

# ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И РЕЗОНАНСЫ

*Позднеев С.А.*

Физический институт им.П.Н.Лебедева

*pozdnееv@sci.lebedev.ru*

*В настоящее время установлено [1-3], что природа химической связи определяется кулоновским взаимодействием между электронами, электронами и ядрами и никаких особых сил химического взаимодействия не существует. Это не означает, что теория химической связи разработана окончательно. Существует ряд нерешенных вопросов. Если за образование молекул из атомов ответственны дальнедействующие кулоновские силы, то почему химические взаимодействия проявляются главным образом на очень коротких расстояниях и каким образом возникает свойство насыщенности химических сил? Следующие вопросы возникают при исследовании химической связи молекулярных структур, таких как биополимеры, белки и т.д.[3,4].*

Представленные выше данные свидетельствуют о том, что процессы самоорганизации белка, биосинтеза и аналогичные процессы происходят при возникновении специфических динамических взаимодействий, не свойственных обычным парным статическим взаимодействиям типа кулоновского или Ван-дер-Вальсовского. Здесь уместно вспомнить слова А.А.Мигдала отметившего что "Красота науки не только и даже не столько в логической стройности, но в богатстве связей"

В современной физике достаточно много примеров подобных динамических взаимодействий. В качестве наглядных примеров можно привести поляризационное взаимодействие, которое возникает при взаимодействии заряженной частицы с нейтральным атомом, что приводит к прозрачности различных газов при определенной энергии налетающих электронов, эффект Ефимова в ядерной, атомной и молекулярной физике [5-7]. Это эффект состоит на том, что причиной существования одних резонансов является существование других. Эффект Ефимова [5] является одним из наиболее ярких и интересных характеристик системы нескольких тел в отличии от системы двух тел. Этот эффект возникает тогда, когда хотя бы в двух парных взаимодействиях трехчастичной системы появляются слабосвязанные состояния с близкой к нулю энергией связи. В этом случае в трехчастичной системе возникает взаимодействие пропорциональное  $1/R^2$ , ( $R=r_1+r_2+r_3$ ), что приводит к появлению слабосвязанных трехчастичных состояний, количество которых, в принципе м.б. и бесконечным, определяется выражением [5]  $N = \ln\{ (A/R_0) \}$ , где  $A$ ,  $R_0$  - длина рассеяния и эффективный радиус двухчастичной системы соответственно. Для описания этих состояний предлагается применить квантовую теорию рассеяния в системе нескольких тел, основанную на уравнениях Фаддеева-Якубовского [6,7]. Проведенные расчеты показали и экспериментальные результаты показали [], что подобные состояния возникают в таких системах как  $H_2^-$ ,  $He_3$ ,  $Ar_3$ ,  $Ne_3$ ,  $Kr_3$ ,  $Xe_3$ ,  $Li_3^-$ ,  $Cs_3^-$ - $He_2Li$ ,  $He_2Na$ , а также в более сложных системах, например, в молекулах белков. Следует отметить, что молекулярные кластеры, состоящие из атомов гелия, лития, ряда благородных газов, а также молекул биополимеров привлекают внимание как теоретиков, так и экспериментаторов, что связано в первую очередь с прикладными исследованиями (сверхтекучесть, сверхпроводимость, бозе-конденсация, лазерная

физика - возможность создания лазера на молекуле  $\text{He}_2^+$ , создание физиологически активных веществ с заранее заданными свойствами и т.д.), а также с реальной возможностью наблюдения такого этого необычного квантового эффекта в реальных многочастичных и многокомпонентных системах.

