

01;05

Микроскопическая модель и фазовая диаграмма дипольной системы микротрубочки цитоскелета при конечных температурах

© Е.Е. Слядников

Томский научный центр СО РАН,
634021 Томск, Россия
e-mail: opi@hq.tsc.ru

(Поступило в Редакцию 3 сентября 2009 г.)

Развита микроскопическая модель дипольной системы микротрубочки цитоскелета на область конечных температур. Построены фазовая диаграмма основного состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета, температурная фазовая диаграмма дипольной системы микротрубочки цитоскелета и зависимость среднего квадрата поляризации от температуры в дипольной системе микротрубочки цитоскелета.

Введение

В последние годы наблюдается значительный интерес к гипотезе „квантово-статистической“ природы человеческого сознания [1]. Есть экспериментальные свидетельства, что в нейтронах мозга подходящими субстратами для „квантово-статистических вычислений“ являются информационные белковые нанополимеры — микротрубочки цитоскелета [2]. Базовым элементом структуры цитоскелета являются микротрубочки цитоскелета, которые представляют собой полые цилиндрические трубочки с внешним диаметром 25 nm и внутренним — около 14 nm, длиной 1–10 μm , иногда организованные в более крупные трубнообразные волокна [1,2].

В экспериментальных исследованиях (см., например, [1,2]), выполненных при физиологической температуре и посвященных поискам пьезоэлектрических эффектов в живых системах, было обнаружено, что микротрубочка цитоскелета обладает дипольным моментом. Массивы микротрубочек цитоскелета обнаруживают сегнетоэлектрические свойства, ориентируются под действием как внешнего, так и внутриклеточного электрического поля. Каждая молекула тубулина, из которой построены микротрубочки цитоскелета, обладает дипольным моментом величиной около 100 D. Микротрубочки цитоскелета оптически мерцают при метаболической активности, чрезвычайно чувствительны к электромагнитному излучению миллиметрового диапазона длин волн, в них обнаружены солитонные возбуждения, вызванные когерентным электромагнитным излучением [3]. Все эти экспериментально полученные результаты требуют объяснения с точки зрения теории сегнетоэлектричества.

Одна из первых теоретических моделей описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета, предполагающая существование фазового перехода при некоторой критической температуре T_c , была предложена в работе [4]. Считалось, что причина фазового перехода заключается в наличии упорядочивающего взаимодействия между дипольными моментами тубулина, которые при понижении температуры, когда разупорядочивающее влияние теплового движения становится слабее взаимодействия, образуют упорядоченное состояние

с отличной от нуля поляризацией. Эта двумерная модель системы взаимодействующих диполей основывалась на приближении эффективного поля и в континуальном приближении привела к решению в виде сегнетоэлектрической доменной стенки [5]. Затем для этой системы диполей была сформулирована классическая двумерная модель Изинга, с помощью которой исследован сегнетоэлектрический переход, рассчитаны критическая температура, электронная поляризация микротрубочки цитоскелета как функция температуры [6].

Однако микротрубочки цитоскелета являются существенно одномерными наноструктурами, которые представляют собой полимерные цепочки, свернутые в спирали [1,2]. В низкоразмерных системах не существует ярко выраженного фазового перехода, критической температуры, флуктуации размывают дальний порядок, следовательно, такие системы должны описываться с помощью флуктуационных теорий [7]. Поэтому для описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета нужно формулировать новые одномерные модели информационных белковых нанополимеров, учитывающие флуктуации поляризации, двухъямный характер потенциала в молекуле тубулина и возбуждение конфигурационных степеней свободы [8].

