

МИКРОСКОПИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНФОРМАЦИОННЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ МИКРОТРУБОЧКИ ЦИТОСКЕЛЕТА И ЕЕ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛОГ В ОПТИКЕ*

Е. Е. Слядников

Томский научный центр СО РАН, Россия

e-mail: opi@hq.tsc.ru

И. В. ИЗМАЙЛОВ, Б. Н. ПОЙЗНЕР

Томский государственный университет, Россия

e-mail: izmi@elefot.tsu.ru

Э. А. СОСНИН

Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск, Россия

e-mail: badik@loi.hcei.tsc.ru

The non-linear ring interferometer is considered as an example of the structural analog of the cytoskeleton microtubule. The problem of imitation of the processes in the cytoskeleton is addressed with the help of optical systems and its radiophysical analogs.

Введение

В последние годы наблюдается значительный интерес к гипотезе квантовой природы человеческого сознания [1]. Одним из возможных вариантов этой гипотезы является предположение, что сознание — это процесс, протекающий в квантово-полевой подсистеме мозга, которая благодаря своей квантовой природе способна чрезвычайно эффективно обрабатывать сенсорную и иную информацию, осуществлять сложные логические операции и т. п. Есть экспериментальные свидетельства, что в мозге подходящими субстратами для “квантовых вычислений” являются информационные белковые нанополимеры — микротрубочки цитоскелета [2].

Единственной структурой, присущей всем живым организмам от одноклеточной амёбы до человека и способной управлять информационными процессами, является цитоскелет клетки. Базовый элемент структуры цитоскелета клетки — это микротрубочки цитоскелета, которые представляют собой полые цилиндрические трубки с внешним диаметром 25 нм и внутренним — около 14 нм, длиной 1–10 мкм, иногда организованные в более

*Работа выполнена при финансовой поддержке Президента РФ (грант № МК-4701.2006.9).

© Институт вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук, 2006.

крупные трубкообразные волокна [1, 2]. Каждая микротрубочка представляет собой белковый полимер, состоящий из субъединиц, называемых тубулинами. Молекула тубулина, в свою очередь, представляет собой димер, т. е. состоит из двух соединенных тонкой перемычкой частей, которые имеют названия α -тубулин и β -тубулин (приблизительно по 450 аминокислот в каждой) (рис. 1). Эти пары глобулярных белков, напоминающих по форме орех арахиса, уложены в слегка скошенную гексагональную решетку вдоль всей трубки. Обычно на каждую микротрубочку приходится по 13 рядов димеров тубулина. Размеры димера составляют приблизительно $8 \times 4 \times 4$ нм, а его молекулярный вес около 110 килодальтонов [1,2]. Димер тубулина может существовать в двух (по крайней мере) различных геометрических конфигурациях, называемых конформациями. Конформации эти, по всей видимости, обусловлены тем, что в центре димера (в его “безводной части”) имеется электрон, который занимает одно из двух возможных положений. На способность молекул димера переключаться из одной конформации в другую влияют силы Ван-дер-Ваальса. Для того чтобы произошло “переключение” из одной конформации в другую, достаточно чтобы один электрон “перескочил с места на место”.

В экспериментальных работах (см., например, [1, 4]), выполненных при физиологической температуре и посвященных поискам пьезоэлектрических эффектов в живых системах, было обнаружено, что микротрубочка цитоскелета обладает постоянным дипольным моментом. Массивы микротрубочек цитоскелета обладают сегнетоэлектрическими свойствами, ориентируются под действием как внешнего, так и внутриклеточного электрического поля. Каждая молекула тубулина, из которой построены микротрубочки цитоскелета, обладает дипольным моментом величиной около 100 дебай. Микротрубочки цитоскелета оптически мерцают при метаболической активности, а приблизительные резонансные частоты молекул тубулина составляют $10^{11} \dots 10^{13}$ Гц [1, 5, 6]. Обнаружены солитонные возбуждения в белковых нанополимерах, вызванные когерентным электромагнитным излучением [7]. Все эти экспериментально полученные результаты требуют объяснения с точки зрения теории сегнетоэлектричества.

Одна из первых теоретических моделей описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета предложена в работе [8]. Эта модель системы взаимодействующих

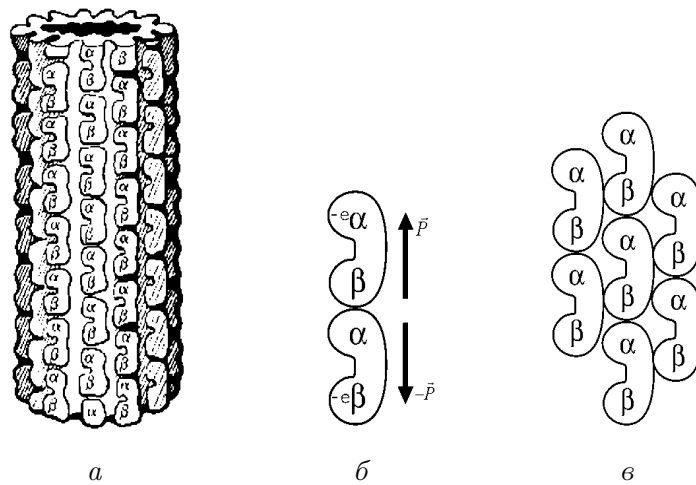


Рис. 1. Схема молекулярной структуры микротрубочки цитоскелета (а); молекулы тубулина в различных конформациях с противоположными дипольными моментами (б); схема ближайшего окружения молекулы тубулина (в) [1, 2].

диполей основывалась на приближении эффективного поля и в континуальном приближении привела к решению в виде сегнетоэлектрической доменной стенки. Затем для этой системы диполей сформулирована классическая модель Изинга, с помощью которой рассчитана электронная поляризация микротрубочки цитоскелета как функция температуры [4].

