

- [49] Lis, H. et al.: *Antigen*, 4, 429, 1977.
- [50] Wu, L. Y. F. et al.: *J. Clin. Invest.*, 52, 3180, 1973.
- [51] Andersson, J. et al.: *Cell Immunol.*, 4, 381, 1972.
- [52] Andersson, J. et al.: *Eur. J. Immunol.*, 2, 233, 1972; 2, 99, 1972.
- [53] Bessler, W. et al.: *BBRC.*, 69, 578, 1976.
- [54] Krant, H. et al.: *Protides Biol. Fluids*, 27th. p. 619, 1979.
- [55] Schumann, G. et al.: *Int. Arch. Allergy Apply. Immunol.*, 45, 331, 1973.
- [56] Schechter, B. et al.: *Eur. J. Immunol.*, 6, 145, 1976.
- [57] Prujansky, A. et al.: *BBA.*, 508, 137, 1978.
- [58] Королев, Н. П.: *усп. Соврем. Биол.*, 86, 463, 1978.
- [59] Lotan, R. et al.: *JBC.*, 250, 8518, 1975.
- [60] Moretta, L. J. et al.: *J. Exp. Med.*, 146, 184, 1977.
- [61] Moretta, L. J. et al.: *J. Immunol.*, 117, 2127, 1976.
- [62] Rosenstreich, D. L. et al.: *ibid*, 116, 131, 1976.
- [63] Pierce, C. W. Kapp, J. A.: *Fed. Proc.*, 27, 86, 1978.
- [64] Horton, J. E. et al.: *J. Immunol.*, 113, 1278, 1974.
- [65] Reisner, Y.: *Trends. Biochem. Sci.*, 5, 29, 1980.
- [66] Saltvedt, E. et al.: *Scand. J. Immunol.*, 4, 287, 1975.

[本文于 1980 年 11 月 17 日收到]

环状 DNA 的振动能

周 国 平

(中国科学院上海细胞生物学研究所)

DNA 是以特异的核苷酸碱基序列携带着各种遗传信息的生物大分子。它具有棒状和环状两种不同的形状。前者存在于动物和植物的真核细胞内,后者则主要处在细菌(如大肠杆菌)和病毒的原核细胞内。不论是棒状分子还是环状分子,它们的双螺旋结构模式都统一体现在 Watson Crick 模型中^[1]。而且,它们在溶液中的动力学性质也是一样的^[2]。即在标准热能影响下,它们在溶液中会发生伸展、弯曲、剪切等一系列复合运动。从这样一幅物理图景中可看到,这种复合运动的能源就是振动能。振动能是溶液中的 DNA 聚合物以声子能的方式,从溶剂分子对该聚合物的碰撞中所获取到的一种能量。

Sobell 通过一维棒状弹性体模型分析了在溶液状态的棒状 DNA 聚合物中出现波的传播时,可塑性不同的两个区域之间振动能的分布情况^[3]。他假定了聚合物在这两个区域的密度是均等的,从而证明在可塑性大的区域的振动能(Sobell 用平均能量密度(W)来描述)比可塑性小的区域的振动能大。并指出这一结论与波从那一区域发源无关。那么对于环状 DNA 聚

合物来说,是否也有以上的结论呢?为了回答这一问题,我们把环状 DNA 聚合物模拟成一个圆环形的弹性体,来对之进行数学物理处理,由此而得到的结果和 Sobell 的结果完全一致。此外,我们还定性地描述了密度和可塑性都不相同的两个区域之间振动能的分布情况。

一、圆环形弹性体模型的建立

1. 由 Watson-Crick 模型知道 DNA 分子双螺旋体的直径恒等于 $20 \text{ \AA}$ 。所以,我们可以把整个 DNA 聚合物的粗细看作是均匀的。

2. 考虑到在 DNA 大分子中,A-T 碱基对富集区和 G-C 碱基对富集区的分子量不相等^[4],所以整个 DNA 聚合物的密度显然是不均匀的。

3. 根据 DNA 大分子在溶液中的动力学结构特性,以及 A-T 碱基对和 G-C 碱基对之间堆聚的能量有显著的差异^[4],说明整个 DNA 聚合物上的可塑性是不一致的。在本文的数学处理中,将引入物理学中的弹性模量 E 来描述聚合物的可塑性。

4. 在某些溶液中的悬浮粒子会受到溶剂分

子的碰撞。根据 Einstein 理论, 如果悬浮粒子的尺寸小于 10^{-4}cm , 那么从微观的角度看, 这些悬浮粒子将明显地受到 Brownian 力的作用^[5]。由于环状 DNA 的结构基因区的几何尺寸远小于 10^{-4}cm , 因此在溶液中的环状 DNA 聚合物总是不断地受到 Brownian 力的作用。

