

生物能量在生命体中传递的新理论及应用

庞小峰

(电子科技大学生命科学技术学院和生物电磁学与生物电子技术重点实验室)

成都 610054 pangxg@mail.sc.cninfo.net)

摘要: 生物能量在生物体当中的传递是生命科学其中的一个基本问题, 它相关于 ATP 水解放出的能量沿着蛋白质分子的传递。这种传递与蛋白质的动力学相关。根据 ATP 分子分布和水解的特性以及蛋白质结构的特点, 在 Davydov 理论的基础上提出了一个新的生物能量传递的理论。在这个理论当中, Amide 的振动的集体激发状态用一个两量子准相干态表示, 系统的哈密顿量不但包含了 Amide 振动引起的相邻氨基酸残基的位移, 而且包含了相邻 Amide 之间的共振相互作用所引起的氨基酸残基的相对位置的改变。由这个理论得出的传递生物能量的孤子的寿命可得 10^{-10} 秒, 在这个时间之内孤子能传递过上千个氨基酸残基, 因此它能在生物过程中起着重要的作用。这个理论与 E.coli 的 Raman 谱的实验结果和我们做出的胶原蛋白的红外吸收谱等实验结果相一致, 因此它可能是生物体中生物能量传递的一个的可利用的和正确的理论。

中国分图号: Q611

2000 年 11 月和 2001 年 2 月分别在: Phys Rev. E^[1]和 European phys. Journal B^[2]上用相当于中文 10 万字的两篇长论文发表了我提出新的生物能量传递的理论。在这两篇文章中对建立该理论的生物学和物理学基础, 理论内容及其相应结果, 传递生物能量的载流子—孤立子在生理温度时的热扰动, 量子涨落和结构无序及杂质浸染等影响下的热稳定性, 它的寿命及整个理论的正确性等等重要问题进行了全面、深细和严格地计算和论证。研究的结果表明, 这个孤立子在生理温度 300K 时是热稳定的, 其寿命高达 10^{-10} s。在这个时间内携带有生物能量的孤立子能传递过 500 个以上的氨基酸残基, 它对抗热扰动, 量子涨落, 结构无序和杂质的干扰等的影响也是非常坚强的。这标志着此生命孤立子是生物能量传递的候选者, 能在生命过程扮演重要角色。从而克服了早期不成熟的 Davydov 理论^[3]和其它理论的致命弱点, 使这一理论的可行性和重要性突现出来, 从而使它成为引人注目, 十分感兴趣的的新理论。毫不夸张地讲, 和以前关于生物能量传递的 Davydov 孤立子理论所发表的几百篇论文相比, 这两篇是最长、最系统和最全面论述此问题的学术论文。它是我近

20 多年来对此问题研究成果的结晶，也是在漫长研究生涯中我所发表的 100 多篇论文中最突出、最漂亮、最重要的研究成果。可以说，该新理论几乎使对此问题的研究逼近了尽头。对此，多个评论人员对这两篇论文和我本人给予了极高评价。在评论中称我为：“obviously a distinguish authority on soliton in molecular crystals”。为此我已被：“物理评论和物理评论通讯”（Physical Review and Physical Review Letters）聘请为评审成员。发表后，在国际上很快引起了人们的极大关注和重视，许多人来信索取论文和发表评论。可以估计该理论在生命科学中的重要意义和影响力随着时间的推移，会越来越明显地暴露出来。