Микротрубочки цитоскелета — это белковые наноструктуры, в которых переключение конформаций вызывается электронными переходами и должно описываться с помощью квантовой механики, а модели [4, 8] являются классическими (не квантовыми). Поэтому для описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета нужно формулировать новые квантовые модели информационных белковых нанополимеров, учитывающие изменения поляризации молекул тубулина и возбуждение конформационных степеней свободы [9].

1. Модель конформационных степеней свободы микротрубочки цитоскелета

Рассмотрим конформационные степени свободы информационного белкового нанополимера — микротрубочки цитоскелета, которые ответственны за сегнетоэлектрические свойства этой системы. Каждая молекула тубулина обладает дипольным моментом, и на поляризацию димера влияют состояния поляризации каждого из шести его ближайших соседей (вследствие слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий между ними, которые вызывают взаимную ориентацию дипольных моментов молекул тубулина). То есть существуют правила, определяющие конформацию каждого димера через конформации его соседей: если все константы взаимодействия положительны, то диполи имеют ферромагнитную (сегнетоэлектрическую) ориентацию, а если некоторые константы взаимодействия отрицательны — антиферромагнитную (антисегнетоэлектрическую).

Очевидно, что система взаимодействующих дипольных моментов имеет основное состояние (при $T = 0$) с полностью упорядоченной решеткой диполей (сегнетоэлектрическое или антисегнетоэлектрическое состояния), а при высоких температурах состояние системы диполей неупорядоченное — параэлектрическое (рис. 2). Следовательно, при изменении внешнего воздействия (температуры, электрического поля) в такой системе диполей возникает неустойчивость относительно фазового сегнетоэлектрического перехода. Для превращения параэлектрик — сегнетоэлектрик векторы дипольных моментов молекул тубулина в сегнетоэлектрической фазе одинаковы, поэтому дипольные моменты тубулина

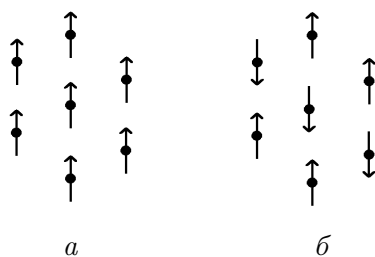


Рис. 2. Схемы ферромагнитного (а) и антиферромагнитного (б) упорядочения дипольных моментов тубулина.

образуют только одну подрешетку. В случае превращения параэлектрик — антисегнетоэлектрик векторы дипольных моментов молекул тубулина в антисегнетоэлектрической фазе разные, поэтому кристаллическую решетку удобно разбить на две подрешетки с одинаковыми векторами дипольных моментов (рис. 2).

Поскольку тубулины — это молекулы-димеры, существующие в двух пространственных конформациях, электрон молекулы тубулина, ответственный за “переключение” между конформациями, находится в асимметричном потенциале, который имеет два различных по глубине локальных минимума (рис. 3). Левая глубокая яма соответствует исходному состоянию молекулы (α -состоянию тубулина), а правая мелкая яма — конечному состоянию молекулы (β -состоянию тубулина). Для простоты вычислений будем считать, что минимумы исходного и конечного состояний молекулы тубулина лежат на одной оси, например x .

С точки зрения классической механики полная энергия электрона в молекуле тубулина при отсутствии внешних сил постоянна и является суммой кинетической и потенциальной энергий. В простейшем случае одной степени свободы можно записать

$$E = (1/2)mu^2 + U_a(x), \tag{1}$$

где m — масса; u — скорость; x — координата электрона; $U_a(x)$ — потенциальная энергия, которая имеет две потенциальные ямы, разделенные потенциальным барьером высотой ε_a . На рис. 3 представлены три типичные ситуации (E_1, E_2, E_3), возникающие при различных полных энергиях электрона для характерного профиля потенциальной энергии $U_a(x)$, часто встречающегося в молекулярных задачах с электронным переходом через барьер. Видно, что область барьера между второй и третьей точками поворота недоступна для движения электрона, который не может самостоятельно, без затраты энергии от внешних источников перейти из одной разрешенной для движения области в другую. Преодоление барьера становится возможным при энергиях, больших чем значение максимальной потенциальной энергии в области барьера (случай E_3). Температурная зависимость частоты перехода электрона через барьер описывается формулой Аррениуса [10]:

$$\omega(T) = A \exp(-\varepsilon/k_B T). \tag{2}$$

Здесь ε — энергии активации; множитель A по порядку величины близок к частоте столкновений с барьером. При температурах, близких к абсолютному нулю, это выражение

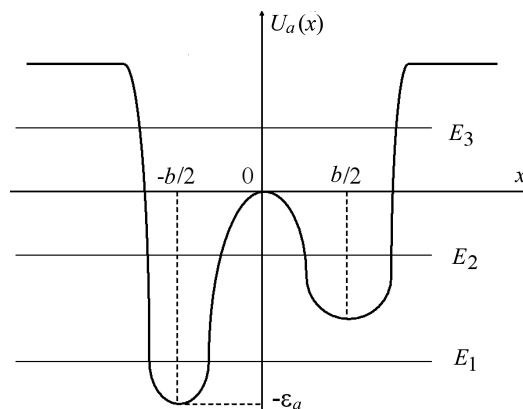


Рис. 3. Зависимость потенциальной энергии электрона $U_a(x)$ в молекуле тубулина от координаты x .

пренебрежимо мало. Однако из эксперимента известно, что частота перехода электрона через барьер имеет конечный низкотемпературный предел [10].

