

生理温度下的有机蛋白质分子中激发的
孤子导致的 Mössbauer 效应

庞小峰

Q.510.2
O481.4(中国科学院国际材料物理中心, 辽宁, 沈阳, 110015, 四川联合大学原子和
分子研究所, 四川, 成都, 610065, 西南民族学院物理系, 四川, 成都, 610041)

摘要 研究了处于生理温度条件下的有机蛋白质分子所激发的孤子对位于分子链中的 γ -激活的原子核产生的 Mössbauer 效应的影响. 在分子链不改变所激发的孤子状态下所发射的 γ -量子等于分子链的激发能. 由此而产生的 Mössbauer 跃迁几率较小, 它低于仅用热声子模型描述的分

关键词 孤子, Mössbauer 效应, 跃迁几率, 蛋白质分子

生理温度

引言

穆斯堡尔效应

有机蛋白质分子由 ATP 水解作用释放的能量(0.43eV)会引起分子链的结构畸变和局域性涨落, 由此产生的集体激发(激子)与畸变分子链相互作用使激子“自陷”为孤子, 它连同分子链的畸变一起, 保持其能量、动量等特性不变地沿分子链运动一段宏观距离^[1~12]. 这类孤子是一个动力学实体, 并已在蛋白质和类蛋白质结构的乙酰苯胺($\text{CH}_3\text{CONHC}_6\text{H}_5$)₂ 中的 Raman 散射和红外吸收的实验中被证实^[2~3, 5]. 在孤子存在和运动的区域中, 分子晶格会发生局域性的畸变, 并导致分子链中的原子位移和核的激活而产生 γ -光子的发射. 处于格点处的激活核在发射 γ 光子的同时会引起能量的改变, 其大小为 ΔE_m (可称为跃迁能量). 原则上讲, 它可在 γ -光子、发射的核和核所在处的分子元胞间进行分配, 但最终仅能在 γ -光子和所激发的孤子间进行分配. 由于要使发射核离开它的平衡位置需要大约 10eV 的能量, 但发射 γ -光子所引起的反冲能量仅为十分之几 eV, 这表明这一反冲能量不致于改变核的位置, 再由于孤子的特点, 此时也不会改变孤子的状态, 于是便引起 Mössbauer 现象的发生. 此时 γ 光子吸收了全部跃迁能量. 在线性分子链下, 由我们理论给出的蛋白质中的孤立子以次声速($V < V_0$, V_0 是声速)稳定地沿分子链传递^[6~9], 即使在生理温度下的蛋白质也如此^[8~12]. 因此用孤子与热声子相耦合的模型来描述这种状态是恰当的. 本文基于这一思想, 研究了由孤子所导致的 Mössbauer 效应的特点.

1 处于生理温度的蛋白质分子激发的孤子

根据有机蛋白质分子在 ATP 水解作用释放能量引起的结构畸变和局域性涨落的特

点,由我们理论给出的系统的哈密顿量为^[6~12]:

$$\begin{aligned} H &= H_{ex} + H_{ph} + H_{int} \\ &= \left(\frac{1}{2m} \sum_i P_i^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \sum_i r_i^2 - \frac{1}{2} m \omega_1^2 \sum_i r_i r_{i+1} \right) + \left(\frac{1}{2} M \sum_i R_i^2 + \frac{1}{2} \beta \sum_i (R_i - R_{i-1})^2 \right) + \\ &\quad \left(\frac{1}{2} m \chi_1 \sum_i (R_{i+1} - R_{i-1}) r_i^2 + m \chi_2 \sum_i (R_{i+1} - R_i) r_i r_{i+1} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

