能力和对外部条件变化的适应性，以及对在生命系统内发生并保证其生命活动的一切生物过程所具有的极其精确的调节功能和自洽性。

组成生物机体的分子非常大，异常复杂并且多种多样。构成细胞的一切分子，其中最复杂而形式最多样的莫过于蛋白质分子。它们的分子量小的也有几万，大的则有几百万。

生物机体的极大的多样性并不意味着构成它们的化学单元也是极其多样化的。化合物和原子团还是那些，但组合方式有多种形式，这就引起了上述多样性。例如，一切蛋白质基本上是由二十多种氨基酸组成的。DNA 分子是由四种核苷酸组成的。

在研究无生物界的物体时，人们就弄清楚了，随着原子系统复杂程度的增加，会出现质变。例如，温度、熵、声波和其他元激发的概念只适用于原子与分子组成的系统，对单个的原子是不适用的。

毋庸置疑，使生物机体不同于无生物体的一切特点都是由复杂分子系统的特殊组织所引起的，但这些分子仍然是以决定原子和分子的性质的基本规律为基础的，那些由原子和分子所构成的无生物体的性质也是由这些规律来决定的。

生物机体的生长、发展和复制联系着各种各样的化学反应。生物化学对其研究作出了巨大的贡献。但在生物化学中注意力主要是集中在对那些直接接触的紧邻原子间的相互作用进行研究。正如诺贝尔奖金获得者圣乔吉在 1957^[56] 年所

写的：生物化学“还仍然是卢克莱修或伊壁鸠鲁式的科学：字母—图画—字母”。生物现象是由更为精细的、弱的、力程更短和更长的作用力所引起的（见 §6）。它们只能用量子力学的语言来描述。量子力学是在本世纪的 30 年代到 40 年代在概括大量有关原子、分子及其相互作用以及它们与电磁场之间的相互作用的实验结果的基础上建立起来的*。

今天谁也不否认物理及化学的规律可以应用于研究生物现象。压倒多数的学者一致同意，各种各样的生命现象归根到底总可以在无生命系统所服从的物理规律和化学规律的基础上得到解释。但仍有一些人坚持认为，需要发展新的、至今尚未创立的物理学。

自然，量子物理并不是一门僵化的科学，它仍在不断地发展。处理复杂分子系统的数学方法也在完善。以应用现代电子计算机为基础的研究在这方面起了很大的作用。

理论生物物理在当代的基本任务就是，对决定生物分子的**构造与性质的特异性**以及对最简单的超分子的结构进行理论的研究。生物现象实验研究领域内的巨大成就，以及在分子物理和固体物理领域中的理论研究都将有助于完成这些任务。

理论生物物理应当考虑到生物客体与无生物界的物体有本质的差异。一切生物客体都是开放系统。它们的生命活动只有在与周围介质进行物质和能量交换的条件下才有可能进行。生物机体中的基本过程是在消耗一定能量的情况下发生的。这一能量由营养食物来供给。

如果说，在生物机体的细胞内，由氨基酸合成蛋白质要消

* 实际上量子力学的开创性工作均发表于从 1923 到 1928 的五年里，在随后的十年中是量子力学在物理和化学的各个领域中得到广泛应用的时期，也是量子力学壮大、充实的时期。——译者注

耗能量,那末后者在细胞的水介质中分解就可以自动地进行,并随之放出能量。根据某些资料,心肌蛋白的半衰期约为三十天。机体必须不断地用新的蛋白分子来代替衰竭了的蛋白。因此,用物理学家的话来说,一切蛋白质,因而也就是一切生物机体,都是处于一种亚稳的状态之下。因此只有从这种不稳态过渡到相应于完全的热力学平衡的稳定态去的时间很长的条件下,生命才有可能存在。

§ 2 在分子水平上描述生物现象的可能性

今天摆在生物物理学家面前的任务就是描述一些最简单的生物系统(如酶、结构蛋白、细胞膜和细胞膜)以及作为生物机体的细胞内的细胞器的构造、性质和功能机制。由食物中取得的化学能是如何加以保存和有效地利用以构造细胞和保证生命活动的正常进行的,阐明其机制具有特别的意义。我们假定,这些问题能够在掌握生物的基本单元的原子组成的基础上,再考虑到分子内部和分子之间的相互作用以及由这些作用所引起的大分子的变化和构象改变,以及能量、电子和质子沿分子或在分子之间的传递等等来加以解决。