Недавно предложена микроскопическая модель дипольной системы микротрубочки цитоскелета [9], в которой в качестве причин возникновения упорядочения наряду с диполь-дипольным взаимодействием принята во внимание роль двухъямного потенциала в молекуле тубулина. Эта модель обладает такими физическими свойствами, из которых возникает способность микротрубочки к интеллектуальной обработке информации, например, функция распознавания образцов, которая является фундаментальным свойством живой природы от клеточного уровня до высших психических функций человека. В последующей работе [10] исследована взаимосвязь физических и информационных характеристик в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета. Показано, что поведение дипольной системы микротрубочки цитоскелета, состоящей из огромного числа дипольных моментов молекул тубулина (степеней свободы), вблизи

точки перехода описывается лишь одной неустойчивой переменной, амплитуда которой является параметром порядка. Следовательно, при протекании фазового перехода в дипольной подсистеме микротрубочки цитоскелета имеет место колоссальное сжатие информации. Таким образом, микротрубочка цитоскелета является распределенной системой с параллельной обработкой информации, способной сжимать, а не только запоминать информацию и распознавать детали образцов.

Целью настоящей работы является развитие микроскопической модели [8,9] на область конечных температур, получение самосогласованных уравнений для параметров порядка при сегнетоэлектрическом переходе и построение температурной фазовой диаграммы дипольной системы микротрубочки цитоскелета.

1. Микроскопическая модель и гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета

Рассмотрим дипольную подсистему информационного белкового нанополимера — микротрубочки цитоскелета, которая ответственна за сегнетоэлектрические свойства этого объекта. Эта система представляет собой цепочку дипольных моментов молекул тубулина, свернутую в спираль. Каждая молекула тубулина (димер) обладает дипольным моментом (рис. 1), и на состоянии поляризации димера влияют состояния поляризации ближайших соседей (вследствие слабых ван-дер-ваальсовых связей между ними, которые вызывают взаимную ориентацию дипольных моментов молекул тубулина). Существуют вполне конкретные правила, определяющие конформацию каждого димера через конформации его соседей: если коэффициент диполь-дипольной связи положителен, то диполи имеют ферромагнитную ориентацию, если коэффициент связи отрицателен — антиферромагнитную ориентацию, если коэффициент связи случайная величина — неупорядоченную ориентацию (дипольное стекло).

Поскольку тубулины — это молекулы-димеры, существующие в двух пространственных конформациях, то электрон молекулы тубулина, ответственный за „переключение“ между конформациями, движется в симметричном потенциале, который имеет два локальных минимума. Левая яма соответствует α -состоянию молекулы тубулина, а правая яма — β -состоянию молекулы. Разумно предположить, что этот потенциал имеет характерные значения для потенциального барьера между двумя ямами $\epsilon_a \approx 4.3 \cdot 10^{-21}$ J (порядка тепловой энергии электрона при температуре человеческого тела), а для высоты боковой стенки потенциала $224\epsilon_a \approx 9.6 \cdot 10^{-19}$ J (порядка энергии выхода электрона из молекулы тубулина).

Если ямы потенциала достаточно круты, то электрон наряду с малыми колебаниями относительно положения равновесия в одной из ям двухъямного потенциала

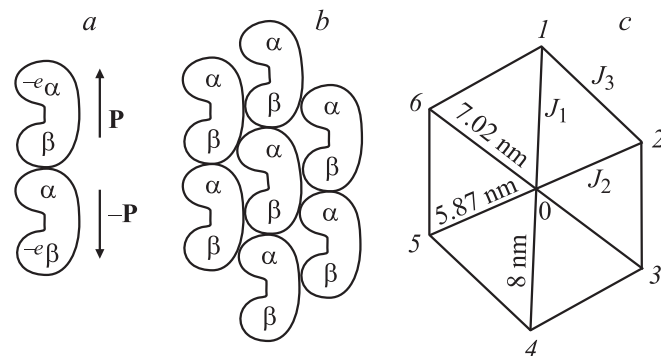


Рис. 1. Схемы: молекулы тубулина в различных конформациях с противоположными дипольными моментами (a), ближайшего окружения молекулы тубулина (b), псевдоспиновых связей элементарной ячейки гексагональной решетки микротрубочки цитоскелета (c) [1,2].

