

# 激光诱变遗传的共振激发及 非线性作用机理分析\*

张玲琪<sup>1</sup> 陈有为<sup>2</sup> 周凌云<sup>3</sup> 魏蓉城<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 云南大学生物系 <sup>2</sup> 云南大学省微生物研究所 昆明 650091

<sup>3</sup> 昆明理工大学非线性科学研究中心 昆明 650093)

**提要** 用量子力学及非线性科学理论,研究了激光与脱氧核糖核酸(DNA)分子相互作用的共振吸收效应及混沌性质,进而对激光的生物诱变效应予以解释。

**关键词** 激光-DNA, 共振吸收, 混沌, 诱变

## 1 激光-DNA 相互作用的共振吸收效应分析

众所周知,脱氧核糖核酸(DNA)是遗传信息的载体。而 DNA 的碱基互补又是 DNA 复制、转录及反转录等的分子基础。由碱基互补的原则可知,碱基上的氢原子应具有较固定的位置(至多能在某固定小区域内振动),这样才能保证碱基互补(A-T, G-C),否则将导致 DNA 复制时的变化,而使遗传变异。鉴于此,本文主要探讨激光对 DNA 氢键中氢原子的作用。按氢键的 Cooper 模型<sup>[1]</sup>(N-H...O 或 N-H...N),其原子的运动状态可视为一双原子振子和远端原子的叠加,故可将其 H 之运动看作非谐振子,按 Morse 非势

$$V(r) = V_0[1 - e^{-\alpha(r-r_0)}]^2$$

将其展开并保留其三及四次方项,即为

$$V(r) = V_0\alpha^2(r-r_0)^2 - V_0\alpha^3(r-r_0)^3 + \frac{V_0\alpha^4}{4}(r-r_0)^4$$

取振子的平衡位置  $r_0 = 0$ , 并令  $r = x$ ,  $V_0\alpha^2 = k_0/2$ ,  $V_0\alpha^3 = k_1$  及  $V_0\alpha^4/4 = k_2$ 。在一维情况下,此势即可书写为

$$V(x) = \frac{1}{2}k_0x^2 - k_1x^3 + k_2x^4$$

$k_0$  取作  $m\omega_0^2$ , 即将此振子的哈密顿量写作

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

将之量子化,取

$$\hat{x} = \left[ \frac{\hbar}{2m\omega_0} \right]^{1/2} (a + a^\dagger), \quad \hat{p} = i \left[ \frac{m\omega_0\hbar}{2} \right]^{1/2} (a^\dagger - a)$$

\* 国家自然科学基金(39460025)和云南省科学基金资助项目。

对易关系为

$$[a^+, a] = 1, [a, a^{+n}] = na^{+(n-1)}, [a^+, a^n] = -na^{n-1}$$

则上述哈密顿量的量子化形式可书写为

$$\hat{H}_0 = h\omega_0 a^+ a - k_3(a^+ + a)^3 + k_4(a^+ + a)^4 \quad (1)$$

为便于构造  $\xi$  代数将上式展开, 并按 Wick 编序, 仅留三次方项中的  $(a^+ + a)$ , 四次方项中的  $(a^{+2} + a^2 + 2a^+ a)$ , 此振子的哈密顿算符即为

$$\hat{H}_0 = h\omega_1 a^+ a - h\omega_2(a^+ + a)h\omega_3(a^{+2} + a^2) \quad (2)$$

其中  $\omega_1 = \omega_0 + 12k_0/h$ ,  $\omega_2 = 3k_3$ ,  $\omega_3 = 6k_4/h$ 。这里的  $a, a^+, a^2, a^{+2}$  及恒等算符 I 构成  $\xi$  代数,  $[a, a^+] = 1, [a, a^+ a] = a, [a, a^{+2}] = 2a^+, [a^+, a^+ a] = -a^+, [a^+, a^2] = -2a, [a^{+2}, a^+ a] = -2a^{+2}, [a^2, a^+ a] = 2a^2, [a^2, a^{+2}] = 2 + 4a^+ a$ 。此氢键非谐振子在激光作用下之相互作用势(在旋波近似下)为

$$V_1 = h\omega_R [a^+ \exp(-i\Omega t) + a \exp(i\Omega t)] \quad (3)$$

$\Omega$  为激光频率,  $\omega_R$  为 Rabi 频率。如此, 激光-DNA 相互作用系统的总哈密顿量为

$$H = H_0 + V_1 = \eta_1 a^+ a + \eta_2 a^+ + \eta_2 a + \eta_3(a^{+2} + a^2) \quad (4)$$

