Ein systemtheoretisches Modell zur Biogenese

A System Theoretic Model of Biogenesis

OTTO E. RÖSSLER

Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Universität Tübingen (Prof. Dr. F. F. SEELIG)

(Z. Naturforsch. 26 b, 741—746 [1971]; eingegangen am 15. März 1971)

Three types of abstract chemical reaction systems are described: 1. The generalized catalytical system, 2. the generalized autocatalytical system, 3. a spontaneously evolving chemical system. The significance of the second and third system for a very early phase of pre-biological evolution is discussed.

Es wird nicht von einem systemtheoretischen Prozeß die Rede sein, der die Entstehung des ersten lebenden Systems erklären kann, sondern nur von einem Prozeß, der die Entstehung eines autonom wachsenden chemischen Systems, das eine bestimmte Eigenschaft mit diesem System gemeinsam hat, erklären kann. Es ist die Eigenschaft, nach einem Mechanismus der schrittweisen Abwandlung zum „Urahn“ einer fast unbegrenzten Vielfalt von verschiedenartigen, autonom wachsenden chemischen Systemen werden zu können.

Der zu beschreibende Prozeß ist nur dann von Interesse, wenn er einfach ist, das heißt, wenn er auf einem einzigen, leicht darzustellenden Prinzip beruht und ohne außergewöhnliche chemische Voraussetzungen auskommt.

Diese Forderung ist nicht notwendigerweise unrealistisch. Von der Technik her ist man es gewohnt, aus sehr gewöhnlichen Bauelementen nach einfachen Prinzipien Systeme mit sehr ungewöhnlichen Eigenschaften zu synthetisieren. In analoger Weise können durch die „Zusammenschaltung“ von einfachen chemischen Reaktionen chemische Systeme hergestellt werden, deren Eigenschaften gegenüber denen ihrer Elemente neu und ungewöhnlich sind. Es ist sogar möglich, daß chemische Systeme dieser Art sich von selbst bilden.

Diese grundsätzliche Möglichkeit soll zunächst an einem Modellbeispiel illustriert werden. Die Eigenschaften dieses Systems, beziehungsweise die eines wichtigen Spezialfalls, werden anschließend bei der Darstellung des eigentlichen Systems benötigt.

Ein Beispiel

Es ist bekannt, daß manche chemischen Substanzen die Eigenschaft haben, bei Zugabe einer anderen Substanz unter bestimmten Voraussetzungen spontan mit dieser zu reagieren, wobei eine oder mehrere neue Substanzen entstehen. In schematischer Darstellung $A + B \rightarrow C + D$, oder gleichbedeutend:

(Der Einfachheit halber ist Irreversibilität angenommen.) Manchmal bilden sich aus einem Produkt spontan noch weitere Folgeprodukte:

Man kann aber auch zu dem Produkt C der ersten Reaktion eine weitere Substanz E hinzugeben, so daß es mit ihr zur spontanen Bildung weiterer Produkte kommt, usf.:

Beim Entwurf von Reaktionsketten bestehen also viele Freiheitsgrade. In manchen Ketten bleibt über viele Stufen ein Teil der Atome der Ausgangssubstanz A erhalten, in anderen Ketten hat keins der (betrachteten) Folgeprodukte ein einziges Atom mit den vorgehenden gemeinsam. Wegen des Bestehens dieser Freiten ist es grundsätzlich möglich, Ketten aufzufinden, die sich nach wenigen (z. B. n) Stufen zum Kreis schließen (Abb. 1).

Nach den Prinzipien der Stöchiometrie bildet sich im einfachsten Fall für jedes A-Molekül, das bei der Reaktion zu C im Kreis verbraucht wurde, nach n Reaktionsschritten ein neues A-Molekül aus. Die

Abb. 1. Kinetisches Schema einer verallgemeinerten katalytischen Reaktion (Prinzip).