在无生物界中的问题可以用量子力学、统计物理、平衡以及非平衡热力学来解决。借助于量子力学,通常是研究一些理想的粒子体系的稳定态以及态在外部扰动影响下的改变,这种扰动系由外场的作用所引起,可由在哈密顿量(能量算符)上附加一相应于系统与外场间的相互作用能来作完全的描述。在这种情况下,系统的态称为“纯粹的”^[18],它由作为薛定谔方程的解的波函数来描述。

然而,在自然界中不存在完全的孤立系统。所有的实际系统都是一个大系统的一部分,它和这个大系统之间有相互作用。实际系统的状态不是由波函数来描述的,而是由考虑

了该系统与其周围环境的相互作用的统计算符或密度矩阵来描写。在这种情况下只能谈物理量的平均值。

如外部条件(温度,压强等)不变,则在经过一定的时间(叫弛豫时间)之后,就会建立该系统与周围介质间的热力学平衡。

在热力学平衡态下,表征系统的物理量的平均值是决定外部条件的参数的单值函数。对有化学反应在其中进行的生物系统来说,这些参数就是温度、压强、化学势和电化学势等等。

对于酶、结构蛋白、膜以及其他生物客体来说,如果我们感兴趣的态是对它们不做“功”,即当它们未受到(与弛豫时间相比而言)快速的作用时的态,则这种态接近平衡态。此时我们就可用平衡态的统计理论对它们的性质作很好的近似描述。

大家知道,与温度和压强保持不变的环境处于热平衡的系统,可以与环境交换粒子与能量,在体积改变时也会做功,其状态在统计物理中是由下述统计算符来确定的:

$$\rho = \exp \left\{ \frac{G - H + \mu \hat{N} - PV}{\Theta} \right\}, \quad \Theta = kT, \quad (2.1)$$

其中 k 为玻耳兹曼常数, T 为绝对温度, H 为系统的能量算符¹⁾, $\hat{N}$ 为粒子数算符, μ 为化学势, P 为压强, V 为系统的体积, G 为吉布斯热力学势或吉布斯自由能。

1) 在生物化学中能量通常用每摩尔千卡 (kcal, 1cal = 4.18J/mol) 来度量。每一千卡就是将一公斤水升高摄氏一度(从 14.5°C 升到 15.5°C) 时所需的能量。摩尔是物质质量的单位,其数值当以克来度量时为该物质的分子量。在物理中能量通常用电子伏特 (eV), 尔格 (erg) (1erg = 10⁻⁷J) 或厘米分之一 (cm⁻¹) 作单位。这几种能量单位的比例关系是:

$$1\text{eV} = 1.60 \times 10^{-19}\text{erg} = 8066.1\text{cm}^{-1} = 23.05\text{kcal/mol} \\ = 1.6 \times 10^{-13}\text{J},$$

由归一化条件

$$\text{Sp} \rho = 1 \quad (2.2)$$

可以求出吉布斯自由能的显示式:

$$G = -\Theta \ln \text{Sp} \left\{ \frac{\mu \hat{N} - H - PV}{\Theta} \right\}. \quad (2.3)$$

在(2.2)及(2.1)中符号 $\text{Sp} A$ (或 $\text{Tr} A$) 表示算符 A 的迹 (来自德文 *Spur*), 即它的矩阵的对角元之和. 于是, 更为详细地写出等式(2.2)和(2.3)就是

$$\sum_i \langle i | \rho | i \rangle = 1, \quad (2.2a)$$

$$G = -\Theta \ln Z, \quad (2.3a)$$

其中

$$Z = \sum_i \langle i | e^{\mu \hat{N} - H - PV} | i \rangle, \quad (2.4)$$

式中求和遍及系统所有可能的量子态 $|i\rangle$.

量 Z 叫做**状态和**(或配分函数). 它表征了系统的全部性质. 的确, 借助于(2.1)可算出能量 E 、粒子数 N 及体积 V 的平均值的表达式如下:

$$\begin{aligned} E &= \langle H \rangle = \text{Sp}(\rho H), \\ N &= \langle \hat{N} \rangle = \text{Sp}(\rho \hat{N}), \\ V &= \langle V \rangle = \text{Sp}(\rho V). \end{aligned} \quad (2.5)$$

利用(2.3)可将这些等式变换成如下的形式:

$$\begin{aligned} E &= -\Theta^2 \left[\frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\frac{G}{\Theta} \right) \right]_{P, \mu}; \quad N = - \left[\frac{\partial G}{\partial \mu} \right]_{P, \Theta}; \\ V &= \left[\frac{\partial G}{\partial P} \right]_{\mu, \Theta}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

这样一来, 为了计算能量、粒子数及体积的平均值, 只要计算出状态和(2.4)就可以了.