基于上述考虑, 我们建立的一个环状 DNA 聚合物的物理模型是一个粗细均匀、密度和可塑性非均衡的圆环形弹性体。由于圆环的截面是一个直径为 $20\text{\AA}$ 的圆, 并且比整个环状 DNA 的周长小许多个数量级, 因而在数学分析中, 可以把环状 DNA 作为一个半径是 r 的圆

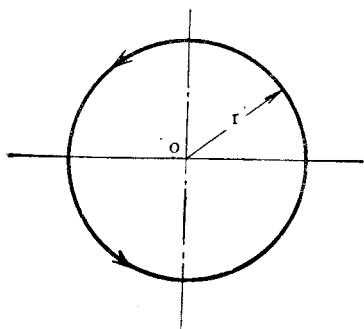


图1 在圆环形 DNA 聚合物中, 波按逆时针方向由区域 I 传向区域 II
区域 I (上半圆环): (E_1, ρ_1)
区域 II (下半圆环): (E_2, ρ_2)

来处理(图1)。

这个 DNA 弹性圆环一进入溶液状态, 就受到溶剂分子的碰撞。每次碰撞引起的振动就能产生一个波谱。根据弹性介质中波的传播理论, 只要这种波谱的频率大于阻尼系数时, 波才能沿着环状 DNA 聚合物传播。

二、数学物理处理

描述该聚合物在粘滞介质中的波动方程^[6]是:

$$\rho(\theta) \frac{\partial^2 u(\theta, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left[E(\theta) \frac{\partial u(\theta, t)}{\partial \theta} \right] - \eta \frac{\partial u(\theta, t)}{\partial t} + f(\theta, t) \quad (1)$$

(1)式中, $u(\theta, t)$ 为聚合物关于时间 t 和圆环在极坐标中为 θ 极角的位移函数; $\rho(\theta)$ 为聚合物关于极角 θ 的密度函数; $E(\theta)$ 为聚合物关

于极角 θ 的弹性模量函数; η 为粘滞阻尼; $f(\theta, t)$ 为聚合物在 t 时刻和 θ 位置处受到溶剂分子撞击后所激发的内力。

为了便于研究, 我们把这个圆状环 DNA 弹性体分为上半圆 I 和下半圆 II 两个区域。设区域 I 的密度和弹性模量分别为 ρ_1 和 E_1 ; 而区域 II 的则分别相应为 ρ_2 和 E_2 。

当圆环状 DNA 弹性体一进入溶液中, 在 $t=0$ 时刻便受到某个溶剂分子一次脉冲式的碰撞, 在无阻尼的情况下, 波开始沿着圆环传播。此时(1)式可写成

$$\frac{\partial^2 u(\theta, t)}{\partial t^2} = \frac{a^2}{r^2} \frac{\partial^2 (\theta, t)}{\partial \theta^2} \quad (2)$$

式中, 令 $a^2 = \frac{E}{\rho}$ 。

如果溶剂分子对 DNA 弹性体的碰撞所激起的波以逆时针方向从区域 I 传向区域 II, 并考虑到区域 I 中明显地出现反射波, 那么(2)式的解是:

$$\begin{cases} u_1(\theta, t) = A_1 \cos(W_1 t - J_1 \theta) \\ \quad + B_1 \cos(W_1 t + J_1 \theta) \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} u_2(\theta, t) = A_2 \cos(W_2 t - J_2 \theta) \\ \quad + 2\pi J_2 \end{cases} \quad (4)$$

以上两式中, A_1 、 B_1 和 A_2 表示系数; W 表示角频率; 并设 $J = \frac{Wr}{a}$ 。

(2)式的边界条件为:

$$u_1(0, t) = u_2(2\pi, t) \quad (5)$$

$$u_1(\pi, t) = u_2(\pi, t) \quad (6)^*$$

$$E_1 \frac{\partial u_1(0, t)}{\partial \theta} = E_2 \frac{\partial u_2(2\pi, t)}{\partial \theta} \quad (7)$$

$$E_1 \frac{\partial u_1(\pi, t)}{\partial \theta} = E_2 \frac{\partial u_2(\pi, t)}{\partial \theta} \quad (8)^*$$

利用(5)和(7)式, 解得 $\omega_1 = \omega_2$ 及

$$A_2 = \frac{2\sqrt{\rho_1 E_1} A_1}{\sqrt{\rho_1 E_1} + \sqrt{\rho_2 E_2}} \quad (9)$$

* (2) 式的解必须由边界条件和初始条件才能唯一地加以确定。但在本文中, 并没利用 (6) 和 (8) 式, 因为我们的目的不是为了求出方程的具体解, 而是讨论与方程的解有关的物理性质, 而对这些性质的讨论是不需涉及到(6)和(8)式。

$$B_1 = \frac{\sqrt{\rho_1 E_1} - \sqrt{\rho_2 E_2}}{\sqrt{\rho_1 E_1} + \sqrt{\rho_2 E_2}} A_1 \quad (10)$$