Substanz A wird also in der Reaktion mit B zu C, die sie durch ihre Gegenwart ermöglicht, im Endeffekt nicht verbraucht, sondern verhält sich wie ein Katalysator, der immer wieder regeneriert wird. Dasselbe gilt für die Substanzen C, F, ..., X. Das Reaktionssystem der Abb. 1 kann daher als „verallgemeinerte katalytische Reaktion“ bezeichnet werden. Die Substanzen D, G, ..., Z stellen die „katalytischen Produkte“ dieser Reaktion dar. Das „Substrat“, aus dem sie erzeugt werden, sind die von außen hinzugegebenen Substanzen B, E, ..., Y. Die Menge dieser Substanzen darf nicht leer sein, so daß der Kreis ausschließlich aus Folgereaktionen bestünde, sondern muß mindestens eine speisende Substanz enthalten. Jeder der „verallgemeinerten Katalysatoren“ C, F, ..., X ist dem anderen gleichwertig. Ein einziger von ihnen genügt zur Herstellung aller Produkte, wenn man ihn zu der Menge der Speisungssubstanzen hinzugibt. Denn aus seiner Masse bilden sich auch alle übrigen am Kreis beteiligten verallgemeinerten Katalysatoren aus.

Dies ist ein Beispiel dafür, wie sich aus einfachsten chemischen Voraussetzungen ein unerwarteter (systemhafter) Effekt ergeben kann: *Katalyse ohne die Gegenwart eines Katalysators* (im engeren Sinne). Es erscheint möglich, Reaktionsketten dieser Art künstlich zusammenzustellen. Wenn es nur auf die Herstellung eines bestimmten Produkts ankommt, bestehen sehr viele Freiheitsgrade, um die schließliche Regeneration der die Reaktion initiiierenden Substanz zu erreichen. Vor allem ist die verallgemeinerte katalytische Reaktion jedoch ein Beispiel dafür, daß ein chemisches Reaktionssystem mit nicht-trivialem Verhalten sich unter geeigneten Bedingungen „von selbst“ herausbilden kann.

Ein Spezialfall zur verallgemeinerten Katalyse

Ein Spezialfall zum Schema der Abb. 1 verdient besondere Beachtung: Sobald der stöchiometrische

Faktor der Gesamtreaktion $A \rightarrow A$ (und $C \rightarrow C$, usw.) größer als 1 wird, also eine mehr als vollständige „Regeneration“ der am Kreis beteiligten Substanzen auftritt, kann sich das systemtheoretische Phänomen des *autonomen Wachstums* ergeben. Die Über-Regeneration tritt, wie in Abb. 2 angegeben, bereits auf, wenn in nur einem der beteiligten Reaktionsschritte der stöchiometrische Faktor 2 vorkommt ($A + B \rightarrow C + C + D$), also bei der Freisetzung von zwei gleichartigen Atomgruppen. Das Phänomen der „verallgemeinerten Autokatalyse“ ergibt sich, solange die „zuviel“ produzierten Moleküle der verallgemeinerten Katalysatoren dieselben Reaktionsbedingungen vorfinden wie ihre Vorläufer. (Man beachte, daß diese Beweisführung nicht auf speziellen kinetischen, sondern auf allgemeinen relationalen Argumenten beruht. Durch Berücksichtigung der Einzelheiten werden jedoch in jedem Einzelfall zusätzliche, speziellere Aussagen möglich. Reaktionstyp und Geschwindigkeitskonstanten für Hin- und Rückreaktion bestimmen das spezielle Wachstumsgesetz, die Wachstumsgeschwindigkeit und den Wachstumsbereich; die Zulassung von nicht-homogenen Bedingungen ermöglicht räumliche Differenzierungseffekte; usw.¹.)

Ein Unterschied zur echten „Autokatalyse“ und zu der bereits leichter realisierbaren, sog. Kreuzkatalyse (zwei Katalysatoren produzieren sich gegenseitig) besteht darin, daß kein Katalysator im engeren Sinn benötigt wird. Der Fall der Autokatalyse ist dennoch als Spezialfall im Schema der Abb. 2 enthalten (mit 2 Reaktionsschritten und nur

Abb. 2. Kinetisches Schema einer verallgemeinerten autokatalytischen Reaktion (Prinzip).

einer speisenden Substanz), wenn ein einfacher Michaelis-Menten-Reaktionsmechanismus angenommen wird. Auch Kreuzkatalyse und zyklische Katalysen höherer Ordnung als mögliche Ursachen

¹ Zu den Grundlagen vgl. R. ROSEN, *Dynamical System Theory in Biology I*, Wiley-Interscience, New York 1970.

von autonomem Wachstum werden als Spezialfälle miteinfaßt, wenn man berücksichtigt, daß der Zyklus „vermascht“ sein darf.

