

# Оглавление

|  |     |
|--|-----|
| Раздел VIII. Электронные свойства биополимеров . . . . .   | 7   |
| ГЛАВА 24. Основы квантового описания молекул . . . . .   | 9   |
| § 1. Введение . . . . .  | 9   |
| § 2. Стационарные и нестационарные состояния квантовых систем.<br>Принцип суперпозиции состояний . . . . .                 | 14  |
| 2.1. Гармонический осциллятор . . . . .  | 18  |
| 2.2. Нормальные координаты и нормальные частоты системы свя-<br>занных осцилляторов . . . . .                              | 24  |
| § 3. Стационарная теория возмущений . . . . .  | 31  |
| § 4. Нестационарная теория возмущений — теория переходов . . . . .   | 36  |
| § 5. Модель иона молекулы водорода. Природа химической связи . . . . .   | 41  |
| § 6. Вариационный метод нахождения стационарных состояний . . . . .  | 51  |
| § 7. Метод молекулярных орбиталей . . . . .  | 55  |
| § 8. Проявление электронных свойств биополимеров . . . . .   | 57  |
| § 9. Оптическая активность биополимеров . . . . .  | 63  |
| ГЛАВА 25. Механизмы переноса заряда и миграции энергии в биомолеку-<br>лярных структурах . . . . .                         | 68  |
| § 1. Туннельный эффект . . . . .   | 71  |
| 1.1. Квазиклассическое приближение. Формула Гамова . . . . .   | 71  |
| 1.2. Расчет прозрачности потенциальных барьеров различной фор-<br>мы: прямоугольной, треугольной, параболической . . . . . | 76  |
| 1.3. Адиабатическое приближение . . . . .  | 84  |
| § 2. Теория переноса заряда . . . . .  | 92  |
| 2.1. Формулировка проблемы. Локализованные состояния . . . . .   | 93  |
| 2.2. Электрон-колебательные взаимодействия . . . . .   | 95  |
| 2.3. Распад возбужденного состояния квантовых систем . . . . .   | 110 |
| 2.4. Анализ температурной зависимости скорости реакции элект-<br>ронного переноса . . . . .                                | 117 |
| 2.5. Общий анализ формул Джортнера и Маркуса . . . . .   | 126 |
| 2.6. Электронный матричный элемент $V_e'$ . . . . .  | 134 |
| 2.7. Применение теории электронного переноса к биологическим<br>системам . . . . .   | 139 |

|  |            |
|--|------------|
| § 3. Роль водородных связей в процессах электронного транспорта в биомолекулярных системах . . . . .                 | 149        |
| 3.1. Изменение локального электростатического потенциала при переносе протона вдоль линии водородной связи . . . . . | 151        |
| 3.2. Туннелирование протона в двухъямном потенциале (вычисление $k_0$ ) . . . . .                                    | 155        |
| 3.3. Деформация водородной связи . . . . .   | 156        |
| 3.4. Деформация водородных связей и конформационная динамика белка . . . . .   | 158        |
| 3.5. Анализ температурной зависимости величин $\tau$ , $\varphi$ и $\Delta\varphi$ . . . . .                         | 159        |
| 3.6. Температурная зависимость разности свободной энергии . . . . .  | 165        |
| § 4. Современное состояние теории электронного переноса в конденсированных средах (проблемы и перспективы) . . . . . | 168        |
| § 5. Динамика фотоконформационного перехода . . . . .  | 170        |
| § 6. Механизмы миграции энергии . . . . .  | 184        |
| 6.1. Индуктивно-резонансный механизм . . . . .   | 184        |
| 6.2. Обменно-резонансный перенос энергии . . . . .   | 188        |
| 6.3. Экситонный механизм . . . . .   | 190        |
| <b>ГЛАВА 26. Механизмы ферментативного катализа . . . . .</b>  | <b>194</b> |
| § 1. Физико-химическое описание и биофизические модели ферментативных процессов . . . . .                            | 194        |
| § 2. Электронно-конформационные взаимодействия в ферментативном катализе . . . . .                                   | 201        |
| § 3. Динамика фермент-субстратных взаимодействий . . . . .   | 203        |
| § 4. Электронные взаимодействия в активном центре фермента . . . . .   | 212        |
| § 5. Молекулярное моделирование структуры фермент-субстратного комплекса . . . . .                                   | 219        |
| <b>Часть IV. Биофизика фотобиологических процессов . . . . .</b>   | <b>225</b> |
| <b>Раздел IX. Первичные процессы фотосинтеза . . . . .</b>   | <b>227</b> |
| <b>ГЛАВА 27. Трансформация энергии в первичных процессах фотосинтеза . . . . .</b>                                   | <b>229</b> |
| § 1. Общая характеристика начальных стадий фотобиологических процессов . . . . .                                     | 229        |
| § 2. Общая схема первичных процессов фотосинтеза . . . . .   | 232        |
| § 3. Структурная организация пигмент-белковых комплексов антенны . . . . .   | 240        |
| § 4. Механизмы трансформации энергии возбуждения в фотосинтетической мембране . . . . .                              | 248        |
| § 5. Реакционные центры пурпурных фотосинтезирующих бактерий . . . . .   | 262        |
| § 6. Пигмент-белковый комплекс фотосистемы I . . . . .   | 276        |
| § 7. Пигмент-белковый комплекс фотосистемы II . . . . .  | 284        |
| § 8. Переменная и замедленная флуоресценция . . . . .  | 294        |

