

Danuta Frąckowiak

MODELOWANIE ANIZOTROPOWYCH UKŁADÓW BIOLOGICZNYCH *

Słowa model i modelowanie są modne, a więc nadużywane często i niejednoznacznie. Pierwotnie w naukach przyrodniczych i technicznych modelowanie polegało na obserwacji zjawiska podobnego do zjawiska badanego, lecz odbywającego się w innej skali - jak to jest np. w przypadku modeli pojazdów lub budynków w tunelach aerodynamicznych. Przy tym teoria podobieństwa fizycznego określa warunki, w których musi się odbywać zjawisko modelowe, takie, aby na jego podstawie można było wyciągnąć wnioski dotyczące zjawiska naturalnego [1]. Są to np. podobieństwa geometryczne, kinematyczne etc. [1]. Tego typu modelowanie jest procedurą bardziej złożoną niż np. wykonanie modelu odlewniczego, ale ciągle jeszcze jest czynnością doświadczalną, gdyż ustalenie zakresu warunków, w którym tego typu postępowanie jest dozwolone, odbywa się na ogół eksperymentalnie.

Jabłoński [2] zwrócił uwagę na upowszechnienie się w fizyce współczesnej innego typu - bardziej abstrakcyjnych modeli, których przykładem może być model atomu, ulegający w ciągu lat ewolucji. Modele „abstrakcyjne” dotyczą zjawisk znajdujących się poza obszarem naszej bezpośredniej obserwacji. Są konstrukcjami myślowymi, z których wyciąga się metodą dedukcyjną wnioski sprawdzane doświadczalnie. Jeśli natrafi się na niezgodność - model musi być zmodyfikowany lub nawet odrzucony.

W obu typach modeli istotne jest pytanie, czy uzyskane dla nich wyniki dostarczają wiarygodnych informacji o badanym obiekcie. Jeśli zgodzimy się, że świat istnieje i jest poznawalny, to wynik poprawnego i powtarzalnego doświadczenia możemy uważać za pewny i ostateczny, ale jedynie dla tych warunków, w których to

*Referat wygłoszony na I Seminarium Biologii Teoretycznej w Poznaniu (26-27 X 1981). Omówione badania wykonano w ramach tematów MR.II.7.I.1 koordynowanego przez Zakład Fizjologii Roślin PAN w Krakowie oraz R.III.13.4.3 koordynowanego przez Instytut Biochemii i Biofizyki Uniwersytetu Łódzkiego.

doświadczenie było przeprowadzone. Wszelka ekstrapolacja poza zakres tych warunków obarczona jest niepewnością. Przy tym jeśli wynik eksperymentu jest pozytywny, można go uważać za jakościowo pewny, natomiast wyniki negatywne obowiązują jedynie w zakresie dokładności doświadczenia, co często prowadzi do konieczności modyfikacji modeli „abstrakcyjnych” w miarę rozwoju technik eksperymentalnych. Istnieją jeszcze inne typy modeli. Niekiedy różne zjawiska fizyczne opisane są podobnymi wyrażeniami matematycznymi, np. mechaniczne i elektryczne tłumione drgania wymuszone są opisane takimi samymi równaniami różniczkowymi, w których w określony sposób wymienia się pewne wielkości mechaniczne na elektryczne. Można więc zbudować mechaniczny model elektrycznego układu drgającego, lub odwrotnie elektryczny model mechanicznego układu.

Obiór modelu zależy od celu doświadczenia - jeśli ma być ono pomocą naukową - powinno być możliwie poglądowe - jeśli zaś chodzi o wynik ilościowy - musi dawać możliwość dokładnej rejestracji wyniku.