Большие возможностей для прямого экспериментального наблюдения этого эффекта представляет молекулярная биология, где представлены молекулы биополимеров состоящие из кластеров (доменов) связанных между собой достаточно малой энергией связи [1-4]. В случае сложных молекул необходимо отметить, что виртуальные уровни в парных подсистемах не приводят к возникновению эффекта Ефимова. Это однако не означает, что данный эффект отсутствует в этих системах, т.к. он может быть обусловлен не двухчастичными, а многочастичными виртуальными состояниями, а при использовании кластерного приближения - взаимодействием между кластерами. Таким образом возникающее специфическое взаимодействие пропорциональное,  $1/R^2$  является намного более сильным, чем первоначальное затравочное взаимодействие, и в этом случае во всей многочастичной системе возникает иерархия взаимодействий, когда чрезвычайно слабые взаимодействия приводят к более сильным. Подобная иерархия взаимодействий позволяет объяснить многие эксперименты со сложными физическими, химическими и биологическими системами, когда происходит структурная перестройка внутри этих объектов при чрезвычайно малых возмущениях. Именно это и указывает на существование принципиально новых механизмов структурообразования. Данные механизмы могут реализоваться в системах различной физической, химической и биологической природы, причем когда малое возмущение приводит к структурной перестройке системы сама структура будет нести явный отпечаток этих возмущений. Применение представленного метода для расчетов реальных молекул биополимеров в настоящее время связаны со многими трудностями, основные из которых следующие: - отсутствие надежных спектроскопических данных о кластерах; - отсутствие каких либо данных о потенциалах взаимодействия между этими кластерами в отличие от двухатомных и многоатомных молекул. Тем не менее представленные результаты расчетов наглядно показывают, что существует реальная возможность объяснения многих экспериментальных данных из области молекул биополимеров исходя их первых принципов квантовой механики. Кроме этого анализ геометрических конфигураций этих необычных состояний молекулярных систем показывает, что в подобных состояниях возникает выделенная степень свободы - в случае  $\text{He}_3$  это практически линейная конфигурация и таким образом именно по этой выделенной координате реализуется наиболее эффективным образом обмен энергии. Этот простейший пример показывает, что и в случае более сложных молекул, например белков, энергия сконцентрированная в области активного центра, передается также по выделенной координате [3-4]. Таким образом выделенная степень свободы оказывается связанной с координатой реакции, причем способы реализации этой связи могут быть совершенно различными.

## Литература

1. *Бутлеров А.М.* // Избранные работы по органической химии, М., АН СССР, 1951.
2. *Краснов К.С.* // Молекулы и химическая связь, М., Высш.шк., 1984.
3. *Финкельштейн А.В., Птицин О.Б.* // Физика белка: курс лекций., М.: Книжный дом "Университет", 2002, 376 с.
4. *Чернавский Д.С., Чернавская Н.М.* // Белок-машина биологические макромолекулярные конструкции, М., Янус-К, 1999, 256 с.
5. *Зефирова О.Н., Зефиров Н.С.* // Физиологические соединения, взаимодействующие с серотониновыми рецепторами, Успехи химии, 2001, т.70, с.382-407.
6. *Сент-Дьёрдьи А.* // Биоэлектроника. М.: Мир, 1971. 80 с.
7. *Блюменфельд Л.А.* // Проблемы биологической физики. М.: Наука, 1977, 336 с.
8. *Волькенштейн М.В.* // Биофизика. М.: Наука, 1988. 591 с.
9. *Скулачев В.П.* // Эволюция биологических механизмов запасаения энергии, Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 5. С. 11-19.
10. *Рубин А.Б.* // Биофизика. М.: Высш. шк., 1987. Т. 1. 320 с.; Т. 2. 303 с.
11. *Шайтан К.В.* // Молекуляр. биология. 1992. Т. 26. С. 264-284; 1994. Т. 28. С. 670-678.
12. *Efimov V. Nucl.// Phys.*, A362, 45, 1981; A378, 581, 1982; *Phys.Rev.*, C47, 1876, 1993.
13. *Vugalter S.A., Zislin G.M.* // *Dokl AN USSR*, 1982, v.267, p.784.
14. *Ефимов В.* // Влияние резонансов в парных силах на спектр уровней трех частиц, М., МИФИ, 1973.
15. *Ребане Т.К.* // Динамическое притяжение невзаимодействующих частиц. Мюонный атом дейтерия, ЯФ, т.61, № 1, с.61-65, 1998.
16. *Faddeev L.D., Merkuriev S.P* // *Quantum scattering theory for several particles systems*, Kluwer, London, 1993.
17. *Позднеев С.А.* // Применение квантовой теории рассеяния в системе трех тел для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, М., Янус-К, 2001, 412 с.
18. *Позднеев С.А.* // Применение трехчастичного приближения для исследования эффекта Ефимова в молекулярных системах, Краткие сообщения по физике, М, № 4Б с.19-33.
19. *Motovilov A.K., Kalganova E.A Sofianos S.A.* // *J.Phys.B: At.Mol.Phys.*, v.31, 1279; 1998.