

Рис. 3. Рассчитанная спектральная плотность излучения электронов с энергиями 2,4 МэВ (фактор Лоренца  $\gamma = 5,8$ ) — кривая 2 и 5 МэВ ( $\gamma = 11$ ) — кривая 1 при однократном прохождении кремниевой мишени толщиной  $T = 30$  мкм и широком окне коллиматора

циркулирующих частиц на мишени. Частицы могут совершать десятки оборотов, и не менее 10–20 циркуляций совершается в пределах требуемого угла излучения. Так же надежно достигается смещение траекторий частиц вдоль плоскости мишени.

Спектр ПРИ определяется в основном угловым раствором  $\Delta\theta$  фотонного канала, так что относительная ширина  $\Delta\omega/\omega$  линии излучения оказывается порядка  $\Delta\theta/tg\varphi_B$ . Лишь при большой величине

$\Delta\theta$  ширина частотного спектра определяется естественным электродинамическим пределом, по порядку равным обратной величине фактора Лоренца  $\gamma$  (рис. 3). При этом средняя плотность интенсивности ПРИ достигает несколько десятков Вт/(ср·А).

Таким образом, анализ показывает, что возможно создать эффективный монохроматический источник на основе механизма ПРИ в тонкой кристаллической мишени, используя электроны с энергией 2–5 МэВ. Умеренная потребляемая мощность и компактность подобного устройства (ср., напр., с [7]) открывают реальные возможности для многообразных приложений.

#### Литература

1. Ter-Mikaelian M. High Energy Electromagnetic Processes in Condensed Media. N. Y.: Wiley-Interscience, 1972.
2. Барышевский В., Феранчук И. // ЖЭТФ. 1971. 61. С. 944.
3. Гарибян Г., Шу И. // ЖЭТФ. 1971. 61. С. 930.
4. Grishin V., Ishkhanov B., Likhachev S. // Proc. Int. Conf. PAC97. Canada, Vancouver, 1997. V. 1. P. 3866.
5. Brun R., Bruyant F., Maine M. GEANT3 (User's Guide), Data handling. CERN, Geneva, Switzerland, 1992.
6. Nasonov N., Safronov A. // Proc. Int. Symp. RREPS-93, Oct. 1993, Tomsk, Russia.
7. Andriyashkin A., Kaplin V., Pristrup M. et al. // Appl. Phys. Lett. 1988. 72, No. 11. P. 1385.

Поступила в редакцию  
23.06.99

## БИОФИЗИКА

УДК 577.3

### ОСОБЕННОСТИ КОНФОРМАЦИИ ПЛАСТОХИНОНА В РАЗЛИЧНЫХ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЯХ И МЕХАНИЗМ ДЕЙСТВИЯ ДИУРОНА В ФОТОСИНТЕЗЕ

С. В. Полтев, С. А. Кузнецова, А. А. Белов, А. К. Кукушкин

(кафедра биофизики)

С помощью полумпирических методов квантовой химии рассчитаны наиболее вероятные конфигурации молекул пластохинона в различных состояниях и гербицидов, ингибирующих электронный транспорт в местах связывания пластохинонов. Показано, что пластохинон в однократно восстановленном состоянии имеет повернутую концевую группу. Структура молекулы диурона сходна со структурой однократно восстановленного пластохинона, что может быть причиной прочного связывания молекулы диурона с центром связывания хинона  $Q_B$  в реакционном центре фотосистемы 2.

Места функционирования пластохинонов являются самыми медленными участками электронного транспорта в первичных процессах фотосинтеза высших растений. Эти участки играют ключевую роль в регуляции эффективности фотосинтеза. Исследованию физико-химических свойств пластохинонов и механизму их функционирования посвящена обширная литература (см., напр., [1]). Большая часть работ, посвященных пластохинонам, касается их тер-

модинамических свойств (см. [2]). В последнее время стало ясно, что в первичных процессах фотосинтеза, запускаемых одиночными квантами света, определяющими являются свойства отдельных молекул, которые участвуют в этих процессах. В настоящей работе предполагалось выяснить связь между структурой и функцией пластохинонов как переносчиков электронов и протонов, а также сделать некоторые заключения о структуре мест связывания пластохи-

нонов в реакционном центре фотосистемы 2 (ФС 2) и в цитохромном  $b_6 f$ -комплексе. Для этого с помощью полуэмпирических методов квантовой химии мы рассчитали расположение ядер в исследуемых молекулах и их электронную плотность, отвечающие минимальной энергии.

### Методика

Квантовохимические расчеты проводились методом модифицированного пренебрежения двухатомным перекрытием (MNDO) с помощью программ МОРАС и HyperChem 5.0. Этот метод является дальнейшим развитием метода частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием (MINDO/3), применяемого, как правило, для расчетов конформаций молекул, энергий активаций и потенциалов ионизаций. В методе MNDO для вычисления интегралов, встречающихся в матричных элементах фокиана, применяется новая параметризация, основанная на мультипольном разложении потенциала взаимодействия [3]. Этот метод, как указано в работе [4], удовлетворительно описывает такие свойства молекул, как теплота образования, конфигурация молекул, дипольный момент, энергия ионизации, сродство к электрону, поляризуемость, частоты внутримолекулярных колебаний.