Wie bei der verallgemeinerten Katalyse kann der Zyklus in Gegenwart der Speisungssubstanzen wieder durch eine einzige der den Kreis bildenden Substanzen zur vollen Ausbildung gebracht werden. In diesem Fall genügt jedoch im Prinzip ein einziges Molekül². Das verallgemeinerte autokatalytische Reaktionssystem demonstriert damit die eingangs postulierten Prinzipien in besonders klarer Weise.

Zwei abschließende Bemerkungen zum Thema verallgemeinerte Autokatalyse

Es muß hier erwähnt werden, daß das System der Abb. 2 in der Literatur keineswegs unbekannt ist. Es wurde bei „isothermen Kettenreaktionen“ diskutiert³ und wurde auch in rein theoretischem Zusammenhang immer wieder angeführt⁴. Es wurde jedoch noch nicht als abstraktes Prinzip formuliert, das für die künstliche und spontane Synthese von Systemen von Bedeutung ist.

Schließlich muß, wie immer in chemisch-systemtheoretischem Zusammenhang, die thermodynamische „Erlaubtheit“ einer beschriebenen „Kinetik“ diskutiert werden. Im Rahmen der Thermodynamik irreversibler Prozesse (in ihrer Erweiterung auf den Bereich stark nichtlinearer Abhängigkeiten zwischen Flüssen und Kräften) ist ein Zulässigkeitsbeweis für „Autokatalyse“ in dem allgemeinen Sinn, daß eine Substanz ihre eigene Produktion fördert, bereits geführt worden⁵.

Voraussetzungen des Modells

Das im Beispiel hergeleitete Verhalten des autonomen Substanzwachstums gehört zu den einfachsten systemhaften Verhaltensweisen, die durch ein geeignetes *Zusammenschalten* von Reaktionen einfachen

Typs erzeugt werden können. Es ist zu erwarten, daß sich auch für die übrigen bereits bekannten systemhaften Verhaltensweisen von Reaktionssystemen (es seien nur Oszillation und Multistabilität genannt) Beispiele finden lassen, die ohne Katalysatoren im engeren Sinn auskommen. In diesem Zusammenhang geht es jedoch um ein anderes Problem.

In der Technologie ist die Zusammenschaltung von Systemen einer gegebenen Art zu „Systemen höherer Ordnung“ ein häufig verwendetes Bauprinzip. Die Untersysteme bewahren dabei eine gewisse Autonomie. Dasselbe Prinzip wird auch in der Biologie angetroffen. Die Vermutung liegt nahe, daß auch chemische Systeme höherer Ordnung möglich sind.

Dies ist bei dem im Folgenden zu beschreibenden Prozeß einer systemhaften chemischen Evolution der Fall. Er kann als „autonomes Wachstum 2. Ordnung“ charakterisiert werden. Der Unterschied zum gewöhnlichen autonomen Wachstum besteht darin, daß in diesem Prozeß höherer Ordnung nicht die Zahl der gebildeten Moleküle, sondern die Zahl der gebildeten Systeme autokatalytisch anwächst. Eine Gemeinsamkeit zum gewöhnlichen autonomen Wachstum besteht darin, daß sich das Verhalten spontan herausbilden kann.

Die Voraussetzungen für diesen Prozeß sind einfach. Sie sind unter den für die irdische „chemische Evolution“ angenommenen Voraussetzungen⁶ mit enthalten, sind jedoch gleichzeitig so allgemein, daß sie unter ganz andersartigen chemischen Bedingungen erfüllt sein können.

Die wesentlichste dieser Voraussetzungen ist identisch mit dem Prinzip, das die Grundlage der organischen Chemie bildet. Es ist die Tatsache, daß es mit Hilfe des Kohlenstoffs möglich ist, aus wenigen Arten von geeigneten Ausgangssubstanzen eine fast unbegrenzte Zahl von verschiedenen Produkten zu bilden⁷. Möglicherweise kommt jedoch die Fähigkeit zum Aufbau einer Universalbibliothek an Pro-

² Bei reversiblen Teilreaktionen sind u. U. mehrere Moleküle erforderlich. Praktisch macht die Gegenwart von Spurenstoffen, die zur spontanen Umsetzung mit einer der Zykussubstanzen fähig sind, fast immer endliche, zur Ab-sättigung dieser Stoffe ausreichende Minimaldrücke bzw. -konzentrationen erforderlich.