Согласно законам квантовой механики, частица может оказаться в классически запрещенной области и, более того, проникнуть через эту подбарьерную область из одной ямы в другую (туннелировать). Туннельным эффектом определяется множество самых различных явлений: радиоактивный распад [11], фотосинтез [10], формирование предпереходных состояний в структурно-неустойчивых кристаллах [12]. Вероятность туннелирования частицы под барьером за одно столкновение с ним определяется формулой Гамова [11]:

$$T = \exp(-2l\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar), \quad (3)$$

где l — ширина барьера; ε — разность между высотой барьера и полной энергией частицы. Для макроскопических частиц, например, массой 1 г при высоте барьера 1 эрг и его длине 1 см, вероятность туннелирования ничтожно мала. Однако для электрона с массой 10^{-27} г при высотах барьера порядка 1 эВ, длинах барьера 1 Å прозрачность потенциального барьера становится порядка 1. Выход частоты электронного перехода на плато при низких температурах свидетельствует в пользу туннельного механизма перехода электрона в молекуле тубулина. Понятно, что при конечной температуре вклад в частоту электронного перехода дают как туннельная, так и активационная составляющие:

$$\omega = A \exp(-\varepsilon/k_B T) + B \exp(-2l\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar), \quad (4)$$

где B — множитель порядка частоты столкновения с барьером туннелирующей частицы. В духе проведенных рассуждений величина ε должна быть как раз порядка высоты барьера, отсчитанного от нижнего энергетического уровня (от энергии основного состояния электрона). Для проведения оценки величины ε можно просто указать ее область изменения $k_B T_n < \varepsilon < \varepsilon_a$. Характерные энергии отрыва электрона от молекулы тубулина составляют порядка $\varepsilon_a = 4 - 5$ эВ, а тепловая энергия частицы $k_B T_n = 0.02$ эВ для $T_n = 273$ К [10]. Вероятность набрать энергию 4 эВ за счет тепловых флуктуаций при комнатных температурах порядка e^{-100} крайне мала. С другой стороны, потенциальный барьер для туннелирования электрона никак не может быть меньше тепловой энергии частицы 0.02 эВ. Отсюда следует вывод, что переход электрона из одной потенциальной ямы в другую в молекуле тубулина даже при комнатных температурах носит туннельный характер. Попробуем теоретически рассчитать энергию основного состояния ε и частоту туннелирования электрона ω в молекуле тубулина.

Для этого исследуем движение электрона в потенциальной яме $U_a(x)$ молекулы тубулина. Когда ширина локальных ям много меньше расстояния между ними для потенциала $U_a(x)$, в котором находится электрон, можно использовать следующее представление:

$$U_a(x) = -V_1 d \delta(x + b/2) - V_2 b \delta(x - b/2), \quad (5)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака; ось x совпадает с осью, вдоль которой идет переход электрона в молекуле тубулина; b — расстояние между левым и правым минимумами потенциала; V_1 , V_2 — глубина левой и правой ям соответственно; d — ширина левой и правой локальных ям.

Интегралы

$$\int_{-\infty}^{\infty} V_1 d \delta(x + b/2) = V_1 d, \quad \int_{-\infty}^{\infty} V_2 b \delta(x - b/2) = V_2 d$$

дают площадь (мощность) локальной ямы в точках $-b/2$ и $b/2$ соответственно. Будем считать, что левая локальная яма больше правой ($V_1 > V_2$), а расстояние между локальными ямами значительно больше ширины локальной ямы ($b \gg d$). Удобно разделить асимметричный потенциал $U_a(x)$ (5) на симметричную часть $U_s(x)$ с локальными ямами одинаковой глубины и поправку $\Delta U_a(x)$, связанную с разной глубиной (асимметрией) локальных ям:

$$U_a(x) = U_s(x) + \Delta U_a(x), \quad U_s(x) = -V_2 d \delta(x + b/2) - V_2 d \delta(x - b/2), \quad (6)$$

$$\Delta U_a(x) = (V_2 - V_1) d \delta(x + b/2).$$

Предполагая асимметричную поправку малой $(V_1 - V_2)/V_1 \ll 1$, сначала исследуем движение электрона в симметричном потенциале, а асимметрию потенциала затем учтем по теории возмущений. Хорошо известно, что движение электрона в потенциальной яме $U_s(x)$ (6) подчиняется уравнению Шредингера [11]

$$[-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + U_s(x)]\Psi(x) = -\varepsilon\Psi(x), \quad (7)$$

где $\Psi(x)$ — волновая функция электрона; $-\varepsilon$ — собственное значение энергии электрона, которое выбрано явно отрицательным ($\varepsilon > 0$), так как ищем только локализованные в потенциальной яме решения уравнения Шредингера. Симметричный потенциал $U_s(x)$ задает два равновесных положения электрона, причем при классическом движении электрона его основное состояние в каждой локальной яме дважды вырождено, т. е. $\varepsilon_+ = \varepsilon_-$ для четной $\Psi_+(x)$ и нечетной $\Psi_-(x)$ собственных волновых функций (рис. 4). Учет квантового туннелирования электрона через потенциальный барьер между левой и правой локальными ямами снимает это вырождение ($\varepsilon_+ > \varepsilon_-$) и существенно влияет на динамику такой двухуровневой системы. Чтобы найти собственные энергии $\varepsilon_+, \varepsilon_-$ и собственные функции Ψ_+, Ψ_- из уравнения (7), запишем волновые функции Ψ_+, Ψ_- в виде

$$\Psi_{\pm} = A_{\pm} \{ \exp[\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \quad \text{для } x < -b/2,$$

$$\Psi_{\pm} = A_{\pm} \{ \exp[\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \quad \text{для } -b/2 < x < b/2,$$

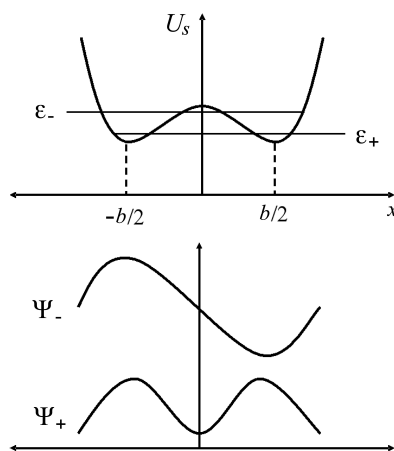


Рис. 4. Основное состояние (вверху) и собственные функции электрона для симметричного двухъямного потенциала (внизу).