式(1)中 r_i 和 $P_i = m \dot{r}_i$ 分别表示 amide-I 振动量子的正则坐标和相应的共轭动量, R_i 和 $P_i = M \dot{R}_i$ 分别表示第 i 个氨基酸残基(肽群)的位移算符和动量算符. 运用二次量子化方法,从式(1)可得:

$$\begin{aligned} H &= \sum_q \epsilon_0 (b_q^+ b_q + \frac{1}{2}) - \frac{\hbar \omega_0^2}{4\omega_0} \sum_i (b_i^+ b_{i+1} + b_i b_{i+1}^+) + \sum_q \hbar \omega_q (a_q^+ a_q + \frac{1}{2}) + \\ &\quad \sum_{i,q} [g(q) (b_i^+ b_i + b_i b_i^+) + g_1(q) (b_i^+ b_{i+1} + b_i b_{i+1}^+)] (a_q + a_q^+) e^{i r_{0q}}, \end{aligned} \quad (2)$$

式(2)中 $g(q) = \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar \chi_1}{4\omega_0} \right) e^{r_{0q}} - e^{-r_{0q}}$, $g_1(q) = \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_q} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar \chi_2}{2\omega_0} \right) (e^{r_{0q}} - 1)$, $\epsilon_0 = \hbar \omega_0$, $J = \hbar^2 \omega_1 / 4\omega_0$, $\omega_q = 2(\beta/M)^{1/2} \sin\left(\frac{1}{2} \gamma_{0q}\right)$, b_i 和 a_q 分别为所激发的激子和声子的消灭算符.

有机蛋白质分子中因结构畸变和局域性涨落导致的集体激发具有相干性,于是描述它的状态波函数应是以下的准相干波函数^[6~12]:

$$\begin{aligned} |\Phi_r\rangle &= |\varphi\rangle |a_r\rangle = \frac{1}{\lambda} (1 + \sum_i \varphi_i(t) b_i^+) |0\rangle_{ex} \\ &\quad \exp\left\{ \sum_{i,q} [\alpha_q^*(t) a_q - \alpha_q(t) a_q^+] \right\} \prod_i (r_{0q})^{-1/2} (a_q^+)^r |0\rangle_{ph}, \end{aligned} \quad (3)$$

我们研究的有机蛋白质分子是处于生理温度下,或是与一个热源接触的,所以在计算哈密顿量的量子力学期待值时应按下列公式作热力学平均,即

$$\bar{H} = \langle H \rangle = \text{Tr}[\rho_{wph} H] = \sum_{\nu} \langle \nu | \rho | \nu \rangle_{ph} \langle \Phi_{\nu} | H | \Phi_{\nu} \rangle, \quad (4)$$

$$(\rho_w)_{ph} = \langle \nu | \rho | \nu \rangle_{ph} = \langle \nu | \exp[-H_{ph}/k_B T] | \nu \rangle / \sum_{\nu} \langle \nu | \exp(-H_{ph}/K_B T) | \nu \rangle, \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \text{即 } \langle H \rangle &= \sum_i \left\{ \hbar \omega_0 (|\varphi_i|^2 + \frac{2}{3}) - J e^{-W_i} \varphi_i^* (\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1}) - \sum_q [2g(q)(1 + |\varphi_i|^2) \right. \\ &\quad \left. + g_1(q)(\varphi_i^* + \varphi_{i+1} + \varphi_i^* \varphi_{i-1})] (a_q + a_{-q}^+) e^{i r_{0q}} + \sum_q \hbar \omega_q (|\alpha_q|^2 + \bar{\nu}_q + \frac{1}{2}) \right\}, \end{aligned} \quad (6)$$

式中 $W_i = 2 \sum_q |\alpha_q|^2 (1 + 2\bar{\nu}_q \sin^2(\frac{r_{0q}}{2}))$, $\bar{\nu}_q = (\exp(\frac{\hbar \omega_q}{K_B T}) - 1)^{-1}$, $B(T, q) = e^{-W_i}$.