那么，此理论为什么会引起人们如此极大的关注呢？它到底有何种作用及意义呢？要回答这些问题，我不得不从头开始来讲起。

何谓生命或生命活动呢？从生物物理的角度来讲^[3]，它就是生物能量、物质和信息的相互变化、协调和统一的过程。它们有组织、有秩序地综合运动和相互协调变化则是一切生命的基础。由现代科学得知，人和一切生命体时刻都不断地从外界吸收大量的物质、能量和信息，以维持生物自组织和耗散结构，即维持生命活动。因此，生物能量与信息的传输和转变则是生命活动的最基本、最主要的过程。人们常将物质、能量、信息讲成生命的三大要素。可以这样说，物质是生命的基础，能量是生命活动的中心，信息则是生命活动的关键。其生物信息的任何传递都是伴随生物能量的传递而进行的。于是，研究生物能量和生物信息在生命体中的传输的方式，特征和与引起的相关联的生物学过程便就成为生命科学中研究的一个中心问题。

但是生物能量是从何来呢？按生物学和生物化学的理论可知，每天饮进的物质包括食物、水、空气和吸收光，经过各种器官的作用变成人和生命体所需要的葡萄糖等物质。这些物质和吸收的光在细胞质内经过葡萄糖的有氧氧化和无氧氧化及糖酵解等生化过程，除释放一部分生物能量外，大量生成了细胞中的“货币”—ATP 分子（三磷酸腺苷）。再由 ATP 分子的水解为所释放的生物能量。（每次反应释放 0.43eV 的能量）为生命活动提供了所需要的能量，它们主要去供给肌肉收缩，神经信息脉冲传递，DNA 的复制，钙泵和钠泵等在正常工作时所需要的能量。在这种情况下，就存在能量要从 ATP 水解的地方传到所需要能量的地方的问题和相应过程。那么这些生物能量是以怎样的方式和由谁来传递到所需组织的呢？这是生命活动中的一个极其重要的问题。但以前一直是没有人关注它，所有的教科书都未提到它。其原因是这问题本身就十分复杂，很难用现存的生物学理论讲清。直到 20 世纪 70 年代，由于非线性科学和生命科学的迅速发展，工作在这个交叉领域的前苏联和美国，英国科学家注意到了此问题的重要性，马上给予全力研究。在 1973 年首先由前苏联科学家 Davydov^[3]及其同事提出一个崭新的生物能量传递的孤立子理论，他认为

ATP 水解过程所提供的能量可以引起蛋白质分子中的 amide-I(C=O 键)的振动激发,其振量子-激子(大约具有 0.205eV 或 1666cm^{-1} 的能量)同分子链的结构畸变(或低频声子)相互作用,“自陷”成的孤立子,携带生物能量从一个地方传递到另一处。这个孤立子和链的畸变一起携带能量和信息,沿分子链方向能传输过一段宏观距离后仍可以保持能量、动量、波形以及其他准粒子性不变。他用现代孤立子理论描述了在 α 螺旋蛋白质分子中所形成的生命孤立子的特点。并将该个系统的哈密顿量写成。

$$H = H_{ex} + H_{ph} + H_{int} = \sum_n [e_0 B_n^+ B_n - J(B_n B_{n+1}^+ + B_n^+ B_{n+1})] + \frac{1}{2M} P_n^2 + \frac{1}{2} b(u_n - u_{n-1})^2 + x(u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n \quad (1)$$

由 ATP 水解作用提供的能量而引起的蛋白质分子的集体激发状态用波函数

$$|\Phi\rangle = \left[\sum_n j_n(t) B_n^+ |0\rangle_{ex} \right] \{ \exp[\frac{1}{i\hbar} \sum_n (R_n(t) P_{na} - p_n(t) u_{na})] \} |0\rangle_{ph} \quad (2)$$

来表示。其中 ε_0 是一孤立的氨基酸残基中的 amide-I 振子的振动能量, M 是一个氨基酸残基的质量, J 是沿分子链上的两相邻分子间的偶极-偶极相互作用能, b 是氢键的弹性系数, c 是蛋白质中的元激发的激子-声子的耦合(EPC)常数,它表示了由于氢键变化一个单位时所引起的 amide-I 振子的振动频率的改变, B_n^+ 是激子的产生算符; u_n 和 P_n 是氨基酸残基的位置和动量算符。在(1)式中 $H_{ex} = \sum_n [e_0 B_n^+ B_n - J(B_n B_{n+1}^+ + B_n^+ B_{n+1})]$ 是 amide-I