$$\Psi_{\pm} = A_{\pm} \{ \exp[-\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \quad \text{для } x > b/2. \quad (8)$$

Здесь κ_{\pm}^{-1} — характерный радиус локализации четной (+) и нечетной (−) волновых функций; A_{\pm} — нормировочная константа. Волновые функции (8) должны удовлетворять граничным условиям и условиям нормировки, которые позволяют определить величины κ_{\pm} и A_{\pm} :

$$\Psi_{\pm}(-b/2 - 0) = \Psi_{\pm}(-b/2 + 0), \quad \Psi_{\pm}(b/2 - 0) = \Psi_{\pm}(b/2 + 0), \quad (9)$$

$$-(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(-b/2 + 0) - \partial_x \Psi_{\pm}(-b/2 - 0)]\Psi(x) = -V_2 d \Psi_{\pm}(-b/2),$$

$$-(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(b/2 + 0) - \partial_x \Psi_{\pm}(b/2 - 0)]\Psi(x) = -V_2 d \Psi_{\pm}(b/2), \quad (10)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_{\pm}(x)|^2 dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{+}(x)\Psi_{-}(x)dx = 0. \quad (11)$$

Решая уравнение Шредингера (7) совместно с (9)–(11), получим

$$(\hbar^2/m)\kappa_{\pm} = V_2 d [1 \pm \exp(-\kappa_{\pm} b)], \quad \varepsilon_{\pm} = (\hbar^2/2m)\kappa_{\pm}^2. \quad (12)$$

Поправку к собственной энергии электрона $\hbar\Delta$, связанную с влиянием асимметрии потенциала $\Delta U_a(x)$, вычислим в первом порядке теории возмущений по волновым функциям четного и нечетного состояний (8):

$$\hbar\Delta = \langle \Psi_{-} | \Delta U_a | \Psi_{+} \rangle = (V_2 - V_1) d A_{+} A_{-} [1 + \exp(-\kappa_{+} b) - \exp(-\kappa_{-} b) - \exp(-\kappa_{+} b - \kappa_{-} b)]. \quad (13)$$

В пределе “слабого” туннелирования $\kappa_{\pm} b \gg 1$, что соответствует случаю классической двухуровневой системы, выражения (12), (13) принимают вид

$$(\hbar^2/m)\kappa_{\pm} = V_2 d [1 \pm \exp(-K_q^{-1})], \quad k_0 = V_2 d / (\hbar^2/m), \quad K_q = (\hbar^2/m) / (V_2 d b); \quad (14)$$

$$\hbar\omega = \varepsilon_{+} - \varepsilon_{-} = (\hbar^2/2m)[\kappa_{+}^2 - \kappa_{-}^2] = 2V_2 d k_0 \exp(-K_q^{-1}) \rightarrow 0, \quad \hbar\Delta = (V_2 - V_1) d \kappa_{+} / 4. \quad (15)$$

Здесь $\hbar\omega$ — расщепление энергий четного и нечетного состояний электрона; K_q — коэффициент квантовости двухуровневой системы, который мал, когда туннелирование мало, и стремится к единице, когда туннелирование велико. Из (14) и (15) видно, что в пределе ($\kappa_{\pm} b \gg 1$) расщепление энергий $\hbar\omega$ стремится к нулю, туннельный эффект отсутствует. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состояниями электрона отсутствует, и мы имеем дело с локализованным электроном в левой потенциальной яме. Проведем оценку величин (14) и (15) для значений $1 \text{ эВ} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$, $\hbar = 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$, $V_2 = 6.4 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 4 \text{ эВ}$, $d = 10^{-10} \text{ м}$, $b = 10^{-8} \text{ м}$, $m_e = 10^{-30} \text{ кг}$, $V_1 - V_2 = 1.6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}$. Получим $K_q^{-1} = 64$, $\kappa_0 = 6.4 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$, $\kappa_{+} \cong \kappa_{-} = 6.4 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$, $\varepsilon_{+} = 2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 1,2 \text{ эВ}$, $\hbar\omega = 10^{-39} \text{ Дж} \approx 10^{-20} \text{ эВ} \rightarrow 0$, $\hbar\Delta = 0$, $16 \cdot (V_2 - V_1) = -0.29 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}$. Это означает, что для горба, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала с высотой, равной $V_2 = 6.4 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 4 \text{ эВ}$, и шириной 10 нм расщепление энергий $\hbar\omega$ стремится к нулю и квантовое туннелирование электрона в правую яму практически отсутствует, а энергия основного состояния электрона составляет $\varepsilon_{+} = 2 \cdot 10^{-19} \text{ Дж} \approx 1.2 \text{ эВ}$.

В пределе “сильного” туннелирования $\kappa_{\pm} b \approx 1$, что соответствует случаю квантовой двухуровневой системы, выражения (12), (13) принимают вид

$$K_q \kappa_{\pm} b = [1 \pm \exp(-\kappa_{\pm} b)], \quad \hbar\omega = \varepsilon_{+} - \varepsilon_{-} = (\hbar^2/2m)[\kappa_{+}^2 - \kappa_{-}^2]; \quad (16)$$

$$\hbar\Delta = (V_2 - V_1)dA_+A_-[1 + \exp(-\kappa_+b) - \exp(-\kappa_-b) - \exp(-\kappa_+b - \kappa_-b)]. \quad (17)$$