很明显,这里可把 $\varphi_i(t)$ 和 $\alpha_q(t)$ 看成一个动力学变量,它们共轭动量为 $j \hbar \dot{\varphi}_i^*$ 和 $j \hbar \dot{\alpha}_q^*$ (i),由哈密顿方程可求得:

$$\begin{aligned} j \hbar \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} &= \epsilon_0 \varphi_i - J e^{-W_i} (\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1}) + \\ &\quad \sum_q [2g(q) \varphi_i + g_1(q) (\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1})] (a_q + a_{-q}^+) e^{i r_{0q}}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$j \hbar \frac{\partial a_{iq}}{\partial t} = \hbar \omega_q a_{iq} + \sum_j [2g(q)|\varphi|^2 + g_1(q)(\varphi^* \varphi_{+1} + \varphi^* \varphi_{-1})] e^{-j\omega_q t}, \quad (8)$$

$$j \hbar \frac{\partial a_{i-q}^*}{\partial t} = -\hbar \omega_q a_{i-q}^* - \sum_j [2g(q)|\varphi|^2 + g_1(q)(\varphi^* \varphi_{+1} + \varphi^* \varphi_{-1})] e^{-j\omega_q t}, \quad (9)$$

由于 $u_i = \langle a_i | R_i | a_i \rangle = N^{-\frac{1}{2}} \sum_q u_{iq}(t) e^{iqx}$, $u_{iq} = (\frac{\hbar}{2M\omega_q})^{\frac{1}{2}} (a_{iq}(t) + a_{i-q}^*(t))$, 和 $\omega_0 = V_0 q$, $V_0 = r_0 (\frac{\beta}{M})^{\frac{1}{2}}$, $x = ir_0$; 在长波和连续性近似下, 由式(7~9)可得

$$\frac{\mathcal{F}u(x,t)}{\partial x^2} - V_0^2 \frac{\mathcal{F}u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\hbar r_0 (\chi_1 + \chi_2)}{2M\omega_0} \frac{\partial}{\partial x} |\varphi(x,t)|^2,$$

$$j \hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x,t) = (\epsilon_0 - 2JB(q,T)) \varphi(x,t) - Jr_0^2 B(T,q) \frac{\mathcal{F}\varphi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{\hbar (\chi_1 + \chi_2) r_0}{\omega_0} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \varphi(x,t).$$

设 $\zeta = x - Vt$, 从以上两式可得:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = -Q(x,t) = -\frac{\hbar r_0 (\chi_1 + \chi_2)}{2\omega_0 M V^2 (1 - S^2)} |\varphi(x,t)|^2, \quad (10)$$

$$j \hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x,t) = (\epsilon_0 - 2JB(T,q)) \varphi(x,t) - Jr_0^2 B(q,T) \frac{\mathcal{F}\varphi(x,t)}{\partial x^2} - G |\varphi(x,t)|^2 \varphi(x,t), \quad (11)$$

式(11)中 $G = \frac{\hbar^2 r_0^2 (\chi_1 + \chi_2)^2 (x,t)}{2\omega_0^2 M V^2 (1 - S^2)}$; 式(11)是标准非线性的薛定谔方程, 其次声孤立子解为^[13]

$$\varphi(x,t) = \frac{r_0 \mu^{1/2}}{2} \operatorname{sech}(\mu(x - Vt)) e^{i(Kx - \omega t)}, \quad (12)$$

式(12)中 $\mu = r_0 \overline{m} G / 2\hbar^2$, $\overline{m} = m e^{\overline{w}}$, $K = \overline{m} V / \hbar$, $\hbar \omega = \overline{\epsilon} + \frac{\hbar^2 (K^2 - \mu^2)}{2m}$, $\frac{\hbar^2}{2m V_0^2} = JB(T,q)$, $\overline{\epsilon}_0(T) = \epsilon_0 - \frac{\hbar^2}{m r_0^2} e^{-\overline{w}} = \epsilon_0 - 2JB(T,q)$; $\overline{\epsilon}_0(T)$ 是与温度有关的系统的导带的下底能量; \overline{m} 是激子的重整化有效质量, 它与温度影响下相邻肽群中不同波长的相干性导致的交换作用相关. 从上面结果看出所激发的孤立子仍是热稳定的^[10~12], 因为它的静止能量始终低于导带的下底(激子静止)能量值.