Można tworzyć poglądowe mechaniczne modele nawet bardzo wyspecjalizowanych molekularnych obiektów. Przykładem jest „strunowy model Platta”, na którym można demonstrować zależność rozkładu swobodnych elektronów w układzie wiązań sprzężonych związków pierścieniowych od warunków brzegowych, czyli od kształtu układu wiązań sprzężonych [3]. Tego typu modelowanie stanowi również podstawę analogowych urządzeń pozwalających badać złożone układy bez wykonywania pracochłonnych obliczeń. Można również na modelu ustalać właściwości takich układów, aby następnie szukać wyjaśnienia tych właściwości na drodze rozważań teoretycznych. Modelowaniem nazywa się też czasem, szczególnie w biologii, szukanie kształtu wyrażenia matematycznego, opisującego przebieg badanego zjawiska.

Jak widać z tego niekompletnego przeglądu - modelowe badania powinny być ściślej zdefiniowane. Badania, które prowadzimy są modelowe w tym sensie, że obiekty badane odtwarzają niektóre właściwości interesujących nas układów biologicznych, lecz są od nich dużo prostsze. Jedną z cech wielu elementów organizmów żywych jest zorientowana, anizotropowa struktura. Bardzo często takie struktury mają charakter ciekłokrystaliczny, tj. są ciekłymi zorientowanymi układami, o właściwościach pośrednich pomiędzy zwykłymi cieczami i „prawdziwymi” kryształami. W swej książce *W o l k e n* [4] podaje bardzo wiele przykładów zarówno nematycznych (osiowo zorientowanych), jak i helikalnych (śrubowych) cie-

kiokrystalicznych struktur biologicznych. Modele ciekłokrystaliczne wykazują wiele właściwości podobnych do tych naturalnych struktur, nawet wtedy, gdy utworzone są z innych związków chemicznych.

W pracach naszych interesujemy się przede wszystkim procesem fotosyntezy, zachodzącym w roślinach zielonych, glonach i niektórych typach bakterii. Aparat fotosyntetyczny tych organizmów skonstruowany jest z anizotropowych układów lamellowych, w których rozmieszczone są pigmenty zarówno „antenowe” absorbujące światło na potrzeby procesu fotosyntezy, jak i centra reaktywne, w których zachodzi zamiana energii wzbudzenia molekuł na energię chemiczną wykorzystywaną do syntezy. Energia wzbudzenia błądzi pomiędzy antenami różnego typu, aż trafi do centrum reaktywnego. Proces ten zależy oczywiście od wzajemnej orientacji anten - a raczej właściwie od orientacji momentów przejść elektronowych pigmentów antenowych.

Zarówno proces migracji energii, jak i mechanizm odpowiedzialny za poszczególne akty przekazania wzbudzenia pomiędzy antenami mogą być badane w modelowych układach anizotropowych [5,6]. Przedmiotem badań są sztuczne układy (matryce anizotropowe), w których umieszczone są barwniki lub kompleksy barwnikowo-białkowe wydzielone z organizmów fotosyntetycznych. Wzajemne organizacje grup chromoforowych, absorbujących i często również emitujących światło, mogą być zmieniane poprzez zmianę organizacji matrycy i oddziaływania - matryca-barwnik. Badane układy mogą być bardzo proste - zawierające jedynie grupy barwnikowe - wtedy interesują nas kształty tych grup, orientacja momentów przejść w szkielecie molekuly i zależność wzajemnych oddziaływań od ich względnej orientacji. Mogą też być bardzo złożone zawierające całe kompleksy barwnikowo-białkowe.

Metodą pomiarową jest przede wszystkim spektroskopia światła spolaryzowanego liniowo lub kołowo. Układem anizotropowym może być komórka ciekłokrystaliczna, która składa się z dwóch przezroczystych elektrod, na których umieszczona jest również przejrzysta warstwa orientująca molekuly ciekłego kryształu. Silne oddziaływanie pomiędzy barwnikiem i matrycą ciekłokrystaliczną powoduje podobną orientację wydłużonych molekuł ciekłego kryształu i zagregowanych z nimi, w znany sposób, molekuł pigmentu. Orientacje te mogą być zmienione za pomocą pól elektrycznego i magnetycznego, zastosowanych do takiego układu łączenie lub oddzielenie [6,7].

