

autoimmune diseases still remains controversial. The understanding of the mechanisms underlying autoimmune ovarian disease is required would be useful for development of new directions and improvement of existing methods of its diagnosing and treatment.

*Key words:* autoimmune ovarian disease, anti-ovarian antibodies, cytokines, reproductive system

Рекомендує до друку

Надійшла 27.03.2009

В.В. Грубінко

УДК 577.112.5 : 577.322

В. В. ЩЕРБИК, Л. П. БУЧАЦЬКИЙ

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка  
вул. Володимирська, 64, Київ, 01033

## **ТРЬОХКОМПОНЕНТНЕ ВЕКТОРНЕ ПОЛЕ В МОЛЕКУЛІ БІЛКА**

Структура нативного білка обумовлена присутністю в ньому трьохкомпонентного векторного поля. Поле утворюється на основі обміну компонентами 3-спінорів амінокислотних залишків. Фіксоване калібрування трьохкомпонентного векторного поля в рімановому просторі приводить до подвоєння білкової молекули. У груповому просторі амінокислотний залишок не змінює свого фізичного стану, отже, незалежно від типу 4-спінорів амінокислот трьохкомпонентне векторне поле при подвоєнні молекули білка також подвоюється.

*Ключові слова:* 3-спінори амінокислот, трьохкомпонентне векторне поле

Відомо, що число конформацій розгорнутої молекули білка, яке обумовлене кутами обертання  $\psi$  і  $\phi$  площин остову, дуже велике. Тому маловірогідно, що фолдінг нативного білка є випадковим – в цьому суть парадоксу Левінтала [7]. Нативний білок згортається швидко – за декілька секунд або швидше, причому самоорганізація його структури визначається тільки амінокислотною послідовністю. У більшості білків амінокислотні послідовності виглядають як випадкові. Цей факт є основною перешкодою до побудови ясної фізичної теорії, яка могла б пояснити топологію білкової молекули.

Сучасна фізика оперує поняттями частинка і поле. Частинки асоціюються з квантами поля. Поле завжди має нескінченне число степенів свободи. І яким би астрономічним не здавалося число можливих конформацій молекули білка, тільки поле здатне його упорядкувати. Ясно, що електромагнітне поле присутнє у білці. Але сумнівно, що воно виконує вирішальну роль у формуванні основних структурних елементів білка –  $\alpha$ -спиралей,  $\beta$ -листіків і нерегульованих ділянок. Якщо розглядати білок як “функціональний пристрій”, то формування цього пристрою, його топології, обумовлено водневими зв'язками. Атом водню має відмінну від нуля масу, і можна припустити, що водневий зв'язок є тим лінійним “середовищем”, уздовж якого може розповсюджуватися масивне векторне поле. Таке поле добре відоме – це трьохкомпонентне векторне поле, що підкоряється рівнянню Прока [1]. Але це поле не є калібрувально інваріантним; завжди знаходиться в калібруванні Лоренца. Ця властивість поля є недоліком в псевдоевклідовому просторі, але є великою перевагою в рімановому просторі, в якому можливе подвоєння структур.

Чому саме атом водню можна прийняти як переносника трьохкомпонентного векторного поля? Ще багато років тому В. А. Фок [4] показав, що хвильова функція атома водню інваріантна щодо групи обертань  $R_4$  в чотиривимірному евклідовому просторі для зв'язаних станів з негативною енергією і інваріантна щодо групи Лоренца  $L_4$  для станів суцільного спектру з позитивною енергією. За допомогою нескладних перетворень [5] алгебри показано, що локально і група обертань  $R_4$  і група Лоренца  $L_4$  ізоморфні групі  $R_3 \times R_3$ . Звичайно,

глобально, група обертань R4 і група Лоренца неізоморфні. Ці групи можна об'єднати в об'ємі ріманового простору.

Припустимо, що нативний білок є рімановим простором, в якому головним діючим об'єктом є трьохкомпонентне векторне поле, причому у евклідовому просторі R4. Це поле не розповсюджується у вакуумі, але розповсюджується по водневих зв'язках у водному середовищі. Дотичним полем є електромагнітне поле, інваріантне щодо групи Лоренца. Цим ми хочемо підкреслити, що рімановий простір білкової молекули локально ізоморфний не псевдоевклідовому простору Мінковського, а саме евклідо-вому простору R4. Подальший виклад присвячений побудові трьохкомпонентного векторного поля в об'ємі білкової молекули.

### Спінори амінокислот генетичного коду

Тензор кривизни  $R_{JK, ST}$  в чотиривимірному рімановому просторі має 20 істотних (незалежних) компонент [2]. Стільки ж є амінокислот генетичного коду [6]. Цей збіг не є випадковим і має фізичну основу. Щоб це показати, розглянемо вміст протонів в амінокислотних залишках  $Amr$ , який ми будемо називати протонним зарядом  $Q_p(Amr)$  і функцію  $\#(Q_p(Amr))$ , яка дорівнює кількості різних кінцевих груп порядку  $Q_p(Amr)$  (Таблиця 1).

Таблиця 1

Характеристика внутрішнього простору амінокислот

Амінокислота	Хімічна формула		Протонний заряд радикала		$\#(Q_p(Amr))$	Протонний заряд		$\rho(Am)$
	$Am$	радикала	$Q_p(Amr)$	$Q_p(Am)$				
A Аланін	1C	3H			9	2	48	1
C Цистеїн	1C	3H	1S		25	2	64	1
D Аспар. к-та	2C	3H	2O		31	1	70	2
E Глутам. к-та	3C	5H	2O		39	2	78	2
F Фенілаланін	7C	7H			49	2	88	1
G Гліцин		1H			1	1	40	1
H Гістидин	4C	5H	2N		43	1	82	2
I Ізолейцин	4C	9H			33	1	72	1
K Лізин	4C	10H	1N		41	1	80	1
L Лейцин	4C	9H			33	1	72	1
M Метіонін	3C	7H	1S		41	1	80	1
N Аспарагін	2C	4H	1O	1N	31	1	70	2
P Пролін	3C	5H			23	1	62	2
Q Глутамін	3C	6H	1O	1N	39	2	78	2
R Аргінін	4C	10H	3N		55	2	94	2
S Серин	1C	3H	1O		17	1	56	1
T Треонін	2C	5H	1O		25	2	64	1
V Валін	3C	7H			25	2	64	1
W Триптофан	9C	12H	1N		73	1	108	2
Y Тирозин	7C	7H	1O		57	2	96	1