2 由孤立子导致的 Mässbauer 效应跃迁几率

根据引言分析, 此系统可以出现 Mässbauer 效应. 设发射 γ 光子的激活核处于分子链的 i_0 处, 根据量子理论, 对于此过程的相互散射势可表示成^[12,14]:

$$V_{int} = A \pi(x_n, P_n, \sigma_n) \Gamma(P, u_{i_0}), \quad (13)$$

其中 $\pi(x_n, P_n, \sigma_n)$ 描述了处于 n 量子状态的激活核的特征算符, 它与核的坐标 x_n , 动量 P_n 和自旋 σ_n 等相关. $\Gamma(P, u_{i_0})$ 表示与发射 γ 光子相关的算符, 其中 P 表示发射的 γ 光子的动量.

u_{i_0} 是处于 i_0 处的氨基酸残基在发射 γ 光子后的位置矢量. 很明显有 $\vec{u}_{i_0} = i_0 \vec{r}_0 + \vec{R}_{i_0}$, 式中 R_{i_0} 表示处于 i_0 的氨基酸残基因发射 γ 光子后的位移. 在一般情况下, $\Gamma(P, u_{i_0})$ 可表成一个周期势^[12], 即

$$\Gamma(P, u_{i_0}) = de^{iP \cdot u_{i_0}/\hbar} = de^{iP \cdot (i_0 \vec{r}_0 + \vec{R}_{i_0})/\hbar},$$

则式(13)变为:

$$V_{int} = \bar{A} \pi(x_n, P_n, \sigma_n) e^{i\vec{P} \cdot i_0 \vec{r}_0/\hbar} e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}_{i_0}/\hbar}, \quad (14)$$

上式表明当激活的核发射动量为 P 的 γ 光子时, 必然影响所在结点处的氨基酸残基的状态, 即在这个相互作用势的影响下, 核和包含有这个核的氨基酸残基和 amide-1 键的状态都要发生变化, 使它从态 $|\Phi^n\rangle$ 跃迁到态 $|\Phi^m\rangle$. 其相应的跃迁矩阵元为:

$$T_{n \rightarrow m} = \langle \Phi^m | V_{int} | \Phi^n \rangle = \bar{A} \langle \Phi^m | e^{i\vec{P} \cdot i_0 \vec{r}_0/\hbar} e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}_{i_0}/\hbar} | \Phi^n \rangle \langle m | \pi(x_n, P_n, \sigma_n) | n \rangle. \quad (15)$$

考虑到 $\pi(x_n, P_n, \sigma_n)$ 仅依赖激活核的内部自由度的本征量子数, 在研究 Mössbauer 效应跃迁过程中, 不必知道它的具体显式, 上述相互作用势仅影响在该结点处的氨基酸残基的状态, 矩阵元 $\langle m | \pi(x_n, P_n, \sigma_n) | n \rangle$ 仅依赖于核的内部自由度, 因此可近似认为此矩阵元是一个常数, 并把它归并到 \bar{A} 中. 则 $e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}_{i_0}/\hbar}$ 是造成这种跃迁的唯一相互作用势. 另外, 由前面分析可知: 在这种 Mössbauer 发射的前后, 蛋白质分子中所产生的集体激发状态, 由于发射 γ 光子产生的反冲能量太小, 可认为不发生变化, 即 $|\Phi^m\rangle$ 和 $|\Phi^n\rangle$ 相同, 于是式(15)写成:

$$T_{n \rightarrow m} = \bar{A} |\Phi_n\rangle e^{i\vec{P} \cdot \vec{R}_{i_0}/\hbar} |\Phi_n\rangle e^{i\vec{P} \cdot i_0 \vec{r}_0/\hbar}, \quad (16)$$