算出(3)式的 $\frac{\partial u_1}{\partial \theta}$ 和 $\frac{\partial u_1}{\partial t}$, 再代入能量密度公式:

$$W = \frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \frac{E}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \quad (11)$$

解得区域 I 中的振动能的能量密度:

$$\begin{aligned} W_1 = & \frac{W^2 b A_1^2}{\partial} (1 + r^2) \sin^2(\omega t - J_1 \theta) \\ & + \frac{\rho_1 \omega^2 B_1^2}{\partial} (1 + r^2) \sin^2(\omega t + J_1 \theta) \\ & + \rho_1 A_1 B_1 \omega^2 (1 - r^2) \sin(\omega t - J_1 \theta) \sin(\omega t + J_1 \theta) \end{aligned} \quad (12)$$

在上式中对时间取平均值, 并利用(1)式的初始条件

$$u_1(\theta, 0) = u_2(\theta, 0) = 0, ** \text{得}$$

$$\langle W_1 \rangle = \frac{\omega^2 A_1 \rho_1 (r^2 \rho_1 E_1 + \rho_2 E_2)}{(\sqrt{\rho_1 E_1} + \sqrt{\rho_2 E_2})^2} \quad (13)$$

同理, 求得区域 II 的平均能量密度

$$\langle W_2 \rangle = \frac{\rho_2 \omega^2 (1 + r^2) A_1^2 \rho_1 E_1}{(\sqrt{\rho_1 E_1} + \sqrt{\rho_2 E_2})^2} \quad (14)$$

从而得

$$\frac{\langle W_1 \rangle}{\langle W_2 \rangle} = \frac{r^2 \rho_1 E_1 + \rho_2 E_2}{\rho_2 E_1 (1 + r^2)} \quad (15)$$

现考察如下不等式:

$$\frac{r^2 \rho_1 E_1 + \rho_2 E_2}{\rho_2 E_1 (1 + r^2)} > 1 \quad (16)$$

- 1) 若 $\rho_1 = \rho_2$, 只要 $E_2 > E_1$, 则 $\langle W_1 \rangle$ 大于 $\langle W_2 \rangle$;
- 2) 若 $E_1 = E_2$, 只要 $\rho_1 > \rho_2$, 则 $\langle W_1 \rangle$ 大于 $\langle W_2 \rangle$;
- 3) 若 $\rho_1 \neq \rho_2$, 且 $E_1 \neq E_2$, 只要服从(16)式, 则 $\langle W_1 \rangle$ 大于 $\langle W_2 \rangle$ 。

如果所描述的波是从区域 II 以顺时针方向传向区域 I, 并考虑到区域 II 中明显地出现反射波, 那么(2)式的解为

$$u_1(\theta, t) = A'_1 \cos(\omega'_1 t - J'_1 \theta - 2\pi J'_1) \quad (17)$$

$$\begin{aligned} u_2(\theta, t) = & A'_2 \cos(\omega'_2 t - J'_2 \theta) \\ & + B'_2 \cos(\omega'_2 t + J'_2 \theta) \end{aligned} \quad (18)$$

经过与以上同样的运算步骤, 得到

$$\frac{\langle W'_1 \rangle}{\langle W'_2 \rangle} = \frac{\rho_1 E_2 (1 + r^2)}{\rho_2 E_2 r^2 + \rho_1 E_1} \quad (19)$$

现考察不等式

$$\frac{\rho_1 E_2 (1 + r^2)}{\rho_2 E_2 r^2 + \rho_1 E_1} > 1 \quad (20)$$

- 1) 若 $\rho_1 = \rho_2$, 只要 $E_2 > E_1$, 则 $\langle W'_1 \rangle$ 大于 $\langle W'_2 \rangle$;
- 2) 若 $E_1 = E_2$, 只要 $\rho_1 > \rho_2$, 则 $\langle W'_1 \rangle$ 大于 $\langle W'_2 \rangle$;
- 3) 若 $\rho_1 \neq \rho_2$, 且 $E_1 \neq E_2$, 只要服从(24)式, 则 $\langle W'_1 \rangle$ 大于 $\langle W'_2 \rangle$ 。

根据以上数学分析, 我们得到如下结论:

1. 在半径为 r 的圆环形 DNA 聚合物中, 如果两个区域的密度相等, 那么其中可塑性(即 E 值小)大的区域所具有的平均能量密度(或振动能)大于可塑性小的区域的平均能量密度。