Протонний заряд амінокислотного залишку  $Q_p(Amr)$  є непарним числом, причому таким, що  $\#(Q_p(Amr)) \leq 2$ . Протонні заряди радикалів амінокислот групуються в 14 протонних зарядів: 1, 9, 17, 23, 25, 31, 33, 39, 41, 43, 49, 55, 57, 73. Одинадцять з двадцяти амінокислот мають

співпадаючі протонні заряди. Окрім цього одинадцять з двадцяти амінокислот мають  $\#(Q_p(\text{Amr})) = 1$ .

Відоме представлення тензора кривизни за допомогою двох співорів Вітгена  $\psi, \phi$  [8], які мають відповідно 11 і 9 незалежних параметрів. Формально амінокислоти з  $\#(Q_p(\text{Amr})) = 1$  можна ототожнити з  $\psi$ -компонентами, а амінокислоти з  $\#(Q_p(\text{Amr})) = 2$  ототожнити з  $\phi$ -компонентами тензора кривизни. Це означає, що будова амінокислот-них залишків пов'язана з будовою тензора кривизни чотиривимірного ріманового простору, хоча явно записати співори  $\psi, \phi$ , тобто знайти чотири індекси (співорні індекси можуть бути тільки 1 або 2) для кожного амінокислотного залишку вельми проблематично. Далі ми побудуємо 4-індексні співори для кожного амінокислотного залишку, але тензор кривизни амінокислотного залишку матиме 6 індексів.

Сигнатурою спінора  $p^1q^2$  послідовності амінокислот називатимемо кількість  $p$  амінокислот індексу 1 і кількість  $q$  амінокислот індексу 2.

Сигнатура спінора  $\Omega(\text{Amr})$  (Таблиця 2) амінокислот генетичного коду на основі базисного фізичного вмісту протонів в амінокислотних залишках дорівнює  $11^19^2$ .

Таблиця 2

Співор  $\Omega(\text{Amr})$  амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$Q_p(\text{Amr})$	1	9	17	23	25	25	25	31	31	33	33	39	39	41	41	43	49	55	57	73
$\Omega(\text{Amr})$	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1

Генетичний код вироджений [3]: амінокислотам відповідає різна кількість  $\chi(\text{Am})$  триплетів мРНК. Числа виродженості  $\chi(\text{Am})$ , а саме 1, 2, 3, 4, 6 є відповідними для побудови спінора  $\Theta(\text{Am})$  виродженості амінокислот (Таблиця 3) на основі функції  $\#(\chi(\text{Am}))$ . Сигнатура спінора  $\Theta(\text{Am})$  дорівнює  $12^18^2$ .

Таблиця 3

Співор  $\Theta(\text{Am})$  виродженості амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\chi(\text{Am})$	4	4	6	4	2	4	4	2	2	3	6	2	2	2	1	2	2	6	2	1
$\Theta(\text{Am})$	2	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	2	1	1

Класичний тензор кривизни  $R_{IK,ST}$  симетричний по парах своїх індексів:  $R_{IK,ST} = R_{ST,IK}$ . Ця властивість трансформується таким чином. Пара сигнатур  $11^19^2, 12^18^2$  є основною для побудови ще двох співорів амінокислот, але з такою ж парою сигнатур.

Третій співор амінокислот генетичного коду будується на основі збігів протонних зарядів амінокислотних залишків (Таблиця 4), де введений тимчасовий псевдоспівор  $\Xi'(\text{Amr})$  збігів протонного заряду амінокислот. Індеси псевдоспінора  $\Xi'(\text{Amr})$  співпадають з числом виродженості протонного заряду  $Q_p(\text{Amr})$ .

Таблиця 4

Алфавіт амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C,T,V	D,N	I,L	E,Q	K,M	H	F	R	Y	W
$Q_p(\text{Amr})$	1	9	17	23	25	31	33	39	41	43	49	55	57	73
$\Xi'(\text{Amr})$	1	1	1	1	3	2	2	2	2	1	1	1	1	1

Індекс 2 перетворемо в індекси 2, 2. Індекс 3 необхідно перетворити в індекси 1, 1, 1 або 2, 2, 2.

Співор  $\Xi(\text{Amr})$  збігів протонного заряду амінокислот має два варіанти.

Варіант 1.

## ОГЛЯДИ

Амінокислоти, у яких не співпадають протонні заряди, відносимо до класу 1, парні збіги відносимо до класу 2. Потрійні збіги відносимо до класу 1 (Таблиця 5). Сигнатура спінора  $\Xi_1(\text{Amr})$  дорівнює  $12^1 8^2$ .

Варіант 2.

Амінокислоти, у яких не співпадають протонні заряди, відносимо до класу 1, парні збіги відносимо до класу 2. Потрійні збіги відносимо до класу 2. Потім інвертуємо спінор  $\Xi_2(\text{Amr})$  (Таблиця 5). Сигнатура спінора  $\Xi_2(\text{Amr})$  дорівнює  $11^1 9^2$ .

Таблиця 5

Спінори $\Xi_1(\text{Amr})$ , $\Xi_2(\text{Amr})$ збігів протонного заряду амінокислот генетичного коду																				
Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$Q_p(\text{Amr})$	1	9	17	23	25	25	25	31	31	33	33	39	39	41	41	43	49	55	57	73
$\Xi_1(\text{Amr})$	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1
$\Xi_2(\text{Amr})$	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2

Перш, ніж будувати четвертий спінор  $\Lambda(\text{Amr})$ , який ми назвемо спінором напрямів, доведемо важливе *твердження*: четвертий індекс тензора кривизни  $R_{IK,ST}$  у чотири-ривимірному просторі повністю визначається першими трьома індексами.