式(16)中 $R_{i_0} = \sum_q \left(\frac{\hbar^2}{2MN\omega_q}\right)^{1/2} (a_q + a_q^\dagger) \vec{e}_q e^{i\vec{r}_0 \cdot \vec{q}}$; \vec{e}_q 表示纵向声子的极化矢量. 将式(3)代入式(16)可求出上述矩阵元, 但因所研究的蛋白质是处在生理温度下, 所以应按式(4)作热力学平均, 于是有:

$$\langle \bar{T}_{n \rightarrow m} \rangle = \bar{A} \sum (1 + |\varphi|^2) \left(\frac{\langle a_q | \exp(-H_{ph}/K_B T) | a_q \rangle}{\sum_q \langle a_q | \exp(-H_{ph}/K_B T) | a_q \rangle} \right) \left(\langle a_q | \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_q (\vec{P} \cdot \vec{e}_q) \right. \right. \\ \left. \left. \left(\frac{\hbar^2}{2M\omega_q N} \right)^{1/2} (a_q^\dagger + a_q) \exp(i\vec{r}_0 \cdot \vec{q}) \right\} | a_q \rangle \right) e^{i\vec{P} \cdot i_0 \vec{r}_0}. \quad (17)$$

现设 $\beta_q = \frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{2MN\omega_q} \right)^{1/2} (\vec{P} \cdot \vec{e}_q) e^{i\vec{r}_0 \cdot \vec{q}}$ (显然有 $\beta_q = -\beta_q^*$, 并利用 Weyl 公式, 则式(17)变成为:

$$\langle \bar{T}_{n \rightarrow m} \rangle = \bar{A} \sum (1 + |\varphi|^2) \left[\frac{\langle \nu | \exp(-\sum_q \frac{\hbar \omega_q}{K_B T} (a_q^\dagger a_q)) | \nu \rangle}{\sum_q \langle \nu | \exp(-\sum_q \frac{\hbar \omega_q}{K_B T} (a_q^\dagger a_q)) | \nu \rangle} \right] \prod_q \exp\{\beta_q^* a_q^* - \beta_q a_q + \\ \frac{1}{2} |\beta_q|^2\} \sum_{i_q=-1}^{\infty} (-1)^{i_q} |\beta_q| 2i_q (i_q + \bar{\nu}_q)! / (i_q!)^2 \bar{\nu}_q! \quad (18)$$

对式(8~9)作调制波处理, 可求得:

$$a_{i_q}(t) = \frac{(g(q) + g_1(q)) |\varphi|^2}{N^{1/2} \hbar |q| V (1-s) \left(\frac{q}{|q|}\right)}, \quad a_{-i_q}^*(t) = \frac{-(g(q) + g_1(q)) |\varphi|^2}{N^{1/2} \hbar |q| V (1+s) \left(\frac{q}{|q|}\right)} \quad (19)$$

将式(19)代入式(18),并用 $\vec{e}_q = \vec{e}_{-q}$, 则式(18)变成:

$$\begin{aligned} \langle \bar{T}_{\rightarrow m} \rangle &= \bar{A} \sum_q (1 + |\varphi|^2) \left\{ - \sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{2MN \hbar \omega_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2}) \right\} \\ &\exp \left\{ - \frac{1}{N} \sum_q \frac{2r_0 q (\chi_1 + \chi_2) (\vec{P} \cdot \vec{e}_q) |\varphi|^2 e^{i\alpha q (-i_0)}}{2MV_0^2 \hbar |q|^2 (1 - V/V_0)^2 \omega_0} \right\}; \end{aligned} \quad (20)$$

式(20)表明激活核的 Mössbauer 效应跃迁完全是由于孤立子的运动和热声子的存在与极化效应引起的. 在式(20)中,若将坐标原点放在结点 i_0 处,并考虑求和函数(即正弦和余弦函数)的奇偶特性,则式(20)可简化为:

$$\begin{aligned} \langle \bar{T}_{\rightarrow m} \rangle &= \bar{A} \sum_q (1 + |\varphi|^2) \left\{ - \sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{2MN \hbar W_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2}) \right\} \\ &\exp \left\{ \frac{j}{N} \sum_q \frac{r_0 q (x_1 + x_2) (\vec{P} \cdot \vec{e}_q) |\varphi|^2 \sin(ir_0 q)}{MV_0^2 \hbar |q|^2 (1 - S^2)^2 W_0} \right\}, \end{aligned} \quad (21)$$