может совершать тепловые перескоки через потенциальный барьер из одной в другую потенциальную яму. В таком случае основное состояние электрона в каждой яме дважды вырождено. Квантовомеханическое туннелирование электрона через потенциальный барьер между двумя ямами снимает вырождение основного состояния и существенно влияет на динамику дипольной системы микротрубочки цитоскелета [8].

Для последовательного изучения равновесных сегнетоэлектрических свойств микротрубочки цитоскелета при конечных температурах и построения фазовой диаграммы вначале исследуем случай отсутствия туннелирования в двухъямном потенциале молекулы тубулина. Этот предел соответствует физической ситуации, когда высота потенциального барьера между двумя ямами равна $\epsilon_a \approx 4.3 \cdot 10^{-21}$ J (порядка тепловой энергии электрона при температуре человеческого тела). В этом случае переход электрона из одной потенциальной ямы в другую в молекуле тубулина при температуре человеческого тела имеет тепловой флуктуационный характер и систему N диполей в микротрубочке цитоскелета можно описывать как классическую систему из N классических псевдоспинов $1/2$, каждый из которых может находиться всего в одном из двух состояний $S_i^z = +1, S_i^z = -1$.

Простейший гамильтониан системы взаимодействующих классических псевдоспинов описывается выражением

$$H = -(1/2) \sum_{i,j}^N J_{ij} S_i^z S_j^z, \quad (1)$$

Здесь J_{ij} — элементы матрицы коэффициентов связи псевдоспинов (дипольных моментов). Суммирование по i, j идет по всем молекулам тубулина микротрубочки цитоскелета. Обычно считается, что коэффициенты связи J_{ij} отличны от нуля только для ближайших дипольных моментов. Минимальному значению энергии E соответствует определенная конфигурация дипольных моментов тубулина в микротрубочке цитоскелета, так

называемое основное состояние. Именно оно характеризует устойчивое равновесное состояние микротрубочки цитоскелета.

Если все коэффициенты связи J_{ij} положительны, то в состоянии с минимумом энергии E все псевдоспины микротрубочки имеют одинаковое направление $S_i^z = +1$ или $S_i^z = -1$. При этом энергия взаимодействия любой пары псевдоспинов $\delta E_{ij} = -J_{ij}S_i^zS_j^z$ достигает своего минимального значения $\delta E_{ij} = -J_{ij}$. Такое состояние системы взаимодействующих псевдоспинов принято называть ферромагнитным. Если все коэффициенты связи J_{ij} отрицательны, то в состоянии с минимумом энергии E половина псевдоспинов микротрубочки имеет одно направление $S_i^z = +1$, а другая половина псевдоспинов микротрубочки — противоположное $S_i^z = -1$. Поэтому дипольную решетку микротрубочки удобно разбить на две подрешетки с одинаковыми векторами дипольных моментов, причем энергия взаимодействия любой пары псевдоспинов из разных подрешеток $\delta E_{ij} = -J_{ij}S_i^zS_j^z$ достигает своего минимального значения $\delta E_{ij} = J_{ij}$. Такое состояние системы взаимодействующих псевдоспинов принято называть антиферромагнитным.

В дипольных стеклах матрица J_{ij} состоит из случайных элементов, принимающих как положительные, так и отрицательные значения. В состоянии с минимумом энергии E для дипольного стекла значения энергии взаимодействий всех пар псевдоспинов не могут быть одновременно минимальными. Действительно, среди N псевдоспинов обычно найдутся такие тройки S_i^z, S_j^z, S_k^z , что произведение $J_{ij}J_{jk}J_{ki}$ будет отрицательным. Но тогда, как бы не выбирались направления этих трех псевдоспинов, не удастся сделать минимальными все три значения энергии парных взаимодействий $\delta E_{ij}, \delta E_{jk}, \delta E_{ki}$. Условия минимальности энергии взаимодействия для различных пар псевдоспинов несовместимы (конфликтуют) между собой, а система псевдоспинов оказывается фрустрированной.