*Доказ.* Якщо тензор  $R_{IK,ST}$  має 2 різні індекси, то 4-й індекс завжди співпадає з одним з перших трьох. Якщо тензор  $R_{IK,ST}$  має 3 різні індекси, то перставляючи перші три індекси і міняючи знак  $R_{IK,ST}$  можемо завжди зробити 4-й індекс співпадаючим з одним з перших трьох. Якщо тензор  $R_{IK,ST}$  має 4 різні індекси, то вибір перших трьох індексів однозначно визначає 4-й додатковий індекс.

Вирішальне значення перших трьох індексів тензора кривизни в чотиривимірному просторі полягає в утворенні трьохкомпонентного векторного поля. Спінори  $\Omega(\text{Amr})$ ,  $\Theta(\text{Am})$ ,  $\Xi(\text{Amr})$  є основою для побудови спінора  $\Lambda(\text{Amr})$ , який має два варіанти.

Відзначимо, що кількість різних груп порядку 20 дорівнює  $\#(20) = 5$ . Цієї кількості груп буде достатньо для однозначної нумерації амінокислот.

**Варіант 1.** Сигнатура спінора напрямів повинна бути  $11^1 9^2$ .

Побудуємо 3-спінори амінокислот (Таблиця 6) і розглянемо їх статистику.

Таблиця 6.

3-Спінори амінокислот генетичного коду																				
Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta(\text{Am})$	2	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	2	1	1
$\Xi_1(\text{Amr})$	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1
$\Omega(\text{Amr})$	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1

Виродженість 3-спіноров  $Q_3(\text{Am})$ :

$Q_3(\text{Am})$	2	2	1	1	2	1	1	2
	1	1	1	2	2	2	1	2
	1	2	2	2	1	1	1	2
Кількість	3	4	3	2	1	5	2	
Номер групи	$3_1 4$	$3_2 2_1$	$1$	$5$	$2_2$			

Визначимо характери спінора напрямів  $\Lambda_1(\text{Amr})$  таким чином:

$$\gamma(\text{Am}) = \begin{cases} 2, & \text{якщо } Q_3(\text{Am}) = 4, 5 \\ 1, & \text{якщо } Q_3(\text{Am}) = 1, 2, 3 \end{cases}$$

Занумеруємо 4-спінори номером групи 1...5 в межах кількості груп, які визначаються числом виродженості  $Q_3(\text{Am})$ . У таблиці 7 приведені 4-спінори амінокислот, причому номер

## ОГЛЯДИ

групи порядку 20 має вид  $i_k$ , де  $i$  – номер групи,  $k$  – номер варіанту вибору груп. Нумерація груп довільна, тому в таблиці під кожним неявним номером присутня одна з груп;

$3_1 \ 3_1 \ 3_1 \qquad \qquad \qquad 4 \ 2 \ 5$

наприклад, запис  $G \ S \ P$  може мати вигляд  $G \ S \ P$ .

Таблиця 7

4-Спінори амінокислот генетичного коду																				
Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta$ (Am)	2	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	2	1	1
$\Xi_1$ (Amr)	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1
$\Omega$ (Amr)	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_1$ (Amr)	1	2	1	1	1	2	2	2	2	2	1	1	1	2	2	1	1	2	1	1
Номер гр.	$3_1$	4	$3_1$	$3_1$	$3_2$	4	4	5	5	5	1	$2_1$	$2_1$	5	5	$2_2$	$3_2$	4	$3_2$	$2_2$

Варіант 2. Сигнатура спінора напрямів повинна бути  $12^18^2$ .

Побудуємо 3-спінори амінокислот (Таблиця 8) і розглянемо їх статистику.

Таблиця 8

3-Спінори амінокислот генетичного коду																				
Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta$ (Am)	2	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	2	1	1
$\Xi_2$ (Amr)	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
$\Omega$ (Amr)	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1

Виродженість 3-спінів  $Q_3$ (Am):

$Q_3$ (Am)	2	2	1	1	2	1	1	2
	1	1	1	2	2	2	1	2
	1	2	2	2	1	1	1	2
Кількість	1	2	3	2	3	2	5	2
Номер групи	1	$2_1$	$3_1$	$2_2$	$3_2$	$2_3$	5	$2_4$

Характери спінора напрямів  $\Lambda_2$ (Amr):

$$\gamma(\text{Am}) = \begin{cases} 2, & \text{якщо } Q_3(\text{Am}) = 2 \\ 1, & \text{якщо } Q_3(\text{Am}) = 1, 3, 5 \end{cases}$$

Занумеруємо 4-спінори номером групи 1...5 в межах кількості груп, які визначаються числом виродженості  $Q_3$ (Am) (Таблиця 9).

Таблиця 9

4-Спінори амінокислот генетичного коду																				
Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta$ (Am)	2	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	2	1	1
$\Xi_2$ (Amr)	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
$\Omega$ (Amr)	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_2$ (Amr)	1	2	1	1	1	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
Номер гр.	$3_2$	$2_4$	$3_2$	$3_2$	$3_1$	$2_1$	$2_1$	5	5	5	1	$3_1$	$3_1$	5	5	$2_3$	$2_2$	$2_4$	$2_2$	$2_3$

Таким чином, тензор кривизни амінокислот генетичного коду має вигляд  $R \ i_k, \sigma, \alpha\beta\gamma\delta$ , де  $i_k$  – номер групи порядку 20,  $\sigma$  – тип спінора (1 або 2), індекс  $\alpha\beta\gamma\delta$  позначає 4-спінори. Передбачається, що обидва типи спінора можуть бути присутні в одній молекулі білка.

## ОГЛЯДИ

Далі розглянемо 4-спінори амінокислот, побудовані на основі повного числа прото-нів вільних амінокислот. Спінори  $\Xi(\text{Amr})$  і  $\Omega(\text{Amr})$  залишимо колишніми. Визначимо характери спінора  $\Theta(\text{Am})$  таким чином (Таблиця 1):

$$\rho(\text{Am}) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } Q_p(\text{Am}) \bmod 8 = 0 \\ 2, & \text{інакше} \end{cases}$$

Сигнатура спінора  $\Theta(\text{Am})$  дорівнює  $12^1 8^2$ . Метод побудови спінора напрямів  $\Lambda(\text{Am})$  такий же, як і при побудові спінора  $\Lambda(\text{Amr})$ . У таблицях 10 і 11 приведені результати побудов.