式(21)中若对 q 的求和用积分代替,即 $\frac{1}{N} \sum_q \rightarrow \frac{r_0}{2\pi} \int_{-1/r_0}^{1/r_0} dq$, 并将式(12)的 φ 代入式(21),再将纵向声子的乘积 $(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)$ 近似为常数,在小波矢时采用长波近似, $\sin(ir_0 q) \sim ir_0 q$, 并用 φ 的振幅代替它本身,则求和变成:

$$\frac{j}{\hbar} \sum_q \frac{2(\chi_1 + \chi_2) r_0 q (\vec{P} \cdot \vec{e}_q)}{MV_0^2 \omega_0 \hbar |q|^2 (1 - S^2)} |\varphi|^2 \sin(ir_0 q) \simeq j\Omega x, \text{ 其中 } \Omega = \frac{(\chi_1 + \chi_2) r_0^2 \mu (\vec{P} \cdot \vec{e}_q)}{MV_0^2 \omega_0 \hbar (1 - S^2)}.$$

再作连续性近似, $\sum_q \rightarrow \frac{1}{r_0} \int_{-\infty}^{\infty} dx$, 式(21)最后变成:

$$\langle \bar{T}_{\rightarrow m} \rangle = \bar{A} \exp \left\{ - \sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{2MN \hbar \omega_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2}) \right\} \left\{ 1 - \frac{2\pi\mu\Omega}{\hbar^2 \mu^2} \operatorname{csch} \left(\frac{\pi\Omega}{2\mu} \right) e^{j\Omega(x_0 + \nu_0)} \right\}, \quad (22)$$

于是 Mössbauer 效应跃迁几率为:

$$\begin{aligned} W &= |\langle \bar{T}_{\rightarrow m} \rangle|^2 = \bar{A}^2 \exp \left\{ - \sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{MN \hbar \omega_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2}) \right\} \\ &\left(1 - \frac{2\pi\Omega}{\hbar^2 \mu} \operatorname{csch} \left(\frac{\pi\Omega}{2\mu} \right) e^{j\Omega(x_0 + \nu_0)} \right)^2, \end{aligned} \quad (23)$$

式(23)就是由孤立子和热声子激发在蛋白质分子中所导致的 Mössbauer 效应跃迁几率的表达式. 很明显,它是由温度的存在所导致的热声子激发 $\exp \left\{ - \sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{2MN \hbar \omega_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2}) \right\}$ 和孤立子激发 $\left(1 - \frac{2\pi\Omega}{\hbar^2 \mu} \operatorname{csch} \left(\frac{\pi\Omega}{2\mu} \right) e^{j\Omega(x_0 + \nu_0)} \right)^2$ 两部分组成. 在一般情况下,前者的作用大于后者,换言之,如果分子链完全是孤立子模式时, Mössbauer 跃迁几率一定小于纯粹声子的模式. 在孤立子模型下几率小主要是由于 $\frac{2\pi\Omega}{\hbar^2 \mu} \operatorname{csch} \left(\frac{\pi\Omega}{2\mu} \right) < 1$ 引起的. 另外,虽然温度影响了孤立子的状态(它的振幅 $\left(\frac{r_0 \mu}{2} \right)^{1/2}$ 和宽度 $\left(\frac{1}{\mu} \right)$ 都直接与温度相关),从而也使跃迁几率随温度变化.

但温度对跃迁几率的影响主要来源于声子部分, 特别是低温时更加明显. 随着温度的升高, 孤立子的影响增大, 此时整个跃迁几率增加速率减慢. 同时这个跃迁几率还与蛋白质分子的结构特征和集体激发的特征参数 ($r_0, V_0, \omega_0, \omega_1, \chi_1$ 和 χ_2 等) 有关. 这表明不同类型的蛋白质分子所产生的 Mössbauer 效应是不同的. 如果知道蛋白质分子的特征参量, 便可求出这个跃迁的几率. 例如对于 α -螺旋蛋白质分子^[1~12], 当: $J = 1.55 \times 10^{-28} \text{J}$, $M = (1.3 - 1.91) \times 10^{-25} \text{kg}$, $\beta = 13 - 19.5 \text{N/m}$, $x = \frac{\hbar \chi_2}{2\omega_0} = (2.0 - 6.2) \times 10^{-11} \text{N}$, $x' = \frac{\hbar \chi_2}{2\omega_0} = (2 - 6) \times 10^{-12} \text{M}$, $V_0 = (0.5 - 1.2) \times 10^4 \text{ms}^{-1}$, $V = (0.2 - 0.4) \times 10^4 \text{mS}^{-1}$, $\omega_0 = (1 - 4) \times 10^{14} \text{s}^{-1}$, $r_0 = (4 - 5) \times 10^{-10} \text{m}$, $\omega_1 = (1 - 3) \times 10^{13} \text{s}^{-1}$, $\epsilon_0 = 0.21 \text{eV}$, $N = 66/\text{元胞}$, $T = 300 \text{K}$ 时, 可近似求得其 Mössbauer 效应跃迁几率大约为 7-10%. 因此其几率是小的.

