分子手性和生物学时间箭头

徐京华　丁达夫
（中国科学院上海生物化学研究所）

众所皆知，分子手性是生命物质的最显著的特征. 但是它的生物的和物理学的含义都不清楚. 我们试图探索这个问题，先研究手性分子旋光强度的对称性质，然后指出这个手性参数如何影响着手性分子系统的热力学性质.

在时间倒逆算子 $T^{(1)}$ 作用下，手性分子的旋光强度 $R_{ab}=Im\langle a|\mu|b\rangle\cdot\langle b|m|a\rangle$ 改变符号如下：

$$TR_{ab}=TIm\langle a|\mu|b\rangle\cdot\langle b|m|a\rangle=R_{ba}=-R_{ab},$$

式中 μ 是电偶极矩算子，m 是磁偶极矩算子.

若 C 是手性变换算子，即它把手性分子变换成对映体，则在 C 的作用下旋光强度也改变符号如下：

$$CR_{ab}=-R_{ab}.$$

这些特殊的对称性质表明，旋光分子不仅在三维空间中而且在四维时——空流形中是手性的.

以圆极化光作为一个不对称外场的例子，在它的作用下，手性分子系统的相互作用 Hamiltonian 部分可获得与手性参数相应的对称性质.

所以，我们有

$$TH\fallingdotseq H,\quad CH\fallingdotseq H,\quad TCH=CTH=H,$$

此处 H 是分子系统的 C- 数 Hamiltonian.

利用 Hamiltonian 的这些性质，手性分子系统的弛豫方程具有下列对称关系：

时间倒逆

非手性系统	手性系统
$C_{\mu\nu}(t)=r_\mu r_\nu C^*_{\nu\mu}(t)$	$C_{\mu\nu}(t)=r_\mu r_\nu C^*_{\nu\mu}(t)$
$\Omega_{\mu\nu}=-r_\mu r_\nu\Omega_{\mu\nu}$	$\Omega_{\mu\nu}=-r_\mu r_\nu\Omega_{\mu\nu}$
$\langle F_\mu(t)\cdot F_\nu(0)^*\rangle=r_\mu r_\nu\langle F_\nu(t)\cdot F_\mu(0)^*\rangle^*$	$\langle F_\mu(t)\cdot F_\nu(0)^*\rangle=r_\mu r_\nu\langle F_\nu(t)\cdot F_\mu(0)^*\rangle^*$
$\Lambda_{\mu\nu}=r_\mu r_\nu\Lambda^*_{\nu\mu}$	$\Lambda_{\mu\nu}=r_\mu r_\nu\Lambda_{\nu\mu}$

空间反应

非手性系统	手性系统
$C_{\mu\nu}(t)=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu C_{\mu\nu}(t)$	$C_{\mu\nu}(t)=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu C_{\mu\nu}(t)$
$\Omega_{\mu\nu}=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\Omega_{\mu\nu}$	$\Omega_{\mu\nu}=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\Omega_{\mu\nu}$
$\langle F_\mu(t)\cdot F_\nu(0)^*\rangle=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\langle F_\mu(t)\cdot F_\nu(0)^*\rangle$	$\langle F_\mu(t)\cdot F_\nu(0)^*\rangle=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\langle F_\mu(t)\cdot F_\nu(0)^*\rangle$
$\Lambda_{\mu\nu}=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\Lambda_{\mu\nu}$	$\Lambda_{\mu\nu}=\varepsilon_\mu\varepsilon_\nu\Lambda_{\mu\nu}$

本文 1980 年 4 月 1 日收到.

这里的 r 和 ε 分别是动力学变量的时间标志和空间宇称. $C_{\mu\nu}$ 是相关矩阵的元素，$\Omega_{\mu\nu}$ 是频率矩阵的元素，F 是随机力，$\Lambda_{\mu\nu}$ 是动力学系数，而"$\sim\sim$"表示关于与原系统对映的系统取值的符号.

可见，为了计及分子系统的手性，Onsager 倒易关系必须予以修正.

$$\Lambda_{ij} = \Lambda_{ji} \neq \Lambda_{ji}, \quad \Lambda_{ij} - \Lambda_{ji} \neq 0,$$

动力系数矩阵的反对称部分有非零元素这件事表明，系统进入循环运动，而且亦是时间不对称的. 所以，时间演化的方向不仅由外场而且亦由它本身的手性所确定.

进而，我们借助于 Prigogine 的因果动力学证明，对应于不对称外场两个相互对映的分子系统会有不同的熵产速率，一个系统的速率比消旋体的速率大，另一个系统的速率比消旋体的速率小. 随着时间的推移，最后这两个系统会有十分不同的发展. 相对而言，这两个系统有着不同的时间箭头. 在这个意义上来说，生物学的时间箭头为我们研究自然选择的物理基础提供了一条线索.

参 考 文 献

[1] Wigner-Schwinger's Theory of Time Inversion Operation, ref. Frauenfelder, H. & Henly, E. M., *Nuclear and Particle Physics* (A: Background and Symmetries), Benjamin, W. A., Inc., London, 1975, 442—430.

[2] Berne, B. J. & Pecora, R., *Dynamic Light Scattering*, Wiley, New York, 1976, 279—296.

[3] Prigogine, I., George, C., Henin, F. & Rosenfeld, L., *Chem. Scripta*, 4 (1973), 5—32.