Спінори типу 1 і 2 характеризуються тим, що спінор типу 1 має 3 сигнатури  $12^1 8^2$  і одну сигнатуру  $11^1 9^2$ , а спінор типу 2 – навпаки: 1 сигнатуру  $12^1 8^2$  і три сигнатури  $11^1 9^2$ . Амінокислоти, у яких номер групи дорівнює 6, нумеруються ізоморфними  $b_1, b_2$ , але не тотожними групами.

Таблиця 10

4-Спінори амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta(\text{Am})$	1	1	1	2	1	1	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	1	2	1	2
$\Xi_1(\text{Amr})$	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1
$\Omega(\text{Amr})$	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_1(\text{Amr})$	1	1	1	2	1	1	1	1	1	2	2	1	1	2	2	2	1	2	1	2
Номер гр.	$2_2$	$6_1$	$2_2$	$3_1$	$6_2$	$6_2$	$6_2$	$2_1$	$2_1$	4	4	$2_3$	$2_3$	4	4	$3_1$	$6_1$	1	$6_1$	$3_1$

Таблиця 11

4-Спінори амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta(\text{Am})$	1	1	1	2	1	1	1	2	2	1	1	2	2	1	1	2	1	2	1	2
$\Xi_2(\text{Amr})$	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
$\Omega(\text{Amr})$	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_2(\text{Amr})$	1	2	1	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	1	2	2
Номер гр.	$2_3$	$3_2$	$2_3$	$3_3$	$3_1$	$3_1$	$3_1$	$2_1$	$2_1$	4	4	$2_2$	$2_2$	4	4	$3_3$	$3_2$	1	$3_2$	$3_3$

Далі розглянемо 4-спінори амінокислот, побудовані на основі внутрішньої структури-ри радикалів амінокислот генетичного коду. Приведемо остаточні результати.

По кількості атомів водню **H**:  $12^1 8^2$  (Таблиці 12, 13).

$$\rho(\text{Am}) = \begin{cases} 2, & \text{якщо } Q_H(\text{Amr}) = 1, 4, 6, 9, 10, 12 \\ 1, & \text{якщо } Q_H(\text{Amr}) = 3, 5, 7 \end{cases}$$

Таблиця 12

4-Спінори амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta_H(\text{Amr})$	2	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	2
$\Xi_1(\text{Amr})$	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1
$\Omega(\text{Amr})$	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_1(\text{Amr})$	1	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	1	2	1
Номер гр.	$2_1$	$6_1$	$3_1$	$3_1$	$6_2$	$6_2$	$6_2$	$2_2$	4	4	4	$1_2$	$1_3$	4	$2_2$	$3_1$	$6_1$	$1_1$	$6_1$	$2_1$

4-Спінори амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta_H$ (Amr)	2	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	1	2	2	1	1	1	2	1	2
$\Xi_2$ (Amr)	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
$\Omega$ (Amr)	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_2$ (Amr)	1	1	1	1	2	2	2	1	2	2	2	2	1	2	1	1	1	1	1	1
Номер гр.	2 <sub>1</sub>	3 <sub>1</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	2 <sub>2</sub>	4 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	4 <sub>2</sub>	1 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	2 <sub>2</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>1</sub>	1 <sub>2</sub>	3 <sub>1</sub>	2 <sub>1</sub>

По кількості атомів вуглецю **C**:  $12^1 8^2$  (Таблиці 14, 15). Є 2 варіанти. Розглянемо тільки один з них.

$$\rho(\text{Am}) = \begin{cases} 2, \text{ якщо } Q_C(\text{Amr}) = 0, 1, 2, 9 \\ 1, \text{ якщо } Q_C(\text{Amr}) = 3, 4, 7 \end{cases}$$

Всі побудовані спінори мають сигнатуру  $12^1 8^2$  або  $11^1 9^2$ . Цим підкреслюється зв'язок спінорів амінокислот генетичного коду з хімічною будовою самих амінокислот. Вільні амінокислоти мають спінорну сигнатуру  $12^1 8^2$ , таку ж як і генетичний код. Це означає, що існує тісний зв'язок між структурою генетичного коду і структурою вільних амінокислот.

Таблиця 14

4-Спінори амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta_C$ (Amr)	2	2	2	1	2	2	1	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2
$\Xi_1$ (Amr)	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1
$\Omega$ (Amr)	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_1$ (Amr)	1	1	1	1	1	1	2	1	1	2	2	1	1	2	2	1	2	2	2	1
Номер гр.	3 <sub>1</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>1</sub>	2 <sub>3</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>2</sub>	4 <sub>1</sub>	2 <sub>2</sub>	2 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	2 <sub>1</sub>	2 <sub>1</sub>	4 <sub>2</sub>	4 <sub>2</sub>	2 <sub>3</sub>	4 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	3 <sub>1</sub>

Таблиця 15

4-Спінори амінокислот генетичного коду

Am	G	A	S	P	C	T	V	D	N	I	L	E	Q	K	M	H	F	R	Y	W
$\Theta_C$ (Amr)	2	2	2	1	2	2	1	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2
$\Xi_2$ (Amr)	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2
$\Omega$ (Amr)	1	2	1	1	2	2	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	1
$\Lambda_2$ (Amr)	2	1	2	1	1	1	2	1	1	1	1	2	2	1	1	1	2	2	2	2
Номер гр.	3 <sub>3</sub>	1	3 <sub>3</sub>	2 <sub>3</sub>	2 <sub>2</sub>	2 <sub>2</sub>	3 <sub>1</sub>	2 <sub>1</sub>	2 <sub>1</sub>	4	4	3 <sub>1</sub>	3 <sub>1</sub>	4	4	2 <sub>3</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>2</sub>	3 <sub>3</sub>

### Трьохкомпонентне векторне поле амінокислот

Побудова трьохкомпонентного векторного поля амінокислот ґрунтується на спінорах  $\Theta(\text{Am})$ ,  $\Xi(\text{Am})$ ,  $\Omega(\text{Am})$  з вектором розповсюдження, напрям якого визначається спінором  $\Lambda(\text{Am})$ .