若 $(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)$ 很小时, $W \simeq (1 + \frac{4}{\hbar^2} + \frac{\pi^2 \Omega^2}{6 \hbar^2 \mu^2})^2 \exp\{-\sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{MN \hbar \omega_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2})\}$, 若 $(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)$ 很大时, $W \simeq [1 - \frac{2\pi r_0 \Omega}{\hbar^2 \mu} (e^{-\frac{\mu \Omega}{2\mu}} - e^{-\frac{3\mu \Omega}{2\mu}})]^2 \exp\{-\sum_q \frac{(\vec{P} \cdot \vec{e}_q)^2}{MN \hbar \omega_q} (\bar{\nu}_q + \frac{1}{2})\}$ 以上两个表示式在一些具体问题中很有用.

参考文献

- 1 Davydov A S. *Phys. Scr.*, 1979, **20**: 387
- 2 Careri G. *et al. Phys. Rev.*, 1984, **B30**: 4689
- 3 Scott A C. *Phys. Rep.* 1992, **217**: 1
- 4 Pang Xiaofeng. *Acta Biochim. Biophys. Sin.*, 1986, **18**: 1 (in Chinese)
- 5 Christiasen P L. Scott A C. *Self-trapping of vibrational energy on protein*, London: Plenum Press, 1990
- 6 Pang X F. *J. Atom. Mol. Phys. Sin.*, 1989, **7**(3): 235 (in Chinese).
- 7 Pang X F. *J. Phys. Condensed Matter.*, 1990, **2**: 9541
- 8 Pang X F. *Chinese Phys. Lett.*, 1993, **10**(6): 381~517
- 9 Pang X F. *Chinese Science Bulletin*, 1993, **38**: 1572
- 10 Pang X F. *Chin. J. Infrared millim Waves*, 1993, **12**: 337
- 11 Pang X F. *Chinese Acta of Biophys.*, 1993, **9**(4): 631
- 12 Pang X F. *the theory for non-linear quantum mechanics*, Chongqing, Chongqing press, 1994, 216-506
- 13 Pang X F. *Acta math. scientia*, 1993, **13**: 437
- 14 Longen R. *the quantum theory of light*, Oxford, Oxford Univevsity Press, 1983, 216

**THE MÖSSBAUER EFFECT ARISING FROM THE SOLITONS
EXCITATION IN THE ORGANIC PROTEIN MOLECULES
WITH THE PHYSIOLOGICAL TEMPERATURE**

Pang Xiaofeng

*(International Centre for Material Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang, Liaoning 110015,
Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan Union University, Chengdu, Sichuan 610065,
Department of Physics, Southwest Institute for Nationalities, Chengdu, Sichuan 610041, China)*

Abstract The influence of the soliton excitation on the Mössbauer effect in γ -active nucleus situated in molecular chains in the organic protein molecules with the physiological temperature was studied. When the molecular chain does not change its state in the course of γ -photon emission, the r -quantum is exactly equal to the molecular excitation energy. In such a case the expression of the γ -radiative Mössbauer effect transition probability was derived, and the transition probability is lower than that in the course when the molecular state is adequately described exclusively by thermal phonon modes.

Key words soliton, Mössbauer effect, transition probability, protein molecules