的振动动能和偶极相互作用能, $H_{ph} = \sum_n [\frac{1}{2M} P_n^2 + \frac{1}{2} b(u_n - u_{n-1})^2]$ 是氨基酸残基的谐

振能量, $H_{int} = \sum_n x(u_n - u_{n-1}) B_n^+ B_n$ 是这两个运动模间的相互作用能。(2)式表示了激

子的单粒子激发和声子的相干激发的乘积组合的状态波矢。在连续性近似下,由(1)或(2)式便可得到一个非线性 Schrödinger 方程,可求得由激子通过与分子的位移耦合而自陷成的 Davydov 孤立子的表示式。它承担了传递生物能量和信息的任务。

孤立子在生命过程中是十分重要的概念,这是因为孤立子有保持能量、动量不变而运动过一个宏观距离的特性,从而使它能把所吸收的能量和信息无损耗地传递到生物组织中去。这种传递能量和信息的特性是生命体能正常生长的保障和必要条件。因为只有这样,生命体才能正确地接受信息和感觉、也才能对所有“刺激”作出正确的反应。因此生命活动需要孤立子,孤立子在生命活动过程中能起到不可替代的重要作用。就因为如此,

Davydov 的孤立子理论才引起了全世界的科学家们的广泛关注。在他提出此理论后的二十多年间, 上百以上的众多科学家如 Scott 等全面深入地研究了 this 理论^[4], 并将它用来解释肌肉收缩等多种生理现象, 获得了一定成功。理论的研究主要集中在两个方面: 一是 Davydov 理论的精确性; 二是 Davydov 孤立子的热稳定性和理论的实用性。因为所有生命物质包括蛋白质都是处在 300-310K 左右的温度范围内, 所以倍受关注的问题是在生理温度下 Davydov 孤立子是否稳定存在, 它的寿命是否足够到它能完成传递生物能量和信息任务, 这是 Davydov 理论能否存在的一个关键问题。Lomdahl 等人^[4]通过对 Davydov 方程附加一个涨落项和色散项的办法作数值计算表明, Davydov 孤立子在 300K 时的寿命太短而无法生存下去。Cottingham 等人^[4]用量子力学的微扰理论方法计算了 Davydov 孤立子在 300K 时的寿命仅有 $10^{-12}-10^{-13}$ s, 在这段时间内, 它只能走过不到十个氨基酸残基的距离, 从而失去了生物学意义, 因而无法承担传递生物能量与信息的功能。Wang 等人^[4]使用蒙特卡罗方法计算了 Davydov 孤立子在 300K 时是不能存在的。仅能在 10K 以下存在。所以它无多大生物学意义。在 1989 年在丹麦召开的专门讨论 Davydov 孤立子的国际会议上^[4], 代表们一致认为 Davydov 理论是一个十分粗糙和不完善的理论, 需要改进和发展。至此, 许多人提出了不同的改进, 包括 Brown 等人^[4]的全相干态理论, Schwizter 等人^[4]的多激子激发理论, Förner^[4]和 Hansson 等人^[4]的两量子态理论等等。但研究表明, 他们都是不适合于蛋白质分子而未能获得成功。

我们认真分析了 Davydov 理论弱点和蛋白质结构和集体激发的特点后, 认为它之所以不适合于生物蛋白质分子是因为这一理论是把 he 多年研究的一维分子系统的孤立子理论机械地移植到蛋白质分子中来造成的。生物大分子的蛋白质是不同于一般分子系统的, 它是一类生物自组织系统^[6]。其中它所具有的集体效应和相互相干特性非常重要。于是 1990 年在: “Journal of Physics, condensed matter 2: 9541^[5] 和 1994 年在 Physical Review E 49: 4747^[6] 上发表了 we 提出的振子模型。在这一理论中, 我们把 ATP 水解的能量引起的蛋白质分子的结构畸变和局域性涨落所对应的蛋白分子的哈密顿量用一个同氨基酸残基相互作用的振子模型来描述, 它是