Припустимо, що для двох тривимірних систем координат  $XYZ$  і  $X'Y'Z'$  осі  $Z$  і  $Z'$  співпадають. Розташуємо компоненти 3-спінора амінокислоти  $\{\Theta(\theta_1, \theta_2), \Xi(\xi_1, \xi_2), \Omega(\omega_1, \omega_2)\}$  у відповідність із структурою матриць Паулі:

$$\sigma_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

Кожна амінокислота генетичного коду є 3-спінором, пари компонент якого розташовані уздовж тривимірної системи координат. На рис. 1а показаний 3-спінор амінокислоти генетичного коду.

Компоненти 3-спінора мають наступне розташування:

$$\begin{array}{l} \text{система } ZXY \quad \omega_1 \quad \theta_2 \quad i\xi_2 \\ \text{система } Z'X'Y' \quad -\omega_2 \quad \theta_1 \quad -i\xi_1 \end{array}$$

Розташування спінорів  $\{\Theta(\theta_1, \theta_2), \Xi(\xi_1, \xi_2), \Omega(\omega_1, \omega_2)\}$  щодо осей координат тривимірного простору вибрано нами довільно. Кожен 3-спінор амінокислоти має три власні компоненти, які розміщуються на трьох осях двох суміщених систем відліку і три додаткові (невласні) компоненти, які належать якій-небудь іншій амінокислоті, причому ясно, що будова 3-спінора цієї іншої амінокислоти в даному випадку неістотна.

Перетворимо системи відліку  $ZXY$  і  $Z'X'Y'$  так, щоб площина  $XY'$  поєдналася з валентним кутом при  $\text{Ca}$  – атомі остова поліпептидного ланцюга.

Спочатку перейдемо в ліву систему відліку – осі  $Z$  і  $Z'$  міняються місцями (Рис. 1б). Тепер координати з індексами 1 і 2 лежать у власній системі відліку.

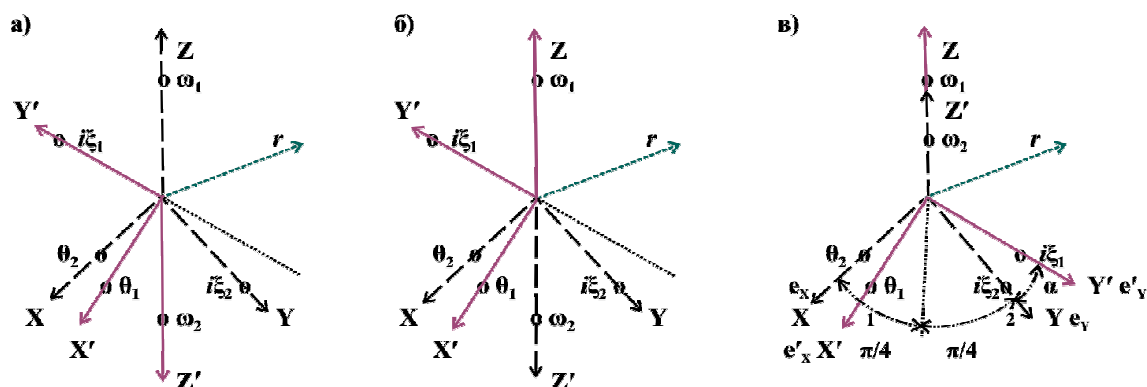


Рис. 1. а). 3-Спінор амінокислот. Осі координат двох систем відліку  $ZXY$  і  $Z'X'Y'$  мають праву орієнтацію. Вектор  $r$  – вектор 3-спінора амінокислоти. б). Ліві системи координат  $XYZ'$  і  $X'Y'Z$ . в). Поєднання двох областей тривимірного простору. У області 1 присутня власна система відліку. Область 2 – обмінна з переплутаними осями координат  $Y$  і  $Y'$ .

Далі змінимо позитивний напрям осей  $Y'$  і  $Z'$ . На мал. 1в показані дві суміщені області тривимірного простору з кутом перекриття (псевдообертання)  $\alpha$  гіперболічних площин  $XY'$  і  $X'Y$ .

Кут при  $\text{Ca}$  – атомі рівний куту між осями  $XY'$ , тобто  $\pi/2 + \alpha$ . Визначимо кут  $\alpha$  виходячи із співвідношень

$$\text{tg}(\pi/4) = 1. \quad \text{tg}(\pi/4 + \alpha) = 2. \quad \text{tg}(\alpha) = 1/3. \quad \alpha = 18,43^\circ. \quad \pi/2 + \alpha = 108,43^\circ,$$

які визначають спінорне представлення валентного кута при  $\text{Ca}$  – атомі. Експериментальне значення валентного кута при  $\text{Ca}$  – атомі  $\cong 109,5^\circ$ . У межах температурних флуктуацій  $\cong 5^\circ$  це значення співпадає з його спінорним представленням.

Отже, остаточне розміщення компонент 3-спінора амінокислоти має вигляд:

$$\begin{array}{l} \text{система } Z'XY \quad \omega_2 \quad \theta_2 \quad i\xi_2 \\ \text{система } ZX'Y' \quad \omega_1 \quad \theta_1 \quad i\xi_1 \end{array}$$



Далі перейдемо до безпосередньої побудови трьохкомпонентного векторного поля.

Обертання навколо осей  $X$  і  $Y'$  відповідає поворот на кут  $\varphi$  і  $\psi$  навколо зв'язків  $N - C_\alpha$  і  $C_\alpha - C$ . Суть обертань в поєднанні вектора  $r$  3-спінора з віссю  $Z$ . Якщо додаткові компоненти 3-спінора відсутні, то за допомогою кута  $\alpha$  ми можемо спроектувати три власні компоненти 3-спінора на одну з систем відліку, наприклад  $XYZ'$ , в якій і визначається вектор  $r$ .

