

## О ВОЗМОЖНОСТИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ НЕЙТРАЛЬНЫХ ТОКОВ В ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Л.Л.Морозов, В.В.Кузьмин, В.И.Гольданский

Проявления нейтральных токов в молекулярных системах могут быть обнаружены в химических детекторах с нарушением симметрии. Даются оценки минимальных необходимых масштабов соответствующих экспериментов.

В последние годы интенсивно обсуждается возможность наблюдения нейтральных токов в макроскопических процессах <sup>1</sup>. Одно из возможных проявлений нейтральных токов в химических превращениях — существование различия энергий взаимодействия электронов атомных орбиталей с ядром в киральной молекуле и ее зеркальном изомере. Теоретические оценки  $\Delta E = E_L - E_D$  ( $L$  и  $D$  — молекулы — левые и правые зеркальные изомеры) лежат в диапазоне  $10^{-15} \div 10^{-20}$  эВ <sup>2, 3</sup>. Эта энергетическая неэквивалентность может, в принципе, приводить к различию констант скоростей реакций, к которым участвуют изомеры. Назовем это различие фактором преимущества (AF) одной из изомерных форм в химических реакциях. AF может приводить к возникновению состояния органической среды с нарушенной зеркальной симметрией. Попытки обнаружить этот эффект, измеряя оптическую активность продуктов химических реакций, привели к многочисленным артефактам. Как было показано нами <sup>4, 5</sup>, это обусловлено тем, что накопление эффекта (теоретические оценки  $AF \approx 10^{-13} \div 10^{-18}$  <sup>2, 3</sup>) до измеримого уровня в химических реакциях невозможно из-за неизбежного присутствия "шумов" различной природы. В этой статье мы кратко обсудим возможности обнаружения нейтральных токов химическими детекторами, устроенными специальным образом, т. е. использующими химические системы, способные к спонтанному нарушению симметрии.

Рассмотрим для определенности одну из многочисленных <sup>5-7</sup> схем, предложенную еще в 1953 г. Франком <sup>8</sup>,  $S + L \xrightarrow{k_L} 2L$ ,  $S + D \xrightarrow{k_D} 2D$ ,  $L + D \xrightarrow{k_a} S'$ , где  $S, S'$  — акиральные молекулы,  $k_i$  — константы скоростей соответствующих реакций. В качестве меры наблюдаемой асимметрии выберем величину киральной поляризации <sup>6</sup>  $\eta = (L - D) / (L + D)$  (где  $L$  и  $D$  — количества зеркальных изомеров в системе). Уравнение, описывающее эволюцию киральной поляризации имеет вид <sup>5</sup>:

$$\dot{\eta} = \epsilon(1 - \eta^2) + k\theta(\eta - \eta^3), \quad (1)$$

где  $\theta = L + D$ ,  $k = k_a / (k_L + k_D)$ , а  $\epsilon = (k_L - k_D) / (k_L + k_D)$  — мера AF. Симметричное состояние неустойчиво, и в системе возникает одно из двух состояний  $\eta_s = 1$  или  $\eta_s = -1$ . В реальных условиях это происходит лишь при достижении параметрами системы критического уровня и  $|\eta_s| < 1$ , но подбором параметров  $\eta_s$  может быть доведена до любой, требуемой для детектирования, величины. Каким образом такую систему можно использовать в качестве детектора нейтральных токов? Легко видеть, что возникновение киральной поляризации этого детектора не является ни мерой AF, ни даже свидетельством влияния нейтральных токов на химические превращения. Нарушение симметрии происходит как при  $\epsilon \neq 0$ , так и при  $\epsilon = 0$  спонтанно, вследствие развития исходной флуктуации киральной поляризации  $\eta_{of}$ . Поскольку  $\eta_{of}$  — случайная величина, то в единичном испытании мы не можем определить, произошло ли нарушение симметрии вследствие AF или независимо от наличия или отсутствия этого фактора. Экспериментальная мера AF может быть введена лишь в серии экспериментов с таким детектором, исходя из того факта, что при  $AF = 0$  вероятность найти детектор в состоянии  $\eta_s$  и  $-\eta_s$  одинакова, а при  $AF \neq 0$  эти вероятности зависят от AF. Действительно, как следует из уравнения (1), эволюция системы к сос-

