

ОРТО- ПАРА- ВОДА И ГИДРАТАЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Дроздов А.В.

Институт аналитического приборостроения РАН
198103, Россия, Санкт-Петербург, Рижский пр-т д.26, E-mail: av@biophys.ru

В классической механике одинаковые частицы (например протоны), несмотря на тождественность их физических свойств, не теряют своей «индивидуальности». Действительно, если следить за движением частиц по каждой из своих траекторий, то в любой момент времени частицы можно идентифицировать.

В квантовой же механике положение совершенно меняется. В силу *принципа неопределенности* понятие траектории полностью теряет смысл. Можно сказать, что в квантовой механике одинаковые частицы полностью теряют свою «индивидуальность». Одинаковость частиц по их физическим свойствам приводит к их полной неразличимости. *Принцип неразличимости* одинаковых частиц играет одну из основных ролей при квантовомеханическом исследовании систем, состоящих из одинаковых частиц. В связи с этим принципом, для системы, состоящей из двух и более одинаковых частиц, имеется всего две возможности: волновая функция всей системы либо симметрична, либо антисимметрична.

Применение *принципа неразличимости* к молекуле H_2O приводит к тому, что молекулы воды должны быть разделены на два вида отличающихся друг от друга ориентировкой спинов протонов и ротационными квантовыми числами всей молекулы. Молекулы воды, в которых ядерные магниты антипараллельны ($\uparrow\downarrow$) называются *пара- H_2O* . Молекулы при этом могут иметь только четные ротационные квантовые числа (0, 2, 4...). У *орто- H_2O* ядерные магниты параллельны ($\uparrow\uparrow$) и ротационные квантовые числа могут принимать только нечетные значения (1, 3, 5...).

В то время, как несимметрично построенная молекула, например HCl , свободно может из состояния вращения с четным квантовым числом перейти к вращению с нечетным, у молекулы, построенной из одинаковых ядер, как например H_2O , подобный переход спонтанно не происходит. Взаимная связь между ориентировкой ядерных спинов и ротационными квантовыми числами, а также запрещение перехода *орто*↔*пара* (спиновая конверсия) вытекают непосредственно из квантовой механики.

Различие между *пара- H_2O* и *орто- H_2O* не сводится только к обозначению определенной внутренней структуры, а в результате запрета перехода *пара- H_2O* ↔ *орто- H_2O* указывает на существование двух, во многих отношениях отличных и практически не комбинирующие друг с другом, типов молекул.

Одним из основных различий между *пара*- и *орто*- спин-изомерами воды является то, что у первой есть состояние, в котором молекула не вращается (ротационное квантовое число равно нулю). В то время как у *орто*- - такого состояния нет, она всегда «крутится» подобно юле. Это различие приводит к тому, что у разных спиновых изомеров воды разная степень адсорбции на поверхности. *Пара- H_2O* может участвовать в образовании структур посредством водородных связей (в частности льдоподобные структуры), в то время как у *орто- H_2O* образование связей возможно только за счет электростатических сил – ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Так например, давно обсуждаемое биологами [1] отличие связанной, внутриклеточной воды от обычного водно-солевого раствора, может быть объяснено с позиций *пара- H_2O* и *орто- H_2O* .

С другой стороны, хорошо известно, что биологическая активность биоструктур во многом определяется степенью их гидратации. Можно предположить, что изменение соотношения *орто*-/*пара*- воды, входящей в биологическую систему, должно приводить к изменению степени гидратации биоструктур, а это, в свою очередь, - к изменению их биологической активности. Таким образом, стимуляция процессы спиновой конверсии *пара- H_2O* ↔ *орто- H_2O* должна приводить к изменению масштабов биологических процессов, ускоряя или замедляя их.

ORTHO- PARA H_2O AND HYDRATION OF BIO MOLECULES

A.V.Drozдов

Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences, 190103, Russia,
St.Petersburg, Rizhsky Pr. 26, E-mail: av@biophys.ru

Литература

1. Pollack, G.H.: Cells, Gels and the Engines of Life: A New, Unifying Approach to Cell Function. Ebner & Sons, 2001