Зробимо поворот на кут  $\varphi$  навколо осі  $X$ , потім за допомогою псевдообертання на кут  $\alpha$  навколо осі  $Z'$  перейдемо до обертання на кут  $\psi$  навколо осі  $Y$ . Вектор  $r$  поєднається з віссю  $Z$  і його напрям (по або проти осі  $Z$ ) визначається значенням спінора  $\Lambda(Am)$ . Компоненти 3-спінора визначають трьохкомпонентне векторне поле, направлене уздовж осі  $Z$ .

Позначимо буквою  $e$  орти осей площини  $XY'$ .

Кожному гіперболічному повороту

$$e_x = \cos^{-1} \alpha e'_x + \operatorname{tg} \alpha e_y$$

$$e'_y = \operatorname{tg} \alpha e'_x + \cos^{-1} \alpha e_y$$

який суміщає пару осей  $X'Y'$  з парою осей  $XY'$ , відповідає евклідове псевдообертання на кут  $\alpha$

$$e'_x = \cos \alpha e_x - \sin \alpha e_y$$

$$e'_y = \sin \alpha e_x + \cos \alpha e_y$$

яке суміщає пару осей  $XY$  з парою осей  $X'Y'$ .

Отже, тривимірний гіперболічний простір розділений на області з кутом перекриття (зацеплення)  $\alpha$ . Це і є те середовище, в якому розповсюджується трьохкомпонентне векторне поле. Але у евклідовому просторі немає перекриття, оскільки псевдообертання на кут  $\alpha$  - це простий перехід від системи відліку  $XYZ'$  до системи відліку  $X'Y'Z$  при суміщених осях  $Z'$  і  $Z$ . Це значить, що у евклідовому просторі трьохкомпонентне векторне поле зосереджене локально, отже, ми можемо говорити про його розповсюдження. Разом з вектором напряму трьохкомпонентне векторне поле розповсюджується в просторі  $R^4$ .

Тепер ясно, чому ми будували тензор кривизни ріманового простору амінокислот. Дотичний простір білка локально має гіперболічну геометрію, в якому, проте, трьохкомпонентне векторне поле нерухоме.

Далі розглянемо обертання на кути  $\varphi$  і  $\psi$  навколо зв'язків  $N - C_\alpha$  і  $C_\alpha - C$  і покажемо як зменшити конфігураційний простір поліпептидного ланцюга. Припустимо, що обертання на кут  $\varphi$  або  $\psi$  має 20 значень. Суть цього припущення у тому, що перемноження цих значень утворює групу порядку 20, якраз ту, яка входить в нумерацію тензора кривизни, тобто  $i_k$ . Результату обертань на кути  $\varphi$  або  $\psi$  відповідає точка в груповому просторі. Ця точка завжди співпадає з фізично спостережуваною амінокислотою. Це необхідно, оскільки в евклідовому просторі трьохкомпонентне векторне поле кожної амінокислоти має одну і ту ж масу - масу атома водню, але різні компоненти. Поле розповсюджується уздовж молекули білка і, звичайно, має зв'язок з конфігураційним простором через груповий простір. Але конфігураційний простір самого поля вельми малий (поле одне) і визначається у евклідовому, а не в гіперболічному просторі, в якому поле нерухоме і, отже, не має конформацій. Якби в груповому просторі амінокислота переходила у віртуальний стан (тобто представлялася іншою амінокислотою), то вийшло б, що у віртуальному евклідовому просторі поле також віртуальне, що неможливе. Простір  $R^4$  - це реальний простір, в якому розповсюджується реальне трьохкомпонентне векторне поле.

### Рімановий конфігураційний простір амінокислот

Класичний тензор кривизни у чотиривимірному просторі має 256 компонент, серед яких 112 тотожно дорівнюють нулю.

Будова ріманового конфігураційного простору амінокислот визначається на основі властивостей 3-спінора амінокислот. Перш за все, виділимо два типи 4-спінора амінокислот. Далі врахуємо, що 3-спінор з 4-спінора можна утворити  $4^3 = 64$  способами, припускаючи, що

компоненти спінора по осях  $XYZ'$  і  $X'Y'Z$  можуть співпадати. Два 4-спінора дають разом 128 станів ріманового конфігураційного простору амінокислот.

Наступні 64 стани ріманового конфігураційного простору амінокислот побудуємо таким чином. Виділимо з 4-спінора амінокислот кожного типу чотири 3-спінора з різними компонентами, тобто поєднання з чотирьох компонент по три. Наприклад, для 4-спінора 1-типу зафіксуємо чотири 3-спінора по осях  $XX'$ ,  $YY'$ ,  $ZZ'$ :

$$\{\Theta, \Xi_1, \Omega\}, \{\Theta, \Xi_1, \Lambda_1\}, \{\Theta, \Omega, \Lambda_1\}, \{\Xi_1, \Omega, \Lambda_1\},$$

а для 4-спінора 2-типу зафіксуємо інші 3-спінори:

$$\{\Theta, \Omega, \Lambda_2\}, \{\Theta, \Omega, \Xi_2\}, \{\Theta, \Lambda_2, \Xi_2\}, \{\Omega, \Lambda_2, \Xi_2\}.$$

Значення фіксації 3-спінорів полягає в об'єднанні 4-спінорів різних типів.

Для 4-спінора 1-типу введемо інтервальні 4-спінори початку і кінця амінокислотної послідовності:  $\Theta, \Xi_1, \Omega, \Lambda_1 = \{2221, 2222\}$ .

Тепер кожен 3-спінор має 8 варіантів розміщення своїх компонент по координатних осях  $XX'$ ,  $YY'$ ,  $ZZ'$ . Тоді повне число зафіксованих 3-спінорних розміщень компонент по координатних осях дорівнює 64.