W komórkach ciekłokrystalicznych można też badać wpływ anizotropowego otoczenia na właściwości widmowe pigmentów [8]. Jest to istotne, gdyż zwykle z anizotropii absorpcji światła spolaryzowanego wyciąga się wnioski dotyczące orientacji barwników w układach biologicznych [9]. Jak stwierdziliśmy, anizotropowy ośrodek zaburza silnie polaryzację widm absorpcji, co oczywiście trzeba uwzględnić przy wnioskowaniu z takich pomiarów o strukturze układu [8, 10]. W układach takich, można również badać wpływ silnych pól elektrycznych na właściwości widmowe pigmentów [7, 11, 12].

W oświetlonych lamellach barwniki znajdują się także w polu elektrycznym, natężenie którego jest mierzone poprzez ich tzw. elektrochromowe zmiany widmowe [13]. Takie zmiany muszą być uprzednio wycechowane za pomocą układów modelowych. Poza tym oddziaływania międzymolekularne prowadzące do wygaszania fluorescencji barwników też silnie zależą od natężenia pola elektrycznego [7, 11, 12], gdyż zmieniają konfigurację układu utworzonego z barwnika i wygaszacza. Efekt ten ma również znaczenie biologiczne, gdyż śledzenie wydajności fluorescencji barwników fotosyntetycznych dostarcza wiadomości o podziale energii wzbudzenia pomiędzy tzw. układami barwnikowymi. Zmiany wydajności spowodowane zaburzeniem przez pole elektryczne powstałe na membranie powinny być uwzględnione przy śledzeniu losu energii wzbudzenia w aparacie fotosyntetycznym.

W badaniach biologicznych układów stosuje się nie tylko światło liniowo, ale i kołowo spolaryzowane. Wiele makromolekuł biologicznych wykazuje kołowy dichroizm (CD), tj. różnie absorbuje lewo i prawokołowo spolaryzowane składowe światła [14]. Nawet w takich układach, które nie wykazują sygnału CD, pojawia się kołowy dichroizm w silnym polu magnetycznym (efekt magnetycznego kołowego dichroizmu MCD). Efekt CD może być związany zarówno z asymetrią molekuł, jak i z asymetrycznym np. spiralnym ich rozłożeniem w polu. Takie właściwości można odtworzyć w tzw. skręconych strukturach nematycznych, za pomocą których można wyjaśnić pewne efekty obserwowane w widmach CD in vivo [7]. Badano również widma MCD roztworów chlorofili w ciekłych kryształach [16] dostarczające informacji o tych ważnych molekułach.

Oddziaływania międzymolekularne i migrację energii wzbudzenia badano również w innym układzie anizotropowym - odkształconej mechanicznie folii polimerowej. Przebadano cały szereg takich układów stwierdzając, że do badania kompleksów barwnikowo-białkowych,

np. biliprotein, najlepiej nadaje się folia z alkoholu poliwinylowego [17]. W foliach badano cały szereg kompleksów, wnioskując o kształcie, rozłożeniu i roli poszczególnych typów ich grup chromoforowych [18, 19].

Innym anizotropowym efektem jest efekt fotowoltaiczny, który wykazuje wiele kompleksów biologicznych [20, 21]. Anizotropia efektu polega na kierunkowości generowanego pola elektrycznego, zależnej od rozłożenia kompleksów oraz kierunku wiązki światła czynnego. Efekt ten badano w układzie złożonym z przezroczystych elektrod - półprzewodnikowej i metalowej. Badanie kinetyki efektu fotowoltaicznego dostarcza informacji o oddziaływaniach wewnątrz-molekularnych, denaturacji kompleksów itp. Poza tym wykazuje, które grupy mogą brać udział w tunelowaniu nośników ładunku (elektronu lub dziury) do pasma przewodnictwa lub walencyjnego elektrody półprzewodnikowej [20]. Nasuwa się pytanie, do jakiej grupy modeli należy zaliczyć nasze anizotropowe układy. Nie są to modele „abstrakcyjne” - konstrukcje myślowe, ale właściwie jest to pewna kontynuacja modeli eksperymentalnych, dla których granice stosowalności muszą być starannie i krytycznie doświadczalnie wyznaczone. Modele te pozwalają badać układy wprawdzie sztuczne, ale o tyle prostsze od biologicznych, że łatwiej wyniki uzyskane na ich podstawie poddają się interpretacji fizycznej. Dalej kolejno przez stopniowe komplikowanie stosowanego modelu możemy zbliżyć się do warunków naturalnych, ciągle śledząc interesujący nas proces fizyczny i odszukując go wśród innych efektów - wynikłych z rosnącej zależności układu. Wreszcie możemy porównać badane zjawiska w układzie modelowym i w organizmie. Jest to żmudna i najeżona trudnościami droga, w czasie której ciągle musimy pamiętać, że model w najlepszym razie może służyć jako niekompletny obraz swego odpowiednika w układzie biologicznym.