$$\begin{aligned}
 H = & \left(\frac{1}{2m} \sum_n p_n^2 + \frac{1}{2} m w_0^2 \sum_n r_n^2 - \frac{1}{2} m w_1^2 \sum_n r_n r_{n+1} \right) + \left(\frac{1}{2} M \sum_n \omega_n^2 + \frac{b}{2} \sum_n (u_n - u_{n-1})^2 \right) \\
 & + \left(\frac{1}{2} m x_1 \sum_n (u_{n+1} - u_{n-1}) r_i^2 + \sum_n m x_2 (u_{n+1} - u_i) r_n r_{n+1} \right) \quad (3)
 \end{aligned}$$

对于相干性集体激发的蛋白质分子用如下的准相干态波函数来描述

$$\left| \Phi \right\rangle = \left| j_n \right\rangle \left| b_q \right\rangle = \left(\frac{1}{I} \left[1 + \sum_n j_n(t) B_n^+ \right] \right) \left| 0 \right\rangle_{ex} (\exp \{ \sum_{nq} [a_{nq}^*(t) a_{nq} - a_{nq}(t) a_{nq}^+] \}) \left| 0 \right\rangle_{ph} \quad (4)$$

这里 a_{nq} 是具有动量为 q 的声子的消灭算符，显然 (3) 或 (4) 式不同于 (1) 或 (2) 式。再采用新方法，可得出与 Davydov 理论迥然不同的结果。例如其孤立子的束缚能为 $12-36\text{cm}^{-1}$ ，但 Davydov 理论得到的孤立子能量为 1.3cm^{-1} ，与实验值几十 cm^{-1} 相差甚远。所得到的激子速度 $v_g=10^3\text{ms}^{-1}$ ，声速 v_{aq} 为 $5 \times 10^3\text{ms}^{-1} \leq v_{aq} \leq 10^4\text{ms}^{-1}$ ，与实验值 $(3.6-4.8) \times 10^3\text{ms}^{-1}$ 接近，但由 Davydov 理论得到的 $v_{aq}=100\text{ms}^{-1}$ ，与实验值相差较远。此理论求解的新孤立子运动产生的比热与实测值吻合。从而表明我们的理论中成功的，因此它被国外专家称为 Pang's 理论。以后我们又研究了这类新孤立子的温度效应，发现这类新孤立子的振幅虽随温度而改变，但仍是稳定的，其寿命可达 10^{-10} 秒左右，即这孤立子在其寿命时间内可传递过几百个氨基酸残基。因此它具有能传递生物能量的功能。我们还继续^[17-20]讨论了这类孤立子的量子特性，非线性振动对它的影响，超声速运动特征，自发辐射效应，拉曼散射以及穆斯堡尔效应等问题。在 1999 年和 2001 年我又在国际一级刊物 *European Physical Journal B* 12: 415^[7] 和 *Physica D*^[8] 杂志等上对这些问题进行了全面论证，都获得了较满意的结果，说明我们理论是正确的，是适合于蛋白质分子系统的。

最近两、三年我们又对原有的 Davydov 孤立子理论作了大胆的改变，正如在本文开始讲的，在 *Physical Review E* 和 *European Physical Journal B* 发表了两篇长文^[1-2]。我用准相干的两量子态代替了 Davydov 的单粒子激发态 (2) 式，其 (1) 式的哈密顿量加进了一个由激子的偶极-偶极相互作用引起的氨基酸残基的相对位移的变化的附加耦合相互作用项，即(1)-(2)式用以下两式代替

$$H = \sum_n [e_0 B_n^+ B_n - J(B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n)] + \left[\frac{1}{2} P_n^2 + \frac{1}{2} b(u_n - u_{n-1})^2 \right] + [c(u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n + c_1(u_{n+1} - u_n)(B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n)] \quad (5)$$

$$\left| \Phi \right\rangle = \frac{1}{I} \left[1 + \sum_n j_n(t) B_n^+ + \frac{1}{2} (\sum_n j_n B_n^+)^2 \right] \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \sum_n (R_n(t) P_n - p_n(t) u_n) \right\} \left| 0 \right\rangle \quad (6)$$