Из (16), (17) видно, что в пределе ($\kappa_{\pm}b \approx 1$) расщепление энергий $\hbar\omega$ отлично от нуля, а туннельный эффект велик. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состояниями электрона существует, и мы имеем дело с квантовым движением электрона в двухъямном потенциале. Проводя оценку величин (16), (17) для значений $V_2 = 6,4 \cdot 10^{-19}$ Дж ≈ 4 эВ, $d = 10^{-10}$ м, $b = 10^{-9}$ м, $m_e = 10^{-30}$ кг, $V_1 - V_2 = 1,6 \cdot 10^{-23}$ Дж, получим $K_q^{-1} = 6,4$, $\kappa_0 = 6,4 \cdot 10^9$ м $^{-1}$, $\kappa_+ = 6,46 \cdot 10^9$ м $^{-1}$, $\kappa_- = 6,34 \cdot 10^9$ м $^{-1}$, $\varepsilon_+ = 2 \cdot 10^{-19}$ Дж $\approx 1,2$ эВ, $\hbar\omega = 6,4 \cdot 10^{-21}$ Дж $\approx 0,04$ эВ, $\hbar\Delta = 0,01 \cdot (V_2 - V_1) = -1,6 \cdot 10^{-25}$ Дж. Это означает, что для горба, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала, с высотой, равной $V_2 = 6,4 \cdot 10^{-19}$ Дж ≈ 4 эВ, и шириной 1 нм, расщепление энергий $\hbar\omega$ отлично от нуля и квантовое туннелирование электрона велико и необходимо учитывать квантовые свойства двухуровневой системы, а энергия основного состояния электрона составляет $\varepsilon_+ = 2 \cdot 10^{-19}$ Дж $\approx 1,2$ эВ.

Таким образом, в двухъямном потенциале молекулы тубулина появляются дополнительные квантовые смещения электронов (туннелирование) в определенном направлении и на определенное расстояние — дискретные конформационные степени свободы. Следовательно, волновая функция электрона в молекуле тубулина должна зависеть не только от непрерывной пространственной координаты x , но и от одной дискретной переменной, указывающей значение проекции псевдоспина на некоторое выбранное направление в пространстве псевдоспина, например, на ось z . Для нашего случая двухуровневой системы волновая функция электрона будет иметь вид спинора $\Psi(x, S^z)$, который представляет собой совокупность двух различных функций координат — четной $\Psi(x, +1/2) = \Psi_+(x)$ и нечетной $\Psi(x, -1/2) = \Psi_-(x)$, отвечающих различным значениям z -компоненты псевдоспина. Оператор псевдоспина при применении его к волновой функции $\Psi(x, S^z)$ действует только на переменную S^z . Для операторов псевдоспина выполняются обычные коммутационные соотношения

$$[S_{ai}^\alpha, S_{bj}^\beta] = i\delta_{ab}\delta_{ij}S_{ai}^\gamma, \quad (18)$$

где $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ в пространстве псевдоспина; a, b нумеруют молекулы тубулина. Для каждой двухуровневой системы любой оператор частиц (эрмитова матрица второго порядка) может быть выражен через операторы псевдоспина $1/2$ (S^x, S^y, S^z и единичную матрицу). Физический смысл псевдоспиновых операторов S_j^x, S_j^z простой: оператор S_j^z характеризует разницу заселенностей симметричного и антисимметричного состояний (туннелирование), а оператор S_j^x характеризует разницу между заселенностями левого и правого положений двухъямного потенциала (дипольный момент).

В представлении четной и нечетной волновых функций Ψ_+, Ψ_- одночастичная потенциальная энергия электрона в молекуле тубулина с номером a , находящегося в симметричном двухъямном потенциале, будет иметь вид

$$H_0 = \hbar\omega S_a^z. \quad (19)$$

Потенциальную энергию взаимодействия между электронами различных молекул тубулина (дипольными моментами) в простейшем случае можно записать в виде суммы двухчастичных взаимодействий псевдоспинов:

$$H_1 = -(1/2) \sum_{a,b} J_{ab} S_a^x S_b^x. \quad (20)$$

Здесь J_{ab} — эффективная константа взаимодействия псевдоспинов (дипольных моментов). Суммирование по a, b идет по всем молекулам тубулина микротрубочки цитоскелета. Принимая во внимание короткий по времени характер взаимодействия между электронами молекул тубулина, можно считать эффективные константы J_{ab} отличными от нуля только для ближайших соседей и равными $J_{1b} = J_{2b} = J_{3b} = J_{4b} = J_{5b} = J_{6b}$ для ферромагнитного упорядочения дипольных моментов и $-J_{1b} = -J_{2b} = J_{3b} = -J_{4b} = -J_{5b} = J_{6b}$ для антиферромагнитного (см. рис. 2).

Предложенная модель позволяет заключить, что в микротрубочке цитоскелета односторонний потенциальный рельеф электрона, ответственного за “переключение” между конформациями молекулы тубулина, имеет двухъямный характер. Поэтому систему конформационных степеней свободы в микротрубочке цитоскелета необходимо описывать как квантовую двухуровневую систему (18)–(20). Эффект квантового поведения микротрубочки цитоскелета становится существенным, когда высота горба, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала в молекуле тубулина, становится $V_2 = 6.4 \cdot 10^{-19}$ Дж ≈ 4 эВ, а ширина 1–2 нм. В рамках предложенной модели энергия основного состояния электрона составляет $\varepsilon_+ = 2 \cdot 10^{-19}$ Дж ≈ 1.2 эВ, расщепление энергий четного и нечетного состояний электрона (величина, характеризующая туннельный эффект) равно $\varepsilon = \hbar\omega = (6.4 \cdot 10^{-21} - 6.4 \cdot 10^{-23})$ Дж $\approx (0.04 - 0.0004)$ эВ, соответствующая частота туннелирования составляет $\omega = (6 \cdot 10^{13} - 6 \cdot 10^{11})$ с $^{-1}$, длина электромагнитной волны $\lambda = (1/2)(10^{-3} - 10^{-5})$ м, что согласуется с экспериментально определенными резонансными частотами и длинами волн в микротрубочке цитоскелета [1, 5, 6]. Электрон в молекуле тубулина за очень короткое время порядка (1–0.1 пс) туннелирует через потенциальный барьер. Такое сверхбыстрое разделение зарядов в молекуле тубулина позволяет избегать диссипации энергии, поскольку время релаксации электронного возбуждения в ней достигает нескольких сот пикосекунд.