### Результаты и обсуждение

Были исследованы молекулы пластохинона в нейтральном, однократно восстановленном и двукратно восстановленном состояниях, пластохинола и молекулы ингибиторов электронного транспорта — дибромотимохинона (DMBIB) и дихлорофенил-диметил-мочевины (диурина, DCMU). Результаты расчетов оптимальных конфигураций по программам МОРАС и HyperChem 5.0 оказались практически одинаковыми. Для расчета электронной структуры и построения изоповерхностей электронной плотности

использовалась программа HyperChem 5.0. Поскольку окислительно-восстановительные свойства пластохинонов определяются свойствами кольцевой части молекулы, мы в своих расчетах использовали молекулу с одним звеном в хвостовой части. Ее структурная формула и нумерация атомов показаны на рис. 1. На рис. 2 изображена структура нейтрального (а), однократно (б) и двукратно (в) восстановленных пластохинонов и структура ингибитора DCMU (г). Из рис. 2 видно, что в отличие от пластохинона в нейтральном и дважды восстановленном состоянии пластохинон в однократно восстановленном состоянии и DCMU имеют повернутую концевую группу. Структура пластохинола сходна со структурой нейтрального пластохинона. Анализ результатов расчетов по программе МОРАС показывает, что при однократном восстановлении пластохинона концевая группа поворачивается примерно на  $50^\circ$  относительно связи  $C_3-C_{10}$ , в результате чего атом углерода  $C_{19}$  из положения под плоскостью кольца переходит в положение над его плоскостью, и двугранный угол между плоскостями, проходящими через  $C_{19}-C_{10}-C_3$  и  $C_{10}-C_3-C_2$ , равный в нейтральном пластохиноне  $-37^\circ$ , увеличивается до  $86^\circ$ . При двукратном восстановлении пластохинон возвращается к прежней конфигурации, присущей ней-

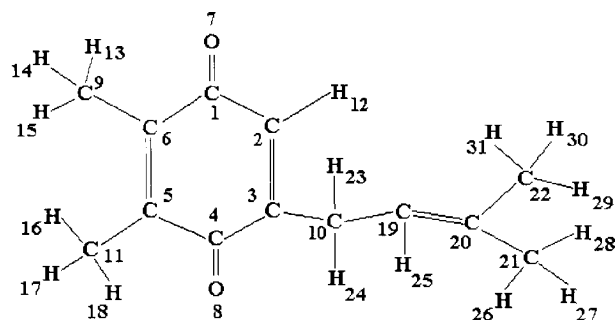


Рис. 1. Нумерация атомов в молекуле пластохинона, использованная при расчетах методом MNDO

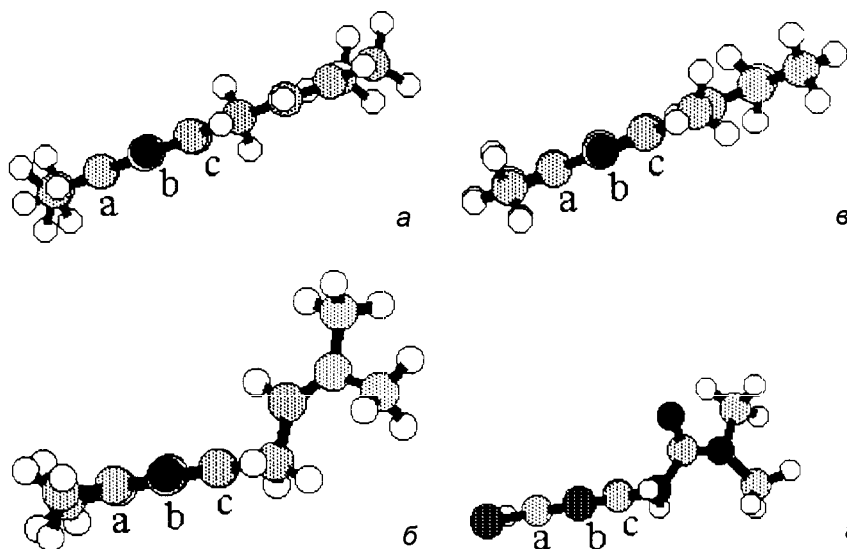


Рис. 2. Структура молекул нейтрального (а), однократно восстановленного (б) и двукратно восстановленного (в) пластохинона и молекулы диурина  $C_6H_3Cl_2NHCON(CH_3)_2$  (г), соответствующая минимальной теплоте образования. Плоскость кольца (abc) перпендикулярна плоскости рисунка