$\eta_1 = h\omega_1, \eta_2 = h[\omega_R \exp(-i\Omega t) - \omega_2], \eta_3 = h\omega_3$ ; 按量子力学算符的时间演化方程可得

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle K \rangle = \frac{i}{h} \langle [H, K] \rangle \quad (5)$$

由  $a^+, a, a^+ a, a^{+2}, a^2$  和恒等算符 I 的对易关系的  $\xi$  代数及(4), (5), 可得下述方程组

$$\frac{\partial}{\partial t} [K] = \frac{i}{h} [K] \cdot [\zeta] \quad (6)$$

$[K]$  为一行六列矩阵:  $[K] = [I \langle a^+ + a \rangle \langle a^+ \rangle \langle a \rangle \langle a^{+2} \rangle \langle a^2 \rangle]$ ; 而  $[\zeta]$  为六阶方阵

$$[\zeta] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \eta_2 & -\eta_2 & 2\eta_3 & -2\eta_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4\eta_3 & -4\eta_3 \\ 0 & -\eta_2 & \eta_1 & -2\eta_3 & 2\eta_2 & 0 \\ 0 & -\eta_2 & 2\eta_3 & -\eta_1 & 0 & -2\eta_2 \\ 0 & -\eta_3 & 0 & 0 & 2\eta_1 & 0 \\ 0 & 2\eta_3 & 0 & 0 & 0 & -2\eta_1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

解方程组(5), 经复杂运算可得, 在激光作用下氢键中之 H 的瞬时振动中心  $\langle x \rangle$  将随时间变化

$$\langle x \rangle = (2h/m\omega_0)^{1/2} Q_1 \quad (8)$$

其  $Q_1$  当  $\Omega \neq \omega_R$  时, 为

$$Q_1 = \frac{\omega_0 \omega_2}{\omega} + \frac{\Omega + \omega_0}{\Omega - \omega_0} \omega_R \cos \Omega t - \frac{\omega_0(\Omega^2 - \omega_2 + \omega^2 - \omega_R) + \omega^2(\omega_R \Omega - \omega_0 \omega_2) \cos \omega t}{\omega^2(\Omega^2 - \omega^2)}$$

此

$$\omega_R = (\omega_0^2 + 4\omega_0 \omega^3)^{1/2} \quad (9)$$

当  $\Omega = \omega$  时, 为

$$Q_1 = k_1(1 - \cos \omega t) - \frac{\omega_0 + \omega}{2\omega_0 + \omega_2} \omega t \sin \omega t \quad (10)$$

由(8), (9), (10) 可看出在激光作用下, DNA 碱基上的氢原子可离开原“固定位置”, 在  $\Omega$  接近  $\omega$  时原“瞬时振动中心”将发生极大位移, 在  $\Omega$  等于  $\omega$  时, 因(10) 式中的含  $t \sin \omega t$  的项其  $Q_1$  随  $t$  增大,  $\langle x \rangle$  亦会增大。这就会导致氢键断裂, 从而无法实现碱基互补而引起遗传变异。通过上述量子力学的解析分析, 即可解释激光的生物诱变的“共振吸收”效应<sup>[2]</sup>。后来人们发现, 激光

的生物诱变效应也非共振的情况(即有与激光频率无关的情况)。对这一实验现象,有人提出了“生物分子液晶模型在激光作用下的有序无序转化”的定性“理论”来解释,这种定性的说明当然不能使人满足。为此,我们提出了“激光-DNA 相互作用的非线性方程”,并通过求解,对激光的生物诱变效应的“有序无序”定性理论作了解析分析译。

## 2 激光-DNA 相互作用系统的非线性性质

自 1954 年 Crick 等发现 DNA 的双螺旋结构后,不少人研究过 DNA 的动力学特征。其中 Englander 的弹簧单摆模型和 Yomosa 的基转子模型,导出了 DNA 分子的动力学方程,均可化为 Sine-Gordor 方程