³ N. N. SEMJONOW, Einige Probleme der chemischen Kinetik und Reaktionsfähigkeit, Akademie-Verlag, Berlin 1961.

⁴ H. J. MOROWITZ, in: Progress in Theoretical Biology I (Hrsg. F. M. SNELL), S. 35, Academic Press, New York 1967.

⁵ P. GLANDORFF u. I. PRIGOGINE, Physica, s' Grav. 30, 351 [1964].

⁶ Vgl. M. CALVIN, in: Progress in Theoretical Biology I (Hrsg. F. M. SNELL), S. 1, Academic Press, New York 1967.

⁷ Die Zahl der möglichen Derivate ist geringer als die Zahl der durch Permutation der Ausgangssubstanzen theoretisch erzeugbaren makromolekularen Kombinationen. Gewisse größere Einheiten sind jedoch nahezu frei permutierbar. Das bedeutet, daß die Gesamtheit der möglichen Produkte mit einer „kleinen Universalbibliothek“ verglichen werden kann. Eine Universalbibliothek ist nach KURD LASSWITZ die Menge aller durch Permutation eines gegebenen Alphabets erzeugbaren Bücher von einer gegebenen (in diesem Fall nur geringen) Länge.

dukten unter andersartigen physikalischen Bedingungen auch anderen Sorten von Ausgangssubstanzen (ohne Kohlenstoff) zu, indem sie z.B. zur alterierenden Kettenbildung fähig sind.

Die Herleitung der weiteren Voraussetzungen geht am besten vom Begriff des Netzwerks der möglichen Reaktionen aus. Das ist die Menge aller Reaktionen, die durch die Vorgabe von einigen wenigen Substanzarten ermöglicht werden. Dieses Netzwerk ist dann sehr groß, wenn unter „möglich“ die energetisch (thermodynamisch) möglichen Reaktionen verstanden werden. Zum Beispiel determinieren allein die beiden Substanzen CO_2 , H_2O zusammen mit einer energiereichen Substanz (im einfachsten Fall: Lichtquanten einer bestimmten Energie) bei Atmosphärendruck und Zimmertemperatur bereits eine Universalbibliothek an energetisch möglichen Produkten und zugehörigen Reaktionen.

Das Netzwerk der energetisch möglichen Reaktionen ist ein sehr theoretischer Begriff. In ihm enthalten ist das interessantere Netzwerk der auch *spontan* möglichen Reaktionen, d. h. derjenigen Reaktionen, die nicht nur energetisch (auf Grund eines Gefälles an freier Enthalpie), sondern bei der gegebenen Temperatur auch „kinetisch“ möglich sind, da die zur Bildung der Eyringschen Zwischenkomplexe benötigten Aktivierungsenergien genügend niedrig sind. Dieses zweite Netzwerk ist im Normalfall sehr viel kleiner (so auch in dem angegebenen Beispiel). Im folgenden wird jedoch eine Verbindung zwischen beiden Begriffen aufgezeigt.

Das Netzwerk der energetisch, aber nicht unbedingt kinetisch möglichen Reaktionen enthält eine sehr große Zahl von (energetisch, aber nicht unbedingt kinetisch möglichen) zyklischen Reaktionssystemen nach Abb. 2. Dies hat zwei Gründe: Erstens braucht ein Produkt n -ter Stufe mit der Ausgangssubstanz nicht mehr Ähnlichkeit aufzuweisen, als eine beliebige andere Substanz⁸. Zweitens ist die Wahrscheinlichkeit, daß irgendeine an beliebiger Stelle des Netzwerks herausgegriffene Substanz mit irgendeiner beliebigen anderen Substanz des Netzwerks reagieren kann, im Durchschnitt konstant. (Sie ändert sich nur, wenn von einer der beiden Substanzen Näheres bekannt ist, z. B. daß sie energiereich ist, oder wenn beide Substanzen bekannt sind.) Dieses Prinzip der zufälligen Verdrah-

tung des Netzwerks der energetisch möglichen Reaktionen folgt daraus, daß ein Molekül die verschiedensten Atomgruppen mit den verschiedensten Reaktionsmöglichkeiten enthalten kann.