тожениям  $\eta_s = 1$  и  $\eta_s = -1$ , грубо определяемая знаком  $\dot{\eta}$  в начальный момент времени, т. е. соотношением  $\eta_{of}$  и AF, приводит к  $\eta_s = 1$  при  $\eta_{of} > -\epsilon\xi$  и к  $\eta_s = -1$  при  $\eta_{of} < -\epsilon\xi$  (для определенности  $\epsilon > 0, \xi \sim 1$ ). Если  $\eta_{of}$  — случайная величина, принадлежащая некоторому распределению с дисперсией  $\sigma_\eta$ , то для вероятностей обнаружить детектор в состояниях  $\eta_s = 1$  или  $\eta_s = -1$  имеем следующую грубую оценку:

$$\omega = W(+1) - W(-1) \approx \begin{cases} \epsilon / \sigma_\eta & \text{при } \epsilon < \sigma_\eta \\ 1 & \text{при } \epsilon \geq \sigma_\eta \end{cases}$$

Точное выражение для  $\omega$ <sup>5,7</sup> имеет вид

$$\omega = \text{Erf}(\epsilon / \sigma_\eta). \quad (2)$$

Флуктуации киральной поляризации определяются ресурсом кирального материала в детекторе<sup>7</sup>:  $\sigma_\eta = \theta^{-1/2}$ , следовательно,  $\omega = \text{Erf}(\epsilon\sqrt{\theta}) \sim \epsilon\sqrt{\theta}$  (при малых  $\epsilon$ ) и экспериментальной мерой AF является минимальное количество кирального материала, необходимое для эксперимента, где удастся получить статистически достоверное различие вероятности обнаружения состояния детектора с противоположными знаками киральной поляризации:  $AF_{\text{эксп}} \sim \theta^{-1/2}$ . Поскольку  $\epsilon\sqrt{\theta}$  представляет собой отношение сигнал/шум для детектора, то полученное соотношение (2) не является следствием рассмотренной модели и должно выполняться при различных способах реализации таких детекторов. Верхняя граница экспериментально обнаружимого значения AF по существу определяется запасом сырья, имеющимся в распоряжении экспериментатора. Необходимо подчеркнуть, что речь идет не о разовом количестве вещества в детекторе, а в общем ресурсе вещества, используемом в серии экспериментов. Приведем следующие оценки. Если в эксперименте используются  $10^3$  кг кирального материала ( $10^4$  молей или  $10^{28}$  частиц), то при  $AF \approx 10^{-15}$  вероятность того, что поляризация детектора в единичном испытании обусловлена именно AF есть  $\omega \approx 10^{-1}$ , и статистически достоверно AF детектируется в серии из  $10^2$  экспериментов, в которых общий ресурс использованного вещества составляет  $10^{30}$  молекул ( $10^6$  моль).  $AF \approx 10^{-17}$  достоверно обнаруживается в системе производительностью  $10^3$  кг/с в эксперименте длительностью 1 год ( $\theta = 10^{34}$  молекул). Таким образом, простой закон  $\epsilon\sqrt{\theta}$  позволяет предложить экспериментальную процедуру и количественную меру проявления нейтральных токов в молекулярных системах с использованием химических детекторов с нарушением симметрии.

Приведенные выше оценки позволяют получить важный вывод о масштабе необходимого эксперимента, в зависимости от величины обусловленного нейтральными токами фактора преимущества AF. Вопросы о конкретных физических характеристиках детектора этого фактора преимущества, условиях и чистоте проведения эксперимента требуют дополнительных исследований.

#### Литература

1. Хрипович И.Б. Несохранение четности в молекулярных системах. М.: Наука, 1979.
2. Rein D.W. In *Origins of Optical Activity in Nature*, D.S.Walker (ed) Elseiver, Amst.-N.Y., 1979.
3. Hegstrem R.A., Rein D.W. Sanders L. J. Chem. Phys., 1980, 73, 2329.
4. Morozov L.L., Kuz'min V.V., Goldanskii V.I. Sov. Sci. Rev., ser. Phys. Chem. Biol., 5, V.P.Sculachev (ed), Overseas Publ. Ass., Amst., 1984.
5. Morozov L.L., Goldanskii V.I. In *Synergetics*, M. Krinskii (ed), Springer, N.-Y.-Lond., 1984.
6. Морозов Л.Л. ДАН СССР, 1978, 241, 483.
7. Morozov L.L., Kuz'min V.V., Goldanskii V.I. *Origins of Life*, 1983, 13, 119.
8. Frank F. Biochim. Biophys. Acta, 1953, 11, 459.