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} - \frac{1}{V_0^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{1}{g^2} \sin \psi \quad (11)$$

$\psi$  表示 DNA 的二基转子相对于平衡位置的角移(摆模型为扭转角),  $g^2$  是碱基与相邻碱基相互作用及碱基对的局域相互作用相关的量,  $V_0^2$  是一与 DNA 链堆积能、碱基对间距等量相关的参数<sup>[3]</sup>。(11) 式有扭结型孤子解,这对解释 DNA 的复制、转录与重组等生物功能极有意义。由(11) 式我们可导出激光与 DNA 相互作用的动力学方程,作为初步探索,不妨暂仅考虑激光的电场作用,激光电场对 DNA 中的电荷和电偶矩的作用可简表为  $QE \cos \omega t$  ( $Q$  相当于 DNA 分子中的有效电荷)。此作用对系统的动力学效应一般有两种情况:一为周期电场力对 DNA 系统的参数激励;一为电场力对 DNA 系统的强迫作用。此时还需考虑系统环境水溶质对激光作用下的 DNA 系统的运动所产生的阻尼(按线性阻尼处理)。这样即可写出激光与 DNA 相互作用系统的动力学方程

$$\psi_{zz} - \frac{1}{v_0^2} \psi_{tt} = \left[ \frac{1}{g^2} + A \cos \omega t \right] \sin \psi + \alpha \psi_t \quad (12)$$

或

$$\psi_{zz} - \frac{1}{v_0^2} \psi_{tt} = \frac{1}{g^2} \sin \psi + B \cos \omega t + \alpha \psi_t \quad (12)'$$

(12) 为参数激励情况的方程;(12)' 为受迫情况的方程; $\alpha$  为阻尼系数。我们对系统随时间演化的情况犹感兴趣,故不妨先研究系统在空间某处的运动状态,即先探讨(12) 和(12)' 的空间无关方程:

$$\psi_{tt} + (v_0^2/g^2 + A v_0^2 \cos \omega t) \sin \psi + \alpha v_0^2 \psi_t = 0 \quad (13)$$

$$\psi_{tt} + (v_0^2/g^2) \sin \psi + B v_0^2 \cos \omega t + \alpha v_0^2 \psi_t = 0 \quad (13)'$$

为方便计,令  $\tau = (v_0/g)t$ ,  $\Omega = (g/v_0)\omega$ ,  $g v_0 \alpha = \epsilon F$ ,  $A g^2 = \epsilon G$ ,  $B g^2 = \epsilon \tilde{G}$ , 则(13), (13)' 式写为

$$\psi_{\tau\tau} + (1 + \epsilon G \cos \Omega \tau) \sin \psi + \epsilon F \psi_\tau = 0 \quad (14)$$

$$\psi_{\tau\tau} + \sin \psi + \epsilon \tilde{G} \cos \Omega \tau + \epsilon F \psi_\tau = 0 \quad (14)'$$

对弱激光、弱阻尼情况下(激光诱变育种常用弱激光),  $\epsilon > 0$  可视为小量,故可用 Melnikov 方法对上二式的混沌行为进行分析。进行较繁杂的数学分析和运算<sup>[4]</sup>, 可得(14) 式相应的同宿轨道的门槛值为  $R^0(\Omega) = 4/\pi \Omega \tau^2 \sinh(\pi \Omega/2)$ 。这说明当  $G/F > G^0(\Omega)$  时, (14) 式的 Poincare 映射的鞍点  $(\pi, 0)$  的稳定和不稳定族存在横截同宿点, 系统出现马蹄, 意味着系统会出现混沌; 且有

$$\lim_{m \rightarrow \infty} R_{\text{osc}}^m(\Omega) = \lim_{h \rightarrow \infty} R_{\text{rot}}^m(\Omega) = R^0(\Omega)$$