Конформации тубулина соответствуют различным состояниям электрической поляризации димера, возникающим вследствие того, что электрон в центре перемычки α -тубулин/ β -тубулин занимает в различных конформациях различные положения (см. рис. 1). Последнее обусловлено сменой электрической поляризации молекулы тубулина на альтернативную. Вследствие наличия ван-дер-ваальсовых сил между молекулами тубулина возникает взаимодействие между дипольными моментами тубулина, из анализа которых вытекают правила, определяющие конформацию каждого димера через конформации его соседей. Если все константы диполь-дипольного взаимодействия положительны, то диполи имеют сегнетоэлектрическую ориентацию, а если некоторые константы взаимодействия отрицательны — антисегнетоэлектрическую (см. рис. 2).

Система взаимодействующих дипольных моментов имеет основное состояние (при $T = 0$) с полностью упорядоченной решеткой диполей (сегнетоэлектрическое или антисегнетоэлектрическое состояние), а при высоких температурах состояние системы диполей находится в беспорядке — является параэлектрическим. Следовательно, при изменении внешнего воздействия (температуры, электрического поля) в такой системе диполей возникает неустойчивость относительно фазового сегнетоэлектрического перехода: сегнетоэлектрик — параэлектрик или антисегнетоэлектрик — параэлектрик. Важно, что в близкой окрестности критического значения внешнего воздействия корреляция между направлениями дипольных моментов ослабевает (исчезает дальний порядок), но остается ближний порядок в направлениях дипольных моментов. Состояние с ближним порядком в направлениях дипольных моментов называется предпереходным [12].

Ценность предлагаемой модели заключается в том, что она способна показать связь

физических процессов (самосборки и саморазборки микротрубочки цитоскелета, передачи сигналов), протекающих в микротрубочках цитоскелета, с динамикой сегнетоэлектрических свойств макроскопических состояний системы диполей молекул тубулина следующим образом. Поскольку молекулы тубулина обладают дипольными моментами, а микротрубочка цитоскелета представляет собой систему ориентированных диполей, изменяя величину внешнего воздействия (температуру, электрическое поле в пределах физиологических условий), можно изменять состояние системы диполей по схеме: сегнетоэлектрическое (антисегнетоэлектрическое) состояние — предпереходное состояние (состояние с ближним порядком) — параэлектрическое состояние. Сегнетоэлектрическое состояние микротрубочки цитоскелета с сильным диполь-дипольным взаимодействием и ярко выраженным дальним порядком оптимально для передачи сигналов, осуществления сборки-разборки микротрубочки цитоскелета. Изменение внутримолекулярного электрического поля вызывает направленную сборку микротрубочки цитоскелета, определяя таким способом внутриклеточные движения и потоки. Предпереходное состояние со слабой корреляцией между направлениями (с ближним порядком) дипольных моментов тубулина удобно для обработки информации и вычислений. Благодаря этим свойствам каждая микротрубочка способна осуществлять передачу и обработку любого рода сигналов.

Таким образом, если принять во внимание процессы в микротрубочках цитоскелета, можно выдвинуть гипотезу о том, что потенциальная “вычислительная мощность” мозга выше, чем считалось традиционно, когда элементарным структурным элементом переключений мозга считались “цельные нейроны”. Согласно “цельнонейронной” модели, человеческий мозг может в принципе достичь производительности порядка 10^{14} операций в секунду, но не более того; это при том, что в мозге имеется около 10^{11} функционирующих нейронов, каждый из которых способен посылать примерно по 10^3 сигналов в секунду. Если же в качестве элементарного “вычислительного блока” взять димер тубулина, то следует учесть, что на каждый нейрон приходится около 10^7 димеров; соответственно, можно прогнозировать выполнение элементарных операций в 10^6 раз быстрее, в результате чего получается 10^{27} операций в секунду [1, 2]. Ясно, что человеческий мозг существенно выигрывает в производительности благодаря гигантскому массиву своих “микротрубочковых информационных нанопроцессоров”, если сравнивать с тем, чего он смог бы достичь, располагая он лишь “переключателями цельнонейронного типа”.

2. Нелинейный кольцевой интерферометр как структурный аналог микротрубочек цитоскелета

Микротрубочка цитоскелета — в абстрактно-системном плане — представляет собой периодическую (в простейшем приближении — одномерную) последовательность бистабильных структурных элементов. Напомним, что бистабильными называют системы, способные находиться в одном из двух устойчивых состояний. Естественно задаться вопросом о структурных аналогах микротрубочек цитоскелета. По нашему мнению, одним из возможных структурных аналогов ее в оптике способен служить двухконтурный нелинейный кольцевой интерферометр (НКИ) [13], представляющий собой модификацию известного в литературе одноконтурного интерферометра [14] (рис. 5).

Действие линейного оптического элемента (G на рис. 5, a) для преобразования поля заключается в том, что луч, вошедший в точке $r' \equiv (x', y')$ поперечного сечения лазерного пучка, переходит в точку $r \equiv (x, y)$, например, посредством преобразований, представленных

ных на рис. 6. Ограничимся так называемым “точечным приближением”, когда пренебрегают диффузией поляризованных молекул в нелинейной среде и дифракцией света. Тогда правомерно считать, что все множество точек поперечного сечения пучка света xOy — в зависимости от вида преобразования поля элементом G (рис. 5) — разбивается на бесконечное число независимых (в смысле отсутствия физического взаимодействия между полями и нелинейными фазовыми набегам $U(r, t)$ в нелинейной среде) друг от друга подмножеств. Но эти подмножества представляют собой цепочки точек, в которых последовательно осуществляется взаимодействие между световыми полями и нелинейными фазовыми набегам (рис. 5, а и б).