Опираясь на предлагаемую физическую модель конформационных степеней свободы микротрубочки цитоскелета как системы взаимодействующих диполей, проведем оценку характерных величин коэффициентов псевдоспиновой связи J_{ij} . Исследования тонкой структуры микротрубочки цитоскелета методом дифракции гамма-лучей показали [4], что молекулы тубулина образуют почти правильную гексагональную решетку, которая показана на рис. 1.

Предположим, что каждая молекула тубулина обладает дипольным моментом $p = Qd \approx 6 \cdot 10^{-56} \text{ C}^2 \cdot \text{m}^2$, где $Q = 1e$ (e — заряд электрона) и $d = 4 \text{ nm}$, проекция на вертикальную ось z которого может быть $+p$ или $-p$ (рис. 1). Энергия взаимодействия между двумя элементарными диполями имеет вид [11]:

$$\begin{aligned} U &= (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{ij}^3) [\mathbf{p}_i \mathbf{p}_j - 3(\mathbf{p}_i \mathbf{n})(\mathbf{p}_j \mathbf{n})] \\ &= (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{ij}^3) [3 \cos^2 \Theta - 1] p^2, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\epsilon \approx 10$ — диэлектрическая проницаемость среды, $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$ — диэлектрическая проницаемость

вакуума, r_{ij} — расстояние между узлами i, j , \mathbf{n} — нормированный на единицу вектор, соединяющий узлы i и j . Θ — угол между направлениями оси диполя (вертикальная ось z) и вектора \mathbf{n} . В этом случае видно, что диполь-дипольное взаимодействие (2) является знакопеременным, и разные пары псевдоспинов могут взаимодействовать друг с другом как ферромагнитным, так и антиферромагнитным образом. Для характерных значений этих физических параметров рассчитаем коэффициенты псевдоспиновой связи для ближайших соседей:

$$\begin{aligned} J_1 &= 1.44 \cdot 10^{-21} \text{ J}, \quad \Theta_1 = 0^\circ, \quad J_2 = -2.25 \cdot 10^{-21} \text{ J}, \\ \Theta_2 &= 58.2^\circ, \quad J_3 = 1.315 \cdot 10^{-21} \text{ J}, \quad \Theta_3 = 45.6^\circ. \end{aligned} \quad (3)$$

Из (3) и рис. 1 видно, что ферромагнитному взаимодействию диполей в парах (0,1), (1,2) соответствует $J_1, J_3 > 0$, а антиферромагнитному взаимодействию диполей в паре (0,2) — $J_2 < 0$. Таким образом, в микротрубочке цитоскелета величины J_{ij} могут различаться по знаку для разных пар дипольных моментов. При этом не всегда геометрия расположения дипольных моментов позволяет ориентировать их дипольные моменты так, чтобы энергия каждой связи $i-j$ была минимальной. Это можно видеть на примере шести дипольных моментов элементарной ячейки микротрубочки цитоскелета. При указанных на рис. 1 знаках коэффициентов связи взаимная ориентация дипольных моментов двух пар, например (1,2), (2,3), (4,5), (5,6), является невыгодной, как бы ни ориентировались моменты. Связи, соединяющие дипольные моменты (1,2), (2,3), (4,5), (5,6), взаимная ориентация которых не соответствует знаку их констант связи, являются фрустрированными. Наличие фрустрированных связей — важнейшая особенность неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета. Она приводит к расщеплению основного состояния дипольной системы микротрубочки на большое число низколежащих по энергии состояний [9].