此表明经无限次次谐分支可过渡到混沌状态。同理, 对(14)' 式而言, 亦可得其同宿点轨道的门

槛值  $R^0(\Omega) = 4/\pi ch(\pi\Omega/2)$ ; 振动轨道和旋转轨道的次谐分支条件为  $R_{osc}^m(\Omega)$  和  $R_{rot}^m(\Omega)$ , 有  $R^0(\Omega) = \lim_{m \rightarrow \infty} R_{osc}^m = \lim_{h \rightarrow \infty} R_{rot}^m(\Omega)$ 。由 Melnikov 理论知, 对于充分小  $\epsilon > 0$ , 只要  $\zeta/F > R^0(\Omega)$ , 系统出现 Smale 马蹄, 意味着混沌存在; 该系统无限多次次谐分支亦可过渡到混沌态。

由上述研究可知, 在 DNA 系统未受激光作用时, 按 Englander 等的理论, 系统为孤子运动态(高度有序); 而在激光作用后, 系统将可能由高度有序的孤子态进入混沌态(无序), 进而导致 DNA 分子构像的变异, 引起遗传诱变效应。这样我们就对本文第 1 部分中所述那一“激光诱变的有序无序转化定性理论”作了解释诠释。

应该指出, 上述探讨也有不足之处。其一, 上面的探讨是用经典力学的唯像模型来处理复杂的 DNA 分子系统, 当然是不能反映其微观本质的。其二, Englander 或 Yomosa 模型仅讨论了 DNA 双螺旋结构的一个与碱基相关的几何参量  $\psi$ , 显然不足反应构像的全貌及运动状态的复杂性; 实际上, DNA 是巨大的小分子“聚合物”, 有的 DNA 分子的分子量竟高达 15 亿, 其中 OH, OP, NH, CH 等键和氢键自身振动及相互作用等因素务需考虑。当然由于 DNA 系统十分复杂, 要面面俱到, 非一时所能企及。文献[5], [6]考虑了 DNA 碱基转动能及碱基对间相互作用能 ( $H^B$  和  $H_{int}^B$ )、氢键声学振动能及其位移能 ( $H^V$ ) 和 DNA 构像的畸变、局域性涨落所出现的分子内部局域激发导致的振动能及分子内部激发与分子链纵向振动等运动模式间相互作用能 ( $H^M$  和  $H_{int}^M$ ), 可得总哈密顿量  $H_0$  为

$$H_0 = H^B + H_{int}^B + H^V + H^M \text{ 和 } H_{int}^M \quad (15)$$

通过极复杂的(量子)理论分析及数学运算后<sup>[6]</sup>得出, DNA 双螺旋有序构像下的各种局域性激发都会在分子链中传播, 激发出各种形式的不同类型的孤立波, 正是这些有序的孤波保证了 DNA 信息与能量传输的不变性、真实性, 从而使 DNA 具有遗传保真性。但当有激光作用后, 就会破坏这种有序的孤波运动, 从而导致遗传变异。事实上, 当激光作用后, 其原来的

$$H^M = \sum_n P_n^2/2m + \frac{1}{2} \sum_n m\omega_0^2 r_n^2 - \frac{1}{2} \sum_n m\omega_0^2 r_n r_{n+1}$$

就会变为

$$H_L^M = \sum_i \frac{1}{2m} (P_i - qA_i)^2 + \frac{1}{2} m\omega_0^2 \sum_i r_i^2 - \frac{1}{2} m\omega_0^2 \sum_i r_i r_{i+1} \quad (16)$$

其中  $q$  为 DNA 分子链一振子之电荷,  $A_i$  为传到第  $i$  个振子的激光电磁场矢势。取库仑规范, 并对带电振子取偶极近似, 在仅考虑电场作用的情况下, 上式的  $(P_i - qA)$  可书写为  $(P_i - \mu E_i \cos\psi)$ , 其中  $\mu$  为电偶极矩,  $E_i$  为激光作用到第  $i$  振子之电场, 对平面电磁波而言

$$A_i = A_0 \exp[j(kr_i \cos\theta - \omega t)] \quad E_i = - \frac{\partial A}{\partial t}$$