Unter der sehr großen Zahl von zyklischen Reaktionssystemen, die das Netzwerk der energetisch, aber nicht unbedingt kinetisch möglichen Reaktionen enthält, befindet sich eine immer noch sehr große Zahl von Zyklen, in denen alle Schritte auch kinetisch möglich sind. Obwohl diese Zyklen mit den Ausgangssubstanzen durch energetisch mögliche Reaktionen (d. h. Reaktionen mit von null verschiedener Geschwindigkeitskonstante) verbunden sind, kann keiner von ihnen innerhalb eines nahezu beliebig großen Zeitraumes von selbst anlaufen, wenn die Ausgangssubstanzen mit einem unerschöpflichen Pool in Verbindung stehen. Die Ursache liegt in der Kleinheit der Geschwindigkeitskonstanten der zu diesen Zyklen hinführenden Reaktionsschritte.

Diese Aussage steht im Widerspruch zu der Annahme einer kontinuierlichen Kinetik. Denn unter dieser Voraussetzung würde ein Zyklus der beschriebenen Art bereits bei infinitesimal kleinen Konzentrationen anlaufen. Außerdem wäre das gesamte Reaktionssystem durch die kleinen Geschwindigkeitskonstanten von vornherein so stark „verkoppelt“, daß es sinnlos wäre, vom Verhalten einzelner Teilsysteme zu sprechen. Die obenstehende Aussage folgt jedoch aus der Tatsache, daß (um ein Beispiel zu geben) eine Produktion von 10^{-12} Molekülen pro Liter und Minute bei einem Reaktionsvolumen von 1 Liter *nicht* bedeutet, daß die nach einer Minute bereits theoretisch vorhandenen 10^{-12} Moleküle zur sofortigen Reaktion mit anderen Molekülen zur Verfügung stehen. Konzentrationen unter 1 Molekül (bezogen auf das gesamte homogene Reaktionsvolumen) haben damit dieselbe Wirkung wie die Einführung einer *Zeitverzögerung* in ein im übrigen kontinuierliches dynamisches System⁹. Diese Tatsache ist eine der Grundvoraussetzungen für jeden chemischen Evolutionsprozeß.

Damit einer der im Netzwerk enthaltenen, spontan möglichen Zyklen anläuft, muß also eine ununterbrochene Kette von spontan möglichen Reaktionen zu jeder der von ihm benötigten Substanzen hinführen. Diese Forderung scheint für einen der verallgemeinerten Katalysatoren leichter erfüll-

⁸ Das beste Beispiel ist nach SEELIG eine Substitutionsreaktion: F. F. SEELIG, J. Theoret. Biol. **30**, 497 [1971].

⁹ Bei der Hintereinanderschaltung von mehreren Reaktionen dieser Art nimmt die gesamte Zeitverzögerung nicht additiv, sondern multiplikativ zu.

bar zu sein als für die Gesamtheit der Speisungssubstanzen. Für diese muß außerdem die Möglichkeit der fortlaufenden Nachlieferung bestehen. Derselbe Satz von Speisungssubstanzen reicht jedoch oft zur Speisung von vielen, ja einer ganzen Universalbibliothek von autonom wachsenden Systemen aus. Es gibt daher oft sehr viele mehr oder weniger gleichwertige Sätze von Speisungssubstanzen, so daß die Forderung nach der spontanen Herausbildung eines einzigen von ihnen nicht mehr so unrealistisch erscheint.

Das systemtheoretische Modell

Nachdem die wesentlichen Voraussetzungen spezifiziert sind, sei nun angenommen, daß die kleine Anzahl der Anfangssubstanzen, die in konstant gehaltenen Konzentrationen vorliegen, gerade die Voraussetzungen für das spontane Anlaufen eines einzigen einfachen Zyklus erfüllt. Dann produziert dieser Zyklus durch seine katalytische Funktion eine ganze Serie von Substanzen, nämlich außer den übrigen am Zyklus beteiligten verallgemeinerten Katalysatoren auch alle Produkte des Kreises (C, G, ..., Z im Fall der Abb. 2), die untereinander und mit den Ausgangssubstanzen weitere Reaktionen eingehen können. Nach Abschluß der Wachstumsphase des Zyklus liegen die primären Produktsubstanzen in steady-state-Konzentrationen vor, d. h. sie werden ebenfalls nachgeliefert, und zwar in Konzentrationen, die mit denen der vorgegebenen Substanzen vergleichbar sind.