提出该理论的生物学基础是 ATP 水解释放的 0.43eV 的能量仅可以激发两个激子（每个激子的能量为 0.204eV ），其物理基础是自组织的蛋白质分子中的集体激发一定具有相干的特性，上述波函数 (6) 式中的声子部分和激子部分波函数都是具有相干特性的相干和

准相干的波函数，它们是对称即激子与声子的集体激发具有相同特征，不象 Davydov 波函数，后者的声子部分是相干的，但激子部分是单粒子激发态，明显不对称性，不符合蛋白质分子的实际。另外 (6) 式的激子部分仅是包含有 2 个激子的准相干态，它既不象 Brown 的全相干态理论，也不是 Schwitzer 等人的多量子理论（它们都是一个包含有无穷多个激子的标准相干态或单粒子激发态于是它们不能保持系统的粒子数守恒，于是不符合蛋白质分子的集体激发的特点）。但我们的波函数是对称的，又具有准相干的特性和仅包含了两个激子，满足粒子数守恒和 ATP 水解作用的特性的正确波函数。它的这些特点对孤立子的长寿命和理论的正确性起了决定性的作用。至此，由我们理论给出的非线性相互作用力大于 Davydov 理论的 3 倍多，孤立子的束缚能大于 Davydov 孤立子 42 倍，达 $7.8 \times 10^{-21} \text{J}$ ，大于热能 $KT=3.98 \times 10^{-21} \text{J}$ 。于是这孤立子不易被热微扰动而破坏，孤立子的平均寿命高达 10^{-10} 秒，在这段时间内孤立子能传递过 500 多个氨基酸残基。它在质量无序，杂质浸染等结构无序的影响下，由数值模拟得知它仍是稳定的。至此它是生物能量传递的真正载流子，于是使此理论获得了极大成功。可以这样讲，该理论是目前唯一能使生物能量传递问题圆满解决，并能给出满意结果的理论。

用以上理论我们解决了以后几个问题：

(1) 肌肉收缩的分子机理^[10]。长期以来，肌肉收缩的解释都是建立在肌纤维之间的横桥机制的宏观理论基础上的。运用上述新理论，可以用肌球蛋白中孤立子激发及其运动所造成的粗肌丝的畸变与极化效应产生相互作用来“拉动”细肌丝运动，引起了肌肉收缩。

(2) 由于该理论相关于蛋白质分子中的 amide (C=O 键伸缩振动) 的振动，其振动的频谱经我们计算是处在 $1 \mu\text{m}-7 \mu\text{m}$ 波长的红外光波程内，从而可用来成功地解释红外光的非热生物效应的机制及特性。这方面我们已在国际刊物上发表了多篇文章^[9,10]，详细阐明了这个问题引起了人们的关注。

(3) 电子在生命体的细胞中的迁移是电子与这个孤立子有一吸收相互作用，便可随孤立子运动而迁移。从而对电子在生命体中的迁移提出了一个新概念^[10]。

(4) 生物体的自发生物光子辐射。这是由于这个孤立子在蛋白质分子中产生时，引起了蛋白质分子中的原子的位移，再通过 Mossbauer 机制产生了生物光子的发射^[10]。

(5) 可用来解释蛋白质分子的红外吸收，Raman 散射效应和 Mossbauer 效应^[7-10]。这些效应都与孤立子的状态变化相关。从而可用它们来检验这个生命孤立子在蛋白质分子中的客观存在。