Таким образом, микротрубочка цитоскелета может быть дипольным стеклом, в котором основную роль играют взаимодействие ближайших соседей с антиферромагнитным коэффициентом связи $J_2 < 0$ и взаимодействие следующих за ближайшими соседями с ферромагнитным коэффициентом $J_1 > 0$, причем отношение $J_1/J_2 \approx -1.56$. Дипольная система представляет собой цепочку псевдоспинов, между которыми осуществляются конкурирующие ферро- и антиферромагнитное взаимодействия. Конечно, сформулировать модель дипольной системы микротрубочки цитоскелета, учитывающую все особенности реального взаимодействия дипольных моментов, очень трудно. Однако если искать ответ на вопрос о последствиях конкурирующих взаимодействий и отбросить все несущественные для изучаемого вопроса детали, оставив лишь конкурирующие взаимодействия в чистом виде, такую модель можно сформулировать следующим образом.

Будем считать J_{ik} случайной величиной. Как известно, для задания случайной величины необходимо задать ее

статистические свойства. Предположим, что случайная величина J_{ik} , заданная на связи между узлами i и k , не зависит от того, как J_{ik} находятся на других связях. В этом случае статистические свойства J_{ik} полностью определяются функцией распределения $f(J)$ на данной связи. Обычно предполагают, что $f(J)$ — гауссова функция распределения. В этом случае она задается двумя параметрами — средним значением \tilde{J}_{ik} и дисперсией I_{ik} :

$$\langle J_{ik} \rangle = \tilde{J}_{ik}, \quad I_{ik} = \langle J_{ik}^2 \rangle - \langle J_{ik} \rangle^2. \quad (4)$$

В предлагаемой модели между разными парами псевдоспинов происходят случайные взаимодействия разных знаков — ферро- или антиферромагнитные. Именно наличие взаимодействий разного знака и лежит в основе физики дипольной системы микротрубочки цитоскелета.

Пусть для простоты $\langle J_{ik} \rangle = \tilde{J}_{ik} = 0$. Это означает, что половина пар псевдоспинов случайным образом взаимодействует друг с другом ферромагнитно, а другая — антиферромагнитно. Возникает вопрос, может ли происходить при таком взаимодействии какой-либо фазовый переход. Ясно, что ни ферромагнитного, ни антиферромагнитного, ни какого-либо геликоидального упорядочения в такой системе быть не может. На первый взгляд, вообще фазового перехода представить себе нельзя. Однако Андерсон и Эдвардс [12] показали, что в системе с гамильтонианом (1) фазовый переход, тем не менее, возможен. Это фазовый переход, связанный с локальным замораживанием псевдоспинов.

Это означает следующее. В неупорядоченных системах имеются два вида усреднения по Гиббсу и по конфигурациям. Определим локальную замороженную поляризацию:

$$p_i = \langle S_i^z \rangle_T, \quad (5)$$

где $\langle \dots \rangle_T$ — обычное термодинамическое усреднение по Гиббсу:

$$\langle S_i^z \rangle_T = \left[\sum_{S_i^z} S_i^z \exp(-H/T) \right] \left[\sum_{S_i^z} \exp(-H/T) \right]^{-1}. \quad (6)$$

После усреднения по Гиббсу получим случайную функцию координат p_i . Легко показать, что в параэлектрической области $p_i = 0$ во всех узлах дипольной цепочки. При снижении температуры может возникнуть отличная от нуля во всех узлах случайная функция p_i . Это означает, что в каждом узле произошло частичное замораживание псевдоспина, но в каждом узле замороженная часть псевдоспина имеет свое случайное направление и случайное значение модуля. Таким образом, произошло локальное замораживание псевдоспина. Возникновение отличной от нуля случайной функции p_i означает, что произошел фазовый переход, связанный с появлением локальной замороженной поляризации со случайным направлением дипольных моментов.