Der spezielle Fall, daß die Voraussetzungen für das Zustandekommen eines Zyklus erfüllt sind, hat also dieselbe Wirkung, wie wenn von vornherein eine größere Zahl von Substanzen vorgegeben worden wäre (ein Teil davon in konstant gehaltenen Konzentrationen). Da die Wahrscheinlichkeit, daß einer der vielen im Netzwerk der möglichen Reaktionen enthaltenen, spontan möglichen Zyklen anlaufen kann, stärker als linear (nämlich kombinatorisch) mit der Zahl der anwesenden Substanzen ansteigt, erleichtert das Anlaufen eines Zyklus das Zustandekommen eines zweiten, und dieses das eines dritten, usw., in immer stärkerem Maße. Dabei existiert offensichtlich eine *Schwelle*: Nach dem Anlaufen einer kritischen Anzahl von Zyklen wird die Wahrscheinlichkeit plötzlich nahezu eins, daß mindestens ein weiterer, und von da ab immer mehr Zyklen anlaufen.

Dieselbe Aussage lautet in einfachster formelmäßiger Darstellung:

$$\begin{aligned} n &= f_1(N) \\ N &= f_2(n), \end{aligned} \quad (1)$$

wobei n die Zahl der im Reaktionsnetzwerk anwesenden Substanzen, N die Anzahl der bereits wirksam gewordenen Zyklen und f_1 und f_2 zwei monoton mit N bzw. n ansteigende Funktionen bedeuten. Diese positive Rückkopplung wird erst dann „überkritisch“, wenn das Produkt aus f_1 und f_2 den Wert 1 übersteigt.

Die Höhe des Schwellenwerts hängt außer von n_0 (der Zahl der von außen zugegebenen und z. T. konstant gehaltenen Substanzen) von speziellen Voraussetzungen ab. Wenn z. B. in der ursprünglichen Mischung außer den für die Universalbibliothek benötigten Substanzen zufällig noch eine Reihe von weiteren Substanzen vorhanden sein sollte, die wie manche Metallionen eine geringe, aber breit gestreute katalytische Aktivität besitzen, wäre die beschriebene Schwelle stark herabgesetzt.

Damit ist der gesuchte Prozeß gefunden. Man kann dieses Verhalten, bei dem nach dem Überschreiten einer Schwelle spontan immer mehr autonom wachsende Systeme produziert werden, als „autonomes Wachstum 2. Ordnung“ auffassen. In ihm werden nicht nur immer mehr autonom wachsende Systeme produziert, sondern zugleich auch solche, deren unmittelbare, spontane Herausbildung immer unwahrscheinlicher ist. Während zunächst einfache verallgemeinerte autokatalytische Systeme nach Abb. 2 die einzigen sind, die zu wachsen beginnen, kommen bald solche, die vermascht sind, und solche, die „echte“ Katalysatoren enthalten, hinzu. Schließlich können auch sehr kompliziert gebaute autonom wachsende Systeme aktiviert werden.

Wo die Schwelle in einem speziellen Einzelfall liegt, und ob sie in einem natürlichen Reaktionssystem unter natürlichen Verhältnissen und in natürlichen Zeiträumen Aussicht auf spontane Überwindung besitzt, ist eine sekundär zu prüfende Frage. Auch muß mit dem Auftreten von anderen systemhaften Verhaltensweisen 2. Ordnung gerechnet werden. Das beschriebene Verhalten gilt ja nur solange, wie die Kopplung der einzelnen instabilen Systeme untereinander noch gering ist. Es scheint, als ob durch die Zulassung von Diffusion die Phase der allgemeinen Verkopplung beliebig weit hinausgezögert werden könnte. Die Schilderung der sich an die

„Explosionsphase“ anschließenden Vorgänge besitzt jedoch ebenso wie beim ersten Beispiel-System erst in zweiter Linie Interesse¹⁰.

Bisher wurde vor allem der explosionsähnliche Aspekt des Verhaltens betont. Ein anderer, ebenso wichtiger Aspekt ist der, daß eine Universalbibliothek automatisch „durchgemustert“ wird. Dieses Verhalten ist auch aus der Biologie bekannt, wo es sich auf die viel speziellere Universalbibliothek der möglichen Nukleinsäuresequenzen bezieht. Die hier aufgestellte Hypothese besteht zusammengefaßt darin, daß der allgemeine Prozeß, der beschrieben wurde, geeignet sei, einen speziellen wie den der Biologie in Gang zu setzen. Dies wäre dann der Fall, wenn sich unter den durchgemusterten Systemen eines befinden würde, das zum Ausgangspunkt einer nicht mehr blinden, sondern nach dem Verwandtschaftsprinzip funktionierenden (und damit unter bestimmten Zusatzvoraussetzungen weit wirkameren) Explosion 2. Ordnung werden kann.