在统计理论中系统的熵由密度矩阵的自然对数的平均值乘以玻耳兹曼常数 k 来决定:

$$S = -k \langle \ln \rho \rangle = -k \text{Sp}(\rho \ln \rho). \quad (2.7)$$

在此等式中代入由 (2.1) 算得的 $\ln \rho$ 的值, 并考虑到有 (2.5) 式, 就可导出用能量、粒子数、体积的平均值和系统的熵表达的吉布斯自由能的著名热力学定义式:

$$G = E - TS - \mu N + PV. \quad (2.8)$$

对准静态过程, 即进行得充分缓慢, 以致所研究的系统在任何时刻都处于非常接近平衡态的过程, 在保持 T 、 μ 、 P 不变时吉布斯自由能的改变 ΔG 可由等式 (2.8) 来决定:

$$\Delta G = \Delta E - T\Delta S - \mu\Delta N + P\Delta V, \quad (2.9)$$

其中 ΔE 为系统内能的改变; $T\Delta S = Q$ 为由外部介质传给系统的热量; $P\Delta V$ 为系统在体积膨胀过程中所作的功; $-\mu\Delta N$ 为与系统的粒子数改变相连系着的功 (负号表示为了将粒子从系统传递给周围介质, 系统必须作正功)。

在研究生物系统时, 所有的广延参量, 即与系统的尺寸有关的变量 (如 E 、 G 、 S 、 V 等等), 通常都是对 1mol 的物质来讲的。因此在 (2.9) 中的 ΔG 、 ΔE 、 ΔS 、 ΔV 表示的是 1mol 所研究的系统的吉布斯自由能、内能、熵和体积的改变量, 而 ΔN 为其摩尔数的改变。如果这些改变量是在 25°C 的温度和一个标准大气压 ($P = 1\text{atm}$) 下完成的, 就叫做标准改变, 并用下标 0 来表示:

$$\Delta G_0, \Delta E_0, \Delta S_0, \Delta N_0.$$

在生物系统中所迁移的粒子常常不是中性粒子, 而是带电量为 eZ ($Z = \pm 1, \pm 2, \dots$) 的离子。这时粒子的转移就会伴随有电荷的转移。

如果由电势为 U_{BH} 的系统传递电量 Δq 给电势为 U_{CH} 的外界介质, 则系统将做功

$$\Delta W_0 = \Delta q(U_{CH} - U_{BH}). \quad (2.10)$$

如果考虑到 1mol 离子的电量等于 ZeN_0 ($N_0 = 6 \cdot 10^{23}$), 那末迁移 ΔN mol 时的电量就是 $\Delta q = \Delta N \cdot Z \cdot F$, 这里 $F = eN_0 = 96500$ 库仑, 叫做法拉第常数*. 这样一来, (2.10) 式就变为

$$\Delta W_0 = ZF(U_{CH} - U_{BH}) \cdot \Delta N.$$

将此式与迁移中性粒子时做功为 $-\mu\Delta N$ 相结合, 我们就得到迁移离子时功的一般表达式, 为

$$-\tilde{\mu} \cdot \Delta N, \quad (2.11)$$

其中

$$\tilde{\mu} = \mu + ZF(U_{BH} - U_{CH}) \quad (2.12)$$

叫做电化学势. 可见, 电化学势表征了将一摩尔的带电物质附加给系统时系统的吉布斯自由能的改变.

根据决定中性粒子系统在等温等压过程中吉布斯自由能改变的 (2.9), 可以得到带电粒子系统的相应表达式, 只要将其中的化学势 μ 换成电化学势 $\tilde{\mu}$ 就可以了. 因此带电粒子系统的吉布斯自由能的改变可以写成

$$\Delta G = \Delta E - T\Delta S - \tilde{\mu}\Delta N + P\Delta V. \quad (2.13)$$

考察在压强与温度保持不变的溶液中的离子系统, 它被一半透壁隔成两个子系统: 1 与 2. 当每一子系统离子数有改变时, 按照 (2.13), 吉布斯自由能的改变由下式决定

$$\Delta G = \sum_{\alpha} (\tilde{\mu}_{1\alpha}\Delta N_{1\alpha} + \tilde{\mu}_{2\alpha}\Delta N_{2\alpha}), \quad (2.14)$$

其中 $\tilde{\mu}_{1\alpha}$ 及 $\tilde{\mu}_{2\alpha}$ 为子系 1 与 2 中 α 型离子的电化学势.