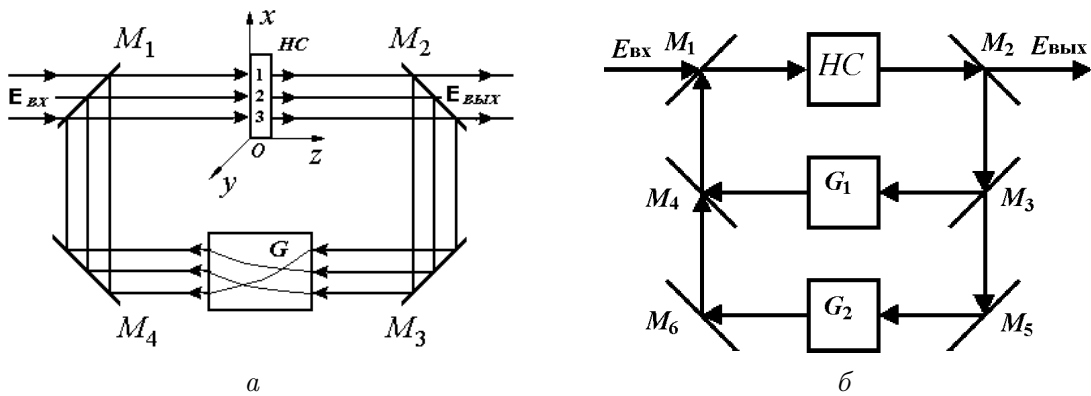


Рис. 5. Оптические схемы одноконтурного (а) и двухконтурного (б) нелинейного кольцевого интерферометра. HC — нелинейная среда (например, в ней имеет место высокочастотный эффект Керра); G — линейный элемент, производящий пространственное преобразование поля.

Простейшие типы пространственного преобразования светового пучка элементом G			
Поворот ($\Delta=2\pi M/m$)	Сдвиг (δ)	Сжатие ($1/\sigma$)	Растяжение (σ)
Тип цепочки транспозиционных точек (ЦТТ)			
Замкнутая конечная	Незамкнутая конечная	Незамкнутая бесконечная	
		$(m = \infty)$	$(m = -\infty)$
Формирующиеся идеализированные структуры			

Рис. 6. Связь между простейшими типами преобразования лазерного пучка в контуре обратной связи НКИ (задающем конфигурацию цепочки транспозиционных точек) и видом формируемой оптической структуры $U(r, t)$ в поперечном сечении пучка.

В зависимости от сочетания параметров интерферометра как динамической системы возможны те или иные конфигурации статических состояний в ее фазовом пространстве. Идентификацию динамической системы как моно-, би- либо мультистабильной помогают сделать бифуркационные диаграммы, которые строятся на плоскости: стационарное значение динамической переменной — бифуркационный параметр. Так, представление о возможных состояниях НКИ дают бифуркационные диаграммы на плоскости: стационарное значение нелинейного фазового набега U — параметр нелинейности K (рис. 7). В частности, НКИ способен быть моностабильной, бистабильной, мультистабильной системой. Примеры некоторых типов структур приведены на рис. 8. Как видно, бистабильные состояния возможны даже в одноконтурном интерферометре, когда поворот поля в цепи обратной связи отсутствует [14]. В этом случае цепочка транспозиционных точек (ЦТТ) состоит из одной транспозиционной точки (рис. 9, *a*). А весь набор ЦТТ символизирует совокупность не связанных между собой бистабильных элементов. Элементы эти предлагается рассматривать в качестве функциональных аналогов молекул тубулина.

Наличие второго контура обуславливает связь между этими элементами (рис. 9, *б*). Подобную связь может обеспечить также диффузия поляризованных молекул в нелинейной среде и/или дифракция света. Таким образом, интерферометр правомерно трактовать как структурный аналог микротрубочки цитоскелета.

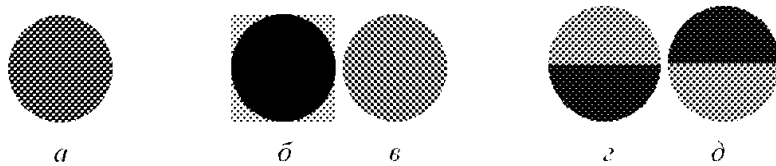


Рис. 7. Типы структур в поперечном сечении лазерного пучка в нелинейном кольцевом интерферометре при различных значениях параметра нелинейности K и угла поворота Δ оптического поля в поперечном сечении xOy пучка: $K = 1, \Delta = 0$ либо $\Delta = 180$ (*a* — моностабильность); $K = 4, 5, \Delta = 0$ (*б, в* — бистабильность), $K = 3, \Delta = 180^\circ$ (*г, д* — бистабильность).

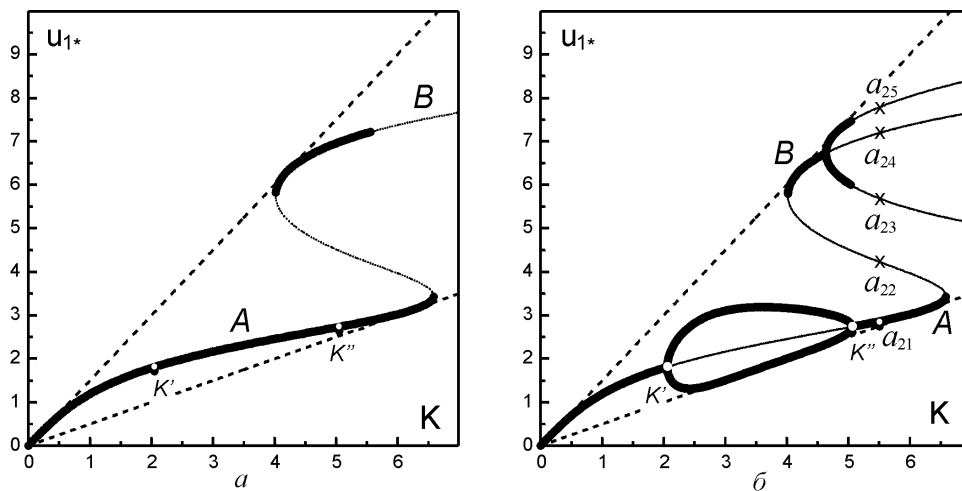


Рис. 8. Бифуркационные диаграммы (на плоскости стационарное решение — параметр нелинейности K) для одноконтурного НКИ при углах поворота поля в контуре: *a* — $\Delta = 0$; *б* — $\Delta = 180^\circ$; жирными линиями показаны устойчивые участки ветвей.