Diskussion

Die beiden wesentlichen Ergebnisse, die erzielt wurden, sind 1. die Angabe der Struktur eines verallgemeinerten autokatalytischen System, und 2. die Angabe der Struktur eines „autokatalytischen Systems 2. Ordnung“, das ein Beispiel für ein chemisches Evolutionssystem darstellt.

Beide Ergebnisse wurden nicht mit kinetischen oder dynamischen Mitteln gewonnen. Die Herleitung folgte vielmehr aus einfachen relationalen Beziehungen (im ersten Fall: aus A folgt B, Stöchiometrie, Verbrauchsrelation; im zweiten Fall: Zyklus, Netzwerk, Verdrahtung). Bei Beschränkung auf diese allgemeine Ebene geht viel spezielle Information verloren. Andererseits werden bestimmte Gesetzmäßigkeiten erst sichtbar. Zum Beispiel ist der Beweis, daß alle chemischen Systeme vom Typ der Abb. 2 instabil sind, mit kinetischen Mitteln, d. h. mit Hilfe der Theorie dynamischer Systeme, überhaupt nicht zu führen. Selbst wenn man sich auf den Spezialfall all jener Reaktionssysteme dieses Typs beschränkt, die durch ein System aus linearen, ge-

wöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung beschrieben werden können, macht der Beweis, daß sie autonomes Wachstum zeigen, d. h. sämtlich einen instabilen kritischen Punkt im Ursprung des Phasenraumes besitzen oder, was in diesem Fall dasselbe bedeutet, einen positiven Eigenwert ihres charakteristischen Polynoms besitzen, nicht unbeträchtliche Schwierigkeiten. Erst recht gilt dies für die Menge der durch nichtlineare und durch partielle Differentialgleichungen zu beschreibenden chemischen Systeme dieses Typs. In analoger Weise kann das Prinzip der Instabilität 2. Ordnung auf der Ebene einer expliziten dynamischen Beschreibung nicht allgemein abgeleitet werden.

Die erzielten Ergebnisse haben also den Nachteil, daß sie keinen speziellen Fall vollständig beschreiben. Sie ermöglichen jedoch spezifische quantitative Modelle, die ohne sie nicht aufstellbar wären. Es ist z. B. möglich, das instabile System 2. Art auf der Ebene der Zyklen durch ein System aus Schaltvariablen mit bedingten Verknüpfungen und schwachen Anfangsbedingungen zu modellieren (d. h. durch einen nichtlinearen, endlichen Automaten). Es ist aber auch eine Simulation auf der Ebene der Substanzen möglich, und zwar entweder ebenfalls mit Schaltvariablen (als grob qualitatives Modell), oder feiner durch ein Funktional-Differentialgleichungssystem mit schwach inhomogener Anfangsbedingung. Den kompliziertesten Fall würde ein dynamisches Modellsystem aus partiellen Funktional-Differentialgleichungen darstellen. Mit Hilfe von quantitativen Modelluntersuchungen kann eine Aussage darüber gewonnen werden, wie weit natürliche Reaktionssysteme die Bedingungen des Modells erfüllen.

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß das beschriebene Modell, welches eine sehr allgemeine Form einer chemischen Evolutionstheorie darstellt, für die *irdische* Biogenese dann Bedeutung besitzen kann, wenn an das biologische „Urahnsystem“ bestimmte Minimalanforderungen hinsichtlich seiner funktionellen Komplexität gestellt werden müssen¹¹.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Unterstützung dieser Arbeit.

¹⁰ Im rein homogenen Fall könnte der Endzustand des Gesamtsystems durch Oszillationen vom VOLTERRA-KERNERTyp gekennzeichnet sein. Vgl. E. H. KERNER, Bull. math. Biophysics **19**, 121 [1957].

¹¹ Vgl. die ausgezeichnete Übersicht von KAPLAN: R. W. KAPLAN, Naturwissenschaften **55**, 97 [1968].