在温度与压强保持不变的条件下, 吉布斯自由能在平衡态下取极小值, 因此必定有下式:

* 这里原文误为 $\Delta q = (U_{CH} - U_{BH})ZF$, 现改正. ——译者注

$$\sum_a (\tilde{\mu}_{1a} \Delta N_{1a} + \tilde{\mu}_{2a} \Delta N_{2a}) = 0. \quad (2.15)$$

如果在系统中未发生化学反应，则每一种离子数应守恒：
 $N_{1a} + N_{2a} = \text{常数}$ 。在这种情况下，等式(15)的成立要求有

$$\tilde{\mu}_{1a} = \tilde{\mu}_{2a}. \quad (2.16)$$

这样，由半透壁所隔开的两个子系间的平衡要求每一类离子在这两个子系中的电化学势相等。

所有上述关系既对平衡态成立，也对与弛豫时间相比来说是极其缓慢的过程成立，在此种过程进行的每一时刻，系统都可以看成是平衡的。

在研究生物系统时，必须考虑到它们的极大的不均匀性，和均匀系统不同，生物系统具有不只一个，而是多个弛豫时间。因此准平衡的概念是否可采用的问题应对每一个具体的过程进行个别的研究。

尽管实际过程进行的速度有一定的大小，但在对它们进行热力学描述时，必须假设它们进行得无限缓慢。我们这样做实际上是放弃了对事件作时间上的描述。自然，生物过程进行的速度以及这些过程之间的相互影响在任何生命现象中必定都有重要的作用。生物机体是一个非平衡的系统，而这个非平衡性是靠从外部输入能量与物质来维持的。

气体、液体和固体中的能量、动量、质量和电荷的迁移等非平衡过程是由非平衡过程统计热力学借助统计物理的方法来进行研究的。非平衡热力学是由于研究一系列热电现象的需要而产生的(昂萨格的工作, 1931)。由昂萨格及其他学者所发展的非平衡热力学的方法看来对研究各种迁移现象极为有用。利用非平衡热力学成功地描述了均匀介质中化学反应的动力学。生物系统中的非平衡态是在外界扰动对系统或其一部份的作用下(例如导致分子重新组合的化学反应, 电化学

势的改变等等)引起的。这种短时间的扰动产生了非平衡态,它们随后又将趋于平衡。

尽管已有很多工作讨论了是否可能将非平衡热力学的结果应用于生物学,但它们并未获得有实际意义的、重大的结果。基本的困难在于生物系统的空间非均匀性,使情况复杂化的第二个重要原因是由于在各种不同类型的反应与过程之间存在着反馈。

有时有人说,通常的热力学与统计物理不能应用于开放系统,而生物客体都是属于开放系统的范畴的。这是一个误解,困难不在于系统的“开放性”,而是在于它的“非均匀性”。统计物理所研究的是与外界一个大的系统之间有能量、粒子、电荷等等交换的小系统处于确定不变的条件(如温度、压强等等保持不变)下的平衡态。

吉布斯自由能 G 、内能 E 和熵 S 都是平衡态的函数。状态函数最重要的性质就是当系统由一个平衡态变化到另一个平衡态去时它们的改变与过程变化的途径无关。

一切生物分子和超分子结构都是在水介质中发挥其功能,所以它们与水介质的作用起着决定性的作用。因此,研究分子以及其他生物结构的化学变化应当,也必须考虑包围它们的水介质。换言之,谈分子和分子结构,我们总是理解为也包括了它们周围的水介质。

在估算化学反应的结果时,只要知道系统的初态和末态就可以了。如果这些态接近平衡态,则状态函数 (G 、 E 、 S 、 $\cdots$) 的改变就可用类似(2.8)的式子来表示,而与这些改变所经历的中间阶段如何无关。但在这种估算中,我们对变化的速度和现象发生的机制如何,什么也说不上来。

在生物机体中所进行的一切过程严格来说都属于不可逆过程,在此过程中,系统和环境的总熵总是会增加的,在达