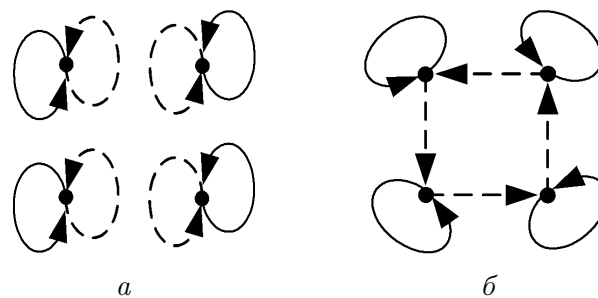


Рис. 9. Конфигурации ЦТТ, соответствующие следующим углам поворота в контурах обратной связи НКИ: *a* — $\Delta = 0$ и $\Delta = 0$; *б* — $\Delta = 0$ и $\Delta = 90^\circ$; сплошные линии обозначают переходы между точками ЦТТ в первом контуре, штриховые — во втором.

Конформационные степени свободы информационного белкового нанополимера — микротрубочки цитоскелета — ответственны за сегнетоэлектрические свойства этой системы. Управляя внешним воздействием (температурой, электрическим полем), можно изменять площадь горба, разделяющего минимумы двухъямного потенциала молекулы тубулина, квантовые свойства микротрубочки цитоскелета. Поэтому микротрубочка цитоскелета является естественной квантовой оптико-акустической системой, способной считывать, записывать, обрабатывать, генерировать и передавать информацию, т. е. выполнять те элементарные функции, которые обычно приписывают человеческому сознанию.

Итак, в процессе поиска искусственных аналогов трубочек цитоскелета нам удалось выявить в качестве одного из них двухконтурный нелинейный кольцевой интерферометр. Аналогия состоит в том, что интерферометр можно представить как систему связанных бистабильных подсистем. Далее логично вести исследования в нескольких взаимосвязанных направлениях.

1. Выяснить и формализовать механизмы влияния внешних факторов на молекулы тубулина и их состояния, а также механизмы их взаимодействия.
2. Построить модель информационного взаимодействия в микротрубочке цитоскелета.
3. Построить математическую модель оптического прототипа микротрубочки цитоскелета, трактуя интерферометр как функциональный аналог микротрубочки цитоскелета.
4. Провести компьютерное моделирование оптического прототипа микротрубочки.
5. Создать радиофизический аналог оптического прототипа и экспериментальный оптический макет микротрубочки цитоскелета.

Список литературы

- [1] ПЕНРОУЗ Р. Тени разума: в поисках науки о сознании. Ижевск: ИКИ, 2005. 690 с.
- [2] HAMEROFF S., PENROSE R. Orchestrated reduction of quantum coherence in brain microtubules // J. of Consciousness Studies. 1994. N 1. P. 91–118.
- [3] КАЙМАНОВИЧ В.А., КРУПИЦКИЙ Е.М., СПИРОВ А.В. Возможная роль внутриклеточных электрических полей в ориентации сборки микротрубочек // Биофизика. 1990. Т. 35, вып. 4. С. 603–604.
- [4] BROUN J.A., TUSZUNSKI J.A. A Review of the ferroelectric model of microtubules // Ferroelectrics. 1999. Vol. 220. P. 141–155.

- [5] TUSZYNSKI J.A., HAMEROFF S.H., SATARIC M.V. ET AL. Ferroelectric behavior in microtubule dipole lattices // J. Theor. Biol. 1995. Vol. 174. P. 371–380.
- [6] HUNT C., STEBBINGS H. Role of MAPs and motors in the bundling // Cell Motility and the Cytoskeleton. 1994. Vol. 27. P. 6978–6985.
- [7] БЛАГОДАТСКИХ В.И., ГАРЯЕВ П.П. Взаимодействие когерентного электромагнитного излучения с биомакромолекулами // Laser Physics. Vol. 6, N 4. P. 621–628.
- [8] SATARIC M.V., TUSZYNSKI J.A., ZAKULA R.B. Kinklike excitations as an energy transfer mechanism in microtubules // Phys. Rev. E. 1993. Vol. 48, N 1. P. 589–597.
- [9] Слядников Е.Е. Микроскопическая модель информационной биомакромолекулы // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 8. С. 52–59.
- [10] Волькенштейн М.В. Биофизика. М.: Наука, 1988. 591 с.
- [11] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 521 с.
- [12] Слядников Е.Е. Предпереходное состояние и структурный переход в деформированном кристалле // Физика твердого тела. 2004. Т. 46, № 6. С. 1065–1071.
- [13] IZMAILOV I.V., LYACHIN A.V., NAZAROV M.E. ET AL. Second circuit of two-dimensional feedback loop ring // Proc. of 2nd Intern. Conf. “Physics and Control” (PhysCon-05). Russia, Saint Petersburg, 2005. P. 841–846.
- [14] НОВЫЕ физические принципы оптической обработки информации. М.: Наука, 1990. С. 263–326.

Поступила в редакцию 31 мая 2006 г.