除了以上的理论分析和研究结果外，目前我们已完成了以上特性的计算机模拟，得到了满意的结果。现在我们详细的测验了胶原蛋白的红外吸收谱所得到了孤子的谱线，并且

由孤子所引起的谱线的红移的值以及孤子的谱线随温度变化的规律与上述理论的结果完全一致。我们还正在做其它的蛋白质的红外接收谱、Raman 散射和 Mossbauer 效应及直接测量其寿命等实验。我们想用这些实验来证明在蛋白质分子中所激发的孤立子的客观存在和上述新理论的正确性。如果成功，其意义太重大了。我们相信随着时间的推移，人们会对它的正确性和重要性作出合理的评判。由以上这些讨论使我们知道生物能量传递理论是生命科学中一个基本问题，应对它极大关注。

本文作者感激国家自然科学基金委的财政支持，基金编号 60241002。

参考文献：

1. Pang Xiao- Feng (Pang X.F). Phys.Rev.E, 2000,62:6989-6998
2. Pang X F. European Phys. J. B, 2001, 19:297-316
3. Davydov A S. Phys.Scr. 1979,20:387-389; Solitons in molecular systems. Dordrecht: Reidel Publishing Comp. , 1985.5-215
4. Christiansen P L, Scott A C. Davydov's soliton revisited. New York: Plenum Press, 1990.6-387
5. Pang X F. J.Phys.: Condensed Matter, 1990,2:9541-9543;
6. Pang X F. Phys. Rev.E, 1994,49:4747-4752; Pang X F. and ,Muller-Kersten J W J.Phys.: Condensed Matter,2000,12:885-906
7. Pang X F. European Phys.J.B, 1999,10:415-428
8. Pang X F. Physica D, 2001,154:138-158
9. Pang X F. Inter.J.Infrared Mill.Waves, 2001,22:257-276 and 277; The vibrational energy-spectra of the protein molecules and non-thermally biological effect of infrared light: Proc. 25th ICIR/MMW 2000,Bejing, 2000,166: the biological and effects of infrared rays. Proc. IEEE-EMBS APCBME-2000, Hangzhou, 2000,176;Proc. 2nd ICEMR- 2000,Xi'an 2000,86
10. Pang X.F. Quantum Mechanics in nonlinear systems, World Scientific Publishing Co. Singapore, 2004, p437-483;庞小峰，非线性量子理论，重庆：重庆出版社，1994，p233—293；庞小峰，孤子物理学，成都：四川科技出版社，2003，p485—524

*Author would like to acknowledge National Natural Science Foundation of China for financial support(Grant No:60241002)

New theory of bio-energy transport and its application in the life system

Pang Xiao-feng

Institute of Life Science and Key Laboratory of biophysics and bioelectronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, Sichuan, P.R.China.

Abstract: Bioenergy transport in the living systems is a basic problem for the life science. It is related to transport of the energy released in APT hydrolysis along the protein molecules, and is determined by dynamic properties of the protein molecules. According to the distribution of ATP molecules and its features of hydrolysis and structure properties of protein molecules we proposed a new theory of bioenergy transport in protein molecules based on Davydov model. In this new model we represented the collective excitation of vibrational quanta of amide-I by a two-quantum quasi-coherent wave function, both displacement of amino acid residues arising from the vibration of amide-I's and relative displacement of neighboring amino acids caused by resonant interaction between neighboring amides were taken into account in the new Hamiltonian. The lifetime of the new soliton transported the bioenergy obtained from this theory is about 10^{-10} second, in this time the soliton can move over more than one thousand of amino acid residues. This shows that the soliton is possibly a carrier of the bioenergy transport, and can play an important role in biological processes. The results obtained by this theory coincide with experimental data of E.Col.'s Ramma scattering and infrared absorption of collagen by us and others. Therefore, this theory is available and valuable in biology.