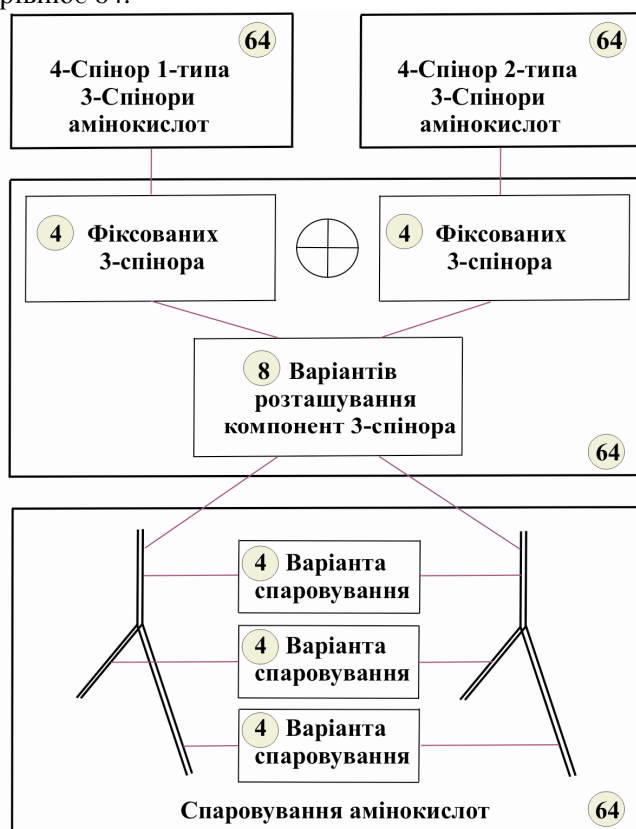


Рис. 2. Схема внутрішніх зв'язків чотиривимірного ріманового конфігураційного простору амінокислот.

Далі знайдемо 64 стани ріманового конфігураційного простору амінокислот, що залишилися. Для цього розглянемо спаровування двох амінокислот. Спаровування амінокислот локалізує трьохкомпонентне векторне поле.

Для кожних двох пар осей  $X_1X'_1, X_2X'_2$  (аналогічно для пар осей  $Y_1Y'_1, Y_2Y'_2$  і  $Z_1Z'_1, Z_2Z'_2$ ) є 4 варіанти спаровування. Наприклад, спаровується амінокислота, 3-спінор якої має вигляд  $\{\theta_2, \xi_1, \omega_1\}$ , з амінокислотою з 3-спінором вигляду  $\{\xi_2, \omega_2, \lambda_2\}$ . Суть спаровування полягає у взаємному заповненні вільних місць 3-спінора амінокислоти компонентами 3-спінора іншої амінокислоти:

$$\text{перша амінокислота } X_1Y'_1Z_1 = \{\theta_2, \xi_1, \omega_1\},$$

друга амінокислота  $X_2Y_2Z'_2 = \{\xi_2, \omega_2, \lambda_2\}$ .

Після спаровування:

перша амінокислота  $X_1Y_1Z_1 = \{\theta_2, \omega_2, \omega_1\}$ ,  $X'_1Y'_1Z'_1 = \{\xi_2, \xi_1, \lambda_2\}$ ,

друга амінокислота  $X_2Y_2Z_2 = \{\xi_2, \omega_2, \omega_1\}$ ,  $X'_2Y'_2Z'_2 = \{\theta_2, \xi_1, \lambda_2\}$ .

При спаровуванні амінокислот відбувається “паралельне перенесення” компонент 3-спінора без переплутування його компонент.

На рис. 2 показана схема внутрішніх зв'язків чотиривимірного ріманового конфігураційного простору амінокислот. Окрім паралельного перенесення компонент 3-спінора для двох амінокислот можливі 9 варіантів переплутування компонент.

### Спаровування амінокислот

Всі 64 варіанти спаровування амінокислот при паралельному перенесенні компонент 3-спінора можна розділити на класи еквівалентних конфігурацій спарених станів трьохкомпонентного векторного поля. Пара польових конфігурацій може бути:

симетричною – польові конфігурації двох амінокислот співпадають;

антисиметричною – польові конфігурації двох амінокислот додаткові;

майже симетричною – польові конфігурації двох амінокислот розрізняються однією інволюцією компонент;

майже антисиметричною – польові конфігурації двох амінокислот додаткові, але розрізняються однією інволюцією компонент.

Перш за все, розглянемо спаровування амінокислот з утворенням впорядкованої послідовності. При спаровуванні наступна амінокислота передає компоненти 3-спінора попередній амінокислоті. Компоненти 3-спінора, які розташовані на осях XYZ, утворюють трьохкомпонентне векторне поле; компоненти 3-спінора, які розташовані на осях X'Y'Z' утворюють вектор спаровування. Напрямок вектора спаровування від попередньої амінокислоти до наступної є лише окремим випадком вибору напрямку спаровування і виконується для повністю впорядкованої послідовності амінокислот (Рис. 3а).

Якщо в якості вектору напрямку вибрати одну з компонент поля (наприклад, уздовж осі Z), то послідовність амінокислот буде частково впорядкованою (Рис. 3б).

Приведені два типи впорядкування амінокислот є основними. Проте передача параметрів, тобто компонент 3-спінора амінокислоти іншим амінокислотам, може бути довільною. Це значить, що компоненти 3-спінора амінокислоти можуть передаватися одній, двом або трьом різним амінокислотам. Важливо, щоби всі вільні компоненти 3-спінора кожної амінокислоти були заповнені. Тільки в цьому випадку утворюється одне трьохкомпонентне векторне поле у молекулі білка. Ясно, що схема передачі параметрів 3-спіноров амінокислот між собою повинна бути такою, щоби структура згорнутої молекули білка була єдино можливою.