可得激光 DNA 相互作用的总哈密顿量

$$H^L = H^B + H_{int}^B + H^V + H_L^M + H_{int}^M$$

经量子化  $r_i = (2m\omega_0/h)^{-1/2}(b_i^+ - b_i)$  和  $P_i = j(hm\omega_0/2)^{1/2}(b_i^+ - b_i)$  后; 再取 Heisenberg 表象中算子运动方程  $Jhb_i = [b_i, H_L]$ , 在  $H_L$  中除  $H_L^M$  外其余的子哈密顿量全用文献[6]中的表示。在连续性近似和去掉反常关联项后再通过一系列函数变换后, 可得描述激光作用引起 DNA 分子“内部”激发变化的方程, 其为

$$j \frac{\partial \Phi}{\partial t} = - A \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + (\alpha - \omega_2 \sin\alpha) \Phi - C |\Phi|^2 \Phi \quad (17)$$

此式与文献[6]的公式(8), (144)比较, 仅多了激光作用项  $\omega_2 \sin\alpha$ ; (17)式表明如无激光作用其为非线性薛定谔方程应有孤子解(文献[6]中(8)式, (145)式)。而(17)式又正好与作者导出

的激光蛋白质相互作用系统运动方程形式上完全相似<sup>[7]</sup>, 故可用 Melnikov 方法, 可得与文献 [4] 中相同的、反映(17)式的等价系统的异宿轨道的 Melnikov 函数

$$M(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} y_{\pm}^0(\zeta) \{ - [\alpha_1 - \omega' \cos(\omega\zeta + \zeta)] \} d\zeta$$

即其门槛值

$$R^{(2)}(\omega') = \frac{\lambda'}{3\pi\omega'} \operatorname{sh} \left[ \frac{\sqrt{2}}{2} \pi\omega' \right]$$

当  $\frac{\lambda'}{\omega'} > R^{(2)}$  时, 系统出现马蹄, 系统即可进入混沌态。说明激光作用将改变原 DNA 系统的内部激发的有序传输状态而变为无序态, 破坏了原遗传保真传输而导致遗传变异。当然, 由于激光与生物分子系统相互作用的复杂性及其效应的多样性, 还需结合对诸如热效应等的分析(参见文献[8]), 方能较全面地认识激光的诱变遗传效应的机理。

### 参 考 文 献

- 1 Liu Ciquan. Quantum biology and its application. Beijing. Higher Education Press, 1990, 289 (in Chinese)
- 2 Zhou Lingyun, Zhang Lingqi. Resonance exciting actions of laser act on biomolecule. *Chinese J. of Atomic & Molecular Phys.* (原子与分子物理学报), 1995, **12**(3): 310~ 316 (in Chinese)
- 3 S. Yomosa. Solitary excitation in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices. *Phys. Rev. A*, 1984, **30**(1): 474~ 480
- 4 Zhou L. Y.. A study of weak laser-DNA molec. interaction and its chaotic behaviour. *Chinese Phys. Lett.*, 1993, **7**: 441
- 5 Scott A. C.. Davydov's solitons revision. *Phys. Sci.*, 1985, **32**: 617
- 6 Pang Xiaofeng. The nonlinear theory of quantum mechanics. Chongqing. Chongqing Pub. House, 1994, 440~ 458 (in Chinese)
- 7 Zhou Lingyun. Laser excitation in protain. *J. of Kunming Ist. of Tech.* (昆明工学院学报), 1994, **19**(4): 112 (in Chinese)
- 8 Zhou Lingyun, Zhang Lingqi, Chen Youwei *et al.*. Analyses of heat effect of laser actin on enzyme by fractal theory and soliton theory. *Chinese J. of Lasers* (中国激光), 1996, **A23**(5): 427~ 431 (in Chinese)

## Analysis of the Mechanism of Resonance Excitation and Nonlinear Effect of Genetic Mutagenesis of Laser

Zhang Lingqi<sup>1</sup> Chen Youwei<sup>2</sup> Zhou Lingyun<sup>3</sup> Wei Rongcheng<sup>2</sup>

(<sup>1</sup>Department of Biology, Yunnan University, Kunming 650091

<sup>2</sup>Yunnan Institute of Microbiology, Yunnan University, Kunming 650091

<sup>3</sup>Reseach Center of Nonlinear Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093)

**Abstract** The resonant absorption effects and chaotic characters of the laser-DNA molecule interaction are studied by quantum mechanics and nonlinear theory. The results may explain the effect of genetic mutagenesis of laser.

**Key words** laser-DNA, resonance absorption, chaos, mutagenesis