Artykuł wpłynął do Redakcji 5 X 1982

LITERATURA

- [1] Wielka Encyklopedia Powszechna PWN, t. 7, Warszawa 1966, s. 393.
- [2] Jabłoński A., Postępy Fizyki, 20, 541-546 (1969).
- [3] Frąckowiak D., Postępy Fizyki, 7, 155-181 (1956).
- [4] Wołken J. J., Brown G. M., Liquid Crystals and Biological Structures, Academic Press, New York - San Francisco - London 1979.
- [5] Frąckowiak D., Bauman D., Manikowski H., Martynski T., Biophysical Chemistry, 6, 369-377 (1977).

- [6] Frąckowiak D., Photochem. Photobiol., 28, 377-382 (1978).
- [7] Frąckowiak D., Bauman D., Stillman M. J., Biochim. Biophys. Acta, 681, 273 (1982).
- [8] Frąckowiak D., Acta Phys. Polon., A54, 757-760 (1978).
- [9] Norden B., Zagad. Biof. Współcz., 3, 165-202 (1978).
- [10] Bauman D., Wróbel D., Biophys. Chem., 17, 83 (1980).
- [11] Frąckowiak D., Bauman D., Bentkowska I., Photochem. Photobiol., 33, 779 (1981).
- [12] Frąckowiak D., Bauman D., Acta Phys. Polon., A62, 157 (1982).
- [13] Frąckowiak D., Zagad. Biof. Współcz., 8, 3-26 (1983).
- [14] Gregory R. D. F., Linear and Circular Dichroism: The Organization of Photosynthetic Membrane, [w:] Primary Process of Photosynthesis, Elsevier, Amsterdam 1977, pp. 465-493.
- [15] Weiss Ch., Jr. J. Mol. Spectroscopy, 44, 37 (1972).
- [16] Frąckowiak D., Stillman M. J., Bauman D., Manikowski H., Biochim. Biophys. Akta (w przygotowaniu do druku).
- [17] Fiksiński K., Frąckowiak D., Spectroscopy Letters, 13, 873 (1980).
- [18] Frąckowiak D., Fiksiński K., Pieńkowska H., Photobiochem. Photobiophys., 2, 21-34 (1981).
- [19] Frąckowiak D., Bull. Acad. Polon. cl II 27, 161 (1979).
- [20] Frąckowiak D., Erokhina L. G., Jadżyn Cz., Shubin L. M., Shkuropatov A. Yu., Photosynthetica, 15, 36-48 (1981).
- [21] Frąckowiak D., Jadżyn Cz., Bull. Acad. Polon. cl II 27, 523 (1979).

Danuta Frąckowiak

MODELLING OF THE ANISOTROPIC BIOLOGICAL SYSTEMS

S u m m a r y

The author gives a review of many types of models and model experiments existing in exact sciences especially in biology. One of the properties of many parts of living systems is their oriented anisotropic structure. These structures can be considered to be liquid crystals - so liquid crystals are a good model of the anisotropic biological systems. Investigations of liquid crystals properties using different measuring techniques give us a lot of information concerning many processes occurring in living organisms.

Prof. dr hab. DANUTA FRĄCKOWIAK
Instytut Fizyki
Politechniki Poznańskiej
ul. Piotrowo 3
60-965 Poznań