2. 在同一个圆环形 DNA 聚合物中, 若两区域的可塑性相同, 那么其中密度大的区域的振动能大于密度小的区域的振动能。

3. 上述两点既与圆环的直径无关, 也与波沿着 DNA 聚合物传播的方向无关。

三、讨 论

当波沿着环状 DNA 聚合物传播时, 振动能也分布在该聚合物上。由于 A-T 碱基对的分子量与 G-C 碱基对的分子量仅相差 0.4%, 它们的克分子体积接近相等, 所以实际工作中往往认为整个 DNA 分子上的密度处处相等。但是, 如上所述, 不同的碱基对之间所堆积的能量是显著地不同, 这一点反映在 DNA 分子中 A-T 碱基对丰富区的可塑性比 G-C 碱基对丰富区的大^[4]。所以根据前述的结论, 就知道分布在 A-T 碱基对丰富区的振动能总比分布在 G-C 碱基对的大。

应该看到, 波沿着 DNA 聚合物传播时, 受到粘滞阻尼的影响, 因此必有一部分振动能以热的形式耗散到周围溶液中。这种能量消耗的

** 在数学处理中, 这个初始条件似乎缺乏广泛性, 但它符合实际情况, 因此利用它在实际研究中得出的结果是有普遍意义的。

平均速率是

$$\frac{d\langle W \rangle}{dt} = \left\langle Q_d \frac{\partial u_d(\theta, t)}{\partial t} \right\rangle \quad (21)$$

式中 $\frac{d\langle W \rangle}{dt}$ 表示平均能量密度消耗速率; Q_d 表示粘滞力; $u_d(\theta, t)$ 表示在有阻尼情况下(1)式的解。

显然,从(21)式可引出又一个与 Sobell^[3]同样的结论:在环状 DNA 聚合物中,可塑性大的区域的振动能的消耗率也大。

四、结 语

对于密度处处均等可塑性不均衡的 DNA 聚合物,较多的振动能分布在可塑性大的区域中;对于可塑性均衡而密度不均等的聚合物来说,较多的振动能分布在密度大的区域中。而且可塑性大的区域中振动能的消耗速率也大。上述结论既适用于棒状 DNA 大分子,也适用环状双螺旋 DNA 大分子。利用本文的数学表达式,我们能进一步掌握处于溶液状态的环状 DNA

聚合物中振动能分布的基本规律。当然,我们从棒状 DNA 大分子的情况推知,在环状 DNA 聚合物中振动能最大的区域乃是 DNA 的 β 绞结区、DNA 的预溶区和启动基因区^[3]。这些认识对我们进一步了解 DNA 的复制、RNA 的转录、基因重组、DNA 与其它药物的相互作用及 DNA 的构象变化的规律具有深刻意义。

中国科学院上海细胞生物研究所谢世栋、上海计算技术研究所李子才、上海师范学院冯承天、中国科学院上海生理研究所张星岳等对本文提供了宝贵的意见,特此致谢。

参 考 文 献

- [1] J. D. Watson, et al.: *Nature* 171, 737, 1953.
- [2] J. D. McGhee, et al.: *Biochemistry* 16, 3267, 3276, 1977.
- [3] H. M. Sobell, et al.: *Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.* 43, 11, 1978.
- [4] P. N. Borer, et al.: *J. Mol. Biol.* 86, 843, 1974.
- [5] A. Einstein, *ZS. Electrochem.* 14, 235, 1908.
- [6] 郭敦仁:《数学物理方法》,第十二章,人民教育出版社,第四版,1978。

[本文于 1980 年 10 月 28 日收到]

Eigen 学派自组织理论简介*

刘 为 民

(上海生物化学研究所)

西德科学家 Manfred Eigen 教授及其共同工作者认为生命的起源和进化可以分为三个阶段^[1,2]:一是化学进化阶段。这一阶段中产生了氨基酸、核苷酸等有机分子,并可随机地合成蛋白质、核酸等大分子;二是分子自组织的阶段;三是生物学进化阶段。在这一阶段中原始的单细胞系统逐步进化到复杂的、高度组织起来的多细胞系统。Eigen 学派主要研究第二阶段。他们认为在生物种的 Darwin 进化之前,有一个类似的逐步的分子进化过程,这个过程导致采用普适密码的统一的细胞机构。普适密码的建立,并不因为它它是唯一的抉择,而是因为超循环组织具有所谓“一旦建立就永存下去 (once

forever)”的选择机制(值得注意的是最近 Barrell 等报道^[3],人线粒体中的密码与普适密码有些差别)。催化的超循环是能够积累、保持和处理遗传信息的大分子组织的最低要求。从数学模型上看,超循环是一类独特的非线性网络,目前主要采用高维相空间中的不动点分析和数值模拟等方法。

一、什么是超循环

在一个反应序列中,如果任何一步的某一产物是先前某一步的反应物,则这样的系统就

* 本文曾在 1981 年生物物理学会主办的自组织现象座谈会上报告过。