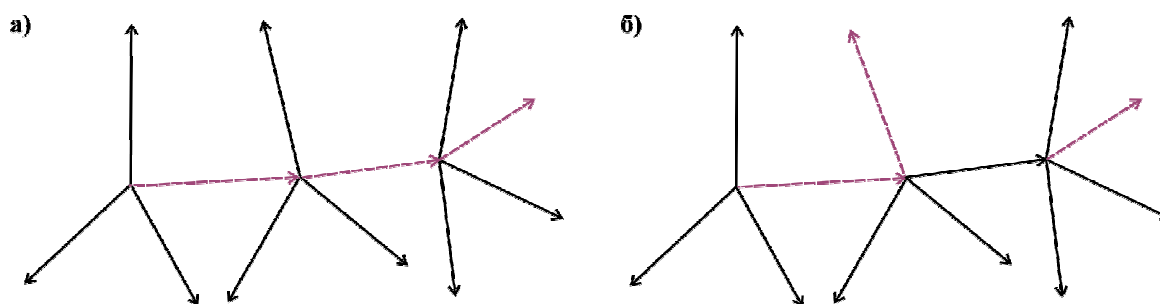


Рис. 3. а) Трьохкомпонентне векторне поле повністю впорядкованої послідовності амінокислот. Стрілками показані вектори напрямку поля. б) Трьохкомпонентне векторне поле частково впорядкованої послідовності амінокислот.

Можна припустити, що фрагмент амінокислотної послідовності з частково впорядкованим трьохкомпонентним векторним полем відповідає активному центру молекули білка.

Далі розглянемо фіксоване калібрування трьохкомпонентного векторного поля. Нехай  $A_i$  – його чотири компоненти. Тоді  $\delta_i A_i = 0$ . Це співвідношення є характерним для трьохкомпонентного векторного поля. Розвитком цього характеру поля є вибірка чотирьох триплетів 3-спінорів амінокислот. Виконати умову фіксованого калібрування для 3-спінорів амінокислот легко – для цього достатньо триплет 3-спінорів замкнути в кільце. Нехай  $\alpha_i$  – чотири 3-спінори амінокислот з умовою  $\delta_i \alpha_i = 0$ . Суть цього співвідношення у тому, що для всіх дванадцяти 3-спінорів амінокислот необхідно виконати заповнення вільних компонент. Ясно, що це завжди можливо.

Кожна вибірка триплета 3-спінорів амінокислот типу 1 автоматично індукує вибірку триплета 3-спінорів амінокислот типу 2. Є 5 способів вибірки чотирьох 3-спінорів амінокислот типу 1 і 2. Повний об'єм вибірки четвірок 3-спінорів амінокислот складає всі 256 станів чотиривимірному ріманового простору. Будь-яка повна вибірка четвірок 3-спінорів амінокислот індукує подвоєння ріманового простору, тобто подвоєння білкової молекули.

В процесі повної вибірки четвірок 3-спінорів амінокислот можуть змінюватися групи  $i_k$  4-спінорів амінокислот. Але груп  $i_k$  – всього 5 і всі вони одного порядку. Всі вони топологічно еквівалентні і можуть бути пов'язані між собою з допомогою компонент зв'язності.

Перемішування спінорів типу 1 і 2 при утворенні трьохкомпонентного векторного поля призводить до подвоєння білкової молекули і подвоєння самого трьохкомпонентного векторного поля.

При передачі вільних параметрів спінорів між амінокислотами можна враховувати кути між відповідними осями, тобто використовувати метричний тензор для формування трьохкомпонентного векторного поля.

## Висновки

Структура нативного білка обумовлена присутністю в ньому трьохкомпонентного векторного поля. Це поле утворюється на основі обміну компонентами 3-спінорів амінокислотних залишків. Фіксоване калібрування трьохкомпонентного векторного поля в рімановому просторі приводить до подвоєння білкової молекули. У груповому просторі амінокислотний залишок не змінює свого фізичного стану, отже, незалежно від типу 4-спінорів амінокислот трьохкомпонентне векторне поле при подвоєнні молекули білка також подвоюється.

1. Райдер Л. Квантовая теория поля / Л. Райдер. – М.: Мир, 1987. – 511с.
2. Рашевский П. К. Риманова геометрия и тензорный анализ / П. К. Рашевский. – М.: УРСС, 2003. – 644 с.
3. Сингер М. Гены и геномы / М. Сингер, П. Берг. – Москва: Мир, 1998. – Т1.– 374с.
4. Фок В. А. // Изв. АН СССР, серия физ. / В. А. Фок – 1935. - № 2. – С. 169 – 179.
5. Эллиот Дж. Симметрия в физике / Дж. Эллиот, П. Добер. – М.: Мир, 1983. – Т2. – 416 с.
6. Branden C. Introduction to protein structure / C. Branden, J. Tooze. – New York: Garland Publishing, Inc. – 2nd ed., 1999. – 410p.
7. Levinthal C. Are there pathways for protein folding? / C. Levinthal // J. Chim. Phys. – 1968. - Vol. 65. – P. 44 – 45.
8. Witten L. Invariants of General Relativity and Classification of Spaces / L. Witten // Phys. Rev. – 1959. - Vol. 113, N1. – P. 357 – 362.

*В. В. Щербик, Л. П. Бучацкий*

Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, Украина

## ТРЕХКОМПОНЕНТНОЕ ВЕКТОРНОЕ ПОЛЕ В МОЛЕКУЛЕ БЕЛКА

Структура нативного белка обусловлена присутствием в нем трехкомпонентного векторного поля. Поле образуется на основе обмена компонентами 3-спинов аминокислотных остатков. Фиксированное калибрование трехкомпонентного векторного поля в римановом пространстве приводит к удвоению белковой молекулы. В групповом пространстве аминокислотный остаток

не изменяет своего физического состояния, следовательно, независимо от типа 4-спиноров аминокислот трехкомпонентное векторное поле при удвоении молекулы белка также удваивается.

*Ключевые слова: 3-спиноры аминокислот, трехкомпонентное векторное поле*

*V. V. Stcherbic, L. P. Buchatsky*

Taras Shevchenko Kyiv National University, Ukraine

#### THE THREE-COMPONENT VECTOR FIELD IN PROTEIN MOLECULE

The structure of native protein is conditioned by being at it three-component vector field. This field appears on the basis of exchange by the components of 3-spinors of amino acid tailings. Fixed gauge of three-component vector field in Riemann space brings into doubling of protein molecule. In group space an amino acid remain does not change it, physical state, consequently, regardless of type of 4-spinors of amino acids, the three-component vector field at doubling of protein molecule is also doubled.

*Key words: 3-spinors of amino acids, three-component vector field*

Рекомендує до друку

В.В. Грубінко

Надійшла 15.02.2009