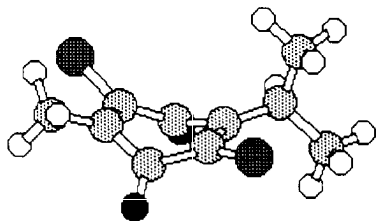


Рис. 3. Структура молекулы дибромотимохинона  
 $C_6O_2Br_2CH_3CH(CH_3)_2$

тральному пластохинону (см. рис. 2). Такой поворот концевой группы, по-видимому, может быть причиной сильного связывания однократно восстановленного хинона и DCMU в месте нахождения  $Q_B$  реакционного центра ФС 2 и ингибиторного действия DCMU. С другой стороны, пластохинон и пластогидрохинон имеют весьма сходную структуру, существенно отличную от структур однократно восстановленного пластохинона и DCMU. Сходство структур объясняет сравнительно легкое связывание и отрыв этих молекул в месте нахождения  $Q_B$ . Из исследования структуры ингибитора электронного транспорта DVMIB (рис. 3) видно, что она существенно отличается от структур хинонов и DCMU в различных состояниях: кольцо углеродов в молекуле DVMIB не плоское. По-видимому, окружение пластохинона в цитохромном  $b_6f$ -комплексе, в котором действует DVMIB, имеет строение, существенно отличное от соответствующего окружения в реакционном центре ФС 2.

## АСТРОНОМИЯ

УДК 521.135

### ОПТИМАЛЬНЫЕ ИМПУЛЬСНЫЕ ТРАЕКТОРИИ ПРЯМОГО ПЕРЕЛЕТА В ТОЧКУ ЛИБРАЦИИ $L_3$ В ОГРАНИЧЕННОЙ ПЛОСКОЙ КРУГОВОЙ ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ В СИСТЕМЕ СОЛНЦЕ-ЗЕМЛЯ

И. А. Субаев\*)

Исследуется ограниченная плоская круговая задача трех тел в системе Солнце-Земля с целью поиска оптимальных двухимпульсных решений для прямого перелета с орбиты ИСЗ высотой 185,2 км в коллинеарную точку либрации  $L_3$ . Найдены два семейства траекторий — «быстрых» и «медленных». Для обоих проведены вычисления модуля базис-вектора Лоудена на предмет возможности подачи третьего импульса для дальнейшей оптимизации.

Исследования космического пространства характеризуются в современную эпоху переходом от отдельных экспериментов к широким программам. Космос стал лабораторией, в которой ведется систематическое изучение физических процессов: как в элементарных частицах, так и в гигантских источниках энергии, какими являются квазары, радиогалактики, взрывы Сверхновых.

Подобные исследования весьма удобно проводить в коллинеарных точках либрации. В частности, в 1978 г. был запущен космический аппарат (КА) ISEE-3 в точку либрации  $L_3$  для исследования Солнца.

## Выводы

1. Методами квантовой химии рассчитаны наиболее вероятные конфигурации и электронные плотности молекул пластохинона в различных состояниях и ингибиторов электронного транспорта DVMIB и DCMU.

2. В однократно восстановленном состоянии пластохинон имеет повернутую концевую группу по сравнению с пластохиноном в нейтральном и дважды восстановленном состояниях. Структура молекулы DCMU наиболее сходна со структурой однократно восстановленного пластохинона, что объясняет прочное связывание этих молекул в центре связывания хинона в реакционном центре ФС 2.

Работа частично поддержана грантом по программе «Университеты России».

## Литература

1. Крамер У., Крофтс Э. // Фотосинтез / Под ред. Говинджи. М.: Мир. 1984. Т. 1. С. 540.
2. Gupta O.A., Bloch D.A., Cherepanov D.A., Mulikidjanian A.Y. // FEBS Lett. 1997. 412. P. 490.
3. Dewar M.J.S., Thiel W. // J. Am. Chem. Soc. 1977. 99. P. 4899.
4. Dewar M.J.S., Zoebisch E.G., Healy E.F., Stewart J.J.P. // J. Am. Chem. Soc. 1985. 107. P. 3902.

Поступила в редакцию  
09.06.99

Для осуществления проекта «Трехмерная плазма и эксперимент с энергичными частицами» НАСА 1 ноября 1994 г. был запущен космический аппарат «WIND»: сначала на очень эксцентричную геоцентрическую орбиту, а затем, после разгона его вблизи Луны, — в точку либрации между Солнцем и Землей —  $L_2$ . КА, долетев до точки либрации, повернул обратно и теперь движется по серии очень эксцентричных орбит вокруг Земли. С целью изучения ранней стадии развития вселенной путем измерения свойств космического микроволнового излучения фона по всей небесной сфере осенью 2000 г. будет запущен спутник «MAP» на лунную вспомо-

\*) Пушинская радиоастрономическая обсерватория Астрокосмического центра ФИАН.