Этот фазовый переход можно описать с помощью параметра порядка, которым, вообще говоря, является случайная функция p_i (5). Как и всякая случайная функция,

она описывается своими моментами. Полностью описать статические свойства случайной функции можно, лишь зная все ее моменты. Это слишком сложно, поэтому обычно используют лишь два простейших момента:

$$P = \langle p_i \rangle_C, \quad Q = \langle p_i^2 \rangle_C, \quad (7)$$

$\langle \dots \rangle_C$ — усреднение по конфигурациям. Очевидно, что P есть средняя поляризация системы, а Q определяет средний квадрат поляризации. Величина Q называется параметром порядка Эдвардса–Андерсона и является важной характеристикой дипольного стекла. Очевидно, если среднее значение $\tilde{J}_{ik} = 0$, то в этом случае Q остается единственной характеристикой дипольного стекла. В общем случае P и Q описываются двумя уравнениями, которые для спинового стекла получены с помощью метода реплик [12].

2. Уравнения молекулярного поля и фазовая диаграмма дипольной системы микротрубочки цитоскелета

Получим уравнения для переменных P и Q дипольной системы микротрубочки цитоскелета в приближении молекулярного поля исходя из простых физических соображений. Напишем для предложенной модели уравнения для локальных молекулярных полей E_i :

$$E_i = E_0 + \sum_{k=1}^z 2J_{ik} p(E_i), \quad (8)$$

где E_0 — внешнее электрическое поле, z — число ближайших соседей, $p(E_i)$ — зависимость поляризации от электрического поля. Например, для модели Изинга с гамильтонианом (1)

$$p(E) = \text{th}(E/T). \quad (9)$$

Тогда из (8) имеем

$$E_i = E_0 + \sum_{k=1}^z 2J_{ik} \text{th}(E_i/T). \quad (10)$$

Сделаем упрощающее предположение, а именно будем считать, что E_i статистически не зависят от J_{ij} . Тогда усредняя обе части (10) и учитывая, что при нашем предположении

$$\langle J_{ik} \text{th}(E_i/T) \rangle = \langle J_{ik} \rangle \langle \text{th}(E_i/T) \rangle, \quad (11)$$

получаем

$$\langle E \rangle = E_0 + 2J \langle \text{th}(E/T) \rangle, \quad (12)$$

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 4 \left\{ I \langle \text{th}^2(E/T) \rangle + (J^2/z) \times [\langle \text{th}^2(E/T) \rangle - \langle \text{th}(E/T) \rangle^2] \right\}, \quad (13)$$

$$J = \sum_{k=1}^z \tilde{J}_{ik}, \quad I = \sum_{k=1}^z I_{ik}. \quad (14)$$

Обычно теория молекулярного поля применима при $z \gg 1$. Для элементарной ячейки микротрубочки $z = 6$ и ситуация аналогична, поэтому будем считать в дальнейшем, что

$$z \gg 1. \quad (15)$$

Кроме того, предположим, что

$$J^2 \approx I, \quad (16)$$

тогда $(J^2/z) \approx (I/z) \ll 1$, и из (12), (13) получим

$$\langle E \rangle = E_0 + 2J \langle \text{th}(E/T) \rangle, \quad (17)$$

$$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 4I \langle \text{th}^2(E/T) \rangle. \quad (18)$$

Усреднение в (17), (18) ведется по некоторой функции распределения молекулярных полей $f(E)$. Если $z \gg 1$, то, как видно из (10), E_i представляет собой сумму большого числа слагаемых. Тогда, как нетрудно видеть, функция распределения $f(E)$ является гауссовой [13]:

$$f(E) = [2\pi(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)]^{-1/2} \times \exp\left\{-(E - \langle E \rangle)^2 [2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)]^{-1}\right\}. \quad (19)$$

Из (17), (18) получим следующие уравнения для $\langle E \rangle$ и $(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$:

$$\langle E \rangle = E_0 + 2JP, \quad \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = 4IQ, \quad (20)$$

$$P = \int dE f(E) \text{th}(E/T) = \langle \text{th}(E/T) \rangle = \langle p(E) \rangle, \quad (21)$$

$$Q = \int dE f(E) \text{th}^2(E/T) = \langle \text{th}^2(E/T) \rangle = \langle p^2(E) \rangle. \quad (22)$$