|   |            |
|---|------------|
| <b>ГЛАВА 28. Электронно-конформационные взаимодействия в первичных процессах фотосинтеза . . . . .</b>            | <b>306</b> |
| § 1. Методы лазерной спектроскопии . . . . .  | 307        |
| § 2. Исследование сверхбыстрых процессов в реакционных центрах фотосинтеза . . . . .                              | 316        |
| § 3. Начальное разделение зарядов в РЦ . . . . .  | 333        |
| § 4. Механизмы окисления цитохрома в реакционных центрах . . . . .  | 340        |
| § 5. Конформационная динамика и перенос электрона в реакционных центрах . . . . .                                 | 348        |
| § 6. Перенос электронов и формирование контактных состояний в системе хинонных акцепторов ( $PQ_AQ_B$ ) . . . . . | 352        |
| § 7. Математические модели первичных процессов переноса электрона в фотосинтезе . . . . .                         | 357        |
| <b>Раздел X. Первичные фотопроцессы в биологических системах . . . . .</b>  | <b>371</b> |
| <b>ГЛАВА 29. Фотопревращения бактериородопсина и родопсина . . . . .</b>  | <b>373</b> |
| § 1. Структура и функции пурпурных мембран . . . . .  | 374        |
| § 2. Фотоцикл бактериородопсина . . . . .   | 379        |
| § 3. Первичный акт фотопревращений бактериородопсина . . . . .  | 388        |
| § 4. Модельные системы, содержащие бактериородопсин . . . . .   | 394        |
| § 5. Молекулярные основы зрительной рецепции. Зрительные клетки (палочки) . . . . .                               | 399        |
| § 6. Фотохимический цикл родопсина . . . . .  | 404        |
| § 7. Первичный акт фотопревращения родопсина . . . . .  | 411        |
| <b>ГЛАВА 30. Фоторегуляторные и фотодеструктивные процессы . . . . .</b>  | <b>424</b> |
| § 1. Общая характеристика фоторегуляторных процессов . . . . .  | 424        |
| § 2. Фоторецепторы и молекулярные механизмы процессов фоторегуляции. Фитохромы . . . . .                          | 425        |
| § 3. Общая характеристика фотодеструктивных процессов . . . . .   | 436        |
| § 4. Фотохимические реакции в ДНК и ее компонентах . . . . .  | 439        |
| § 5. Особенности действия высокоинтенсивного лазерного УФ-излучения на ДНК (двухквантовые реакции) . . . . .      | 445        |
| § 6. Фотореактивация и фотозащита . . . . .   | 448        |
| § 7. Действие ультрафиолетового света на белки . . . . .  | 450        |
| § 8. Сенсибилизированное повреждение биомолекул в фотодинамических реакциях . . . . .                             | 454        |
| § 9. Фотосенсибилизированные эффекты в клеточных системах . . . . .   | 459        |
| <b>Рекомендуемая литература . . . . .</b>   | <b>471</b> |
| <b>Предметный указатель . . . . .</b>   | <b>475</b> |