Очевидно, что P и Q есть величины, определенные в (7). Перепишем эти уравнения в более удобном для расчетов виде:

$$P = [2\pi]^{-1/2} \times \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}[T^{-1}(E_0 + 2JP + 2x\sqrt{IQ})], \quad (23)$$

$$Q = [2\pi]^{-1/2} \times \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}^2[T^{-1}(E_0 + 2JP + 2x\sqrt{IQ})]. \quad (24)$$

Используя выражение для энергии взаимодействия (1), построим фазовую диаграмму основного состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета (при $T = 0$), взяв за основу элементарную ячейку из семи молекул тубулина. Для простоты будем считать, что $J_3 = J_1$. В качестве абсциссы возьмем $\lambda = J_2/J_1$ — отношение величины антиферромагнитной связи к величине ферромагнитной связи, в качестве ординаты ν — концентрацию антиферромагнитных связей.

Для построения фазовой диаграммы необходимо определить две линии фазовых переходов. Это линии переходов: ферромагнитное состояние—состояние дипольного стекла и состояние дипольного стекла—антиферромагнитное состояние. Стоит заметить, что ν для выбранной ячейки из семи молекул тубулина может принимать 7 эквидистантных дискретных значений от нуля до единицы. Это связано с тем, что число самих молекул тубулина в элементарной ячейке ограничено, а значит и число взаимодействий J_1 и J_2 ограничено.

Таким образом, для построения фазовой диаграммы необходимо рассмотреть значения ν на отрезке от нуля до единицы с интервалом в $1/6$ и для каждого значения ν определить два значения параметра λ : одно для фазового перехода ферромагнетик—дипольное стекло, другое — для перехода дипольное стекло—антиферромагнетик.

Значение ν определяется количеством антиферромагнитных связей. Например, на рис. 1 $\nu = 2/6 = 1/3$. Задать ν можно, если задать в явном виде матрицу J_{ij} , состоящую из соответствующих коэффициентов псевдоспиновой связи.

Явный вид матриц для $\nu = 1/6, 1/2, 1/2, 2/3, 5/6$ приведен в Приложении. Очевидно, что в случае $\nu = 0$ состояние будет ферромагнитным, а в случае $\nu = 1$ — антиферромагнитным, и содержательным будет рассмотрение этих пяти состояний. Интервал изменения λ от $-\infty$ до -3 отвечает весьма сильной антиферромагнитной связи, поэтому интересующее нас состояние дипольного стекла на этом интервале будет занимать малую область на фазовой диаграмме. Тем более для микротрубочки характерно $\lambda \approx -1.5$, следовательно, наиболее информативным является построение фазовой диаграммы именно в окрестности этой точки. Поэтому для каждого значения ν выбираем значение λ в интервале от -3 до 0 . Для каждого выбранного значения λ необходимо рассчитать энергию взаимодействия всех возможных конфигураций псевдоспинов (вверх или вниз). Ячейка из семи молекул тубулина обладает 128 конфигурациями. Любую из 128 конфигураций псевдоспинов можно охарактеризовать как ферромагнитную, антиферромагнитную или как состояние дипольного стекла.

Для выбранных λ и ν необходимо найти конфигурацию псевдоспинов, обладающую наименьшей энергией взаимодействия (1), а затем определить, что это за состояние.

Так фазовой диаграмме точки $(-0.10; 1/6)$, $(-0.50; 1/6)$, $(-0.75; 1/6)$, $(-1.0; 1/6)$, $(-2.0; 1/6)$, $(-3.0; 1/6)$, $(-0.10; 1/3)$, $(-0.50; 1/3)$, $(-0.65; 1/3)$, $(-0.10; 1/2)$, $(-0.25; 1/2)$ являются точками ферромагнитного состояния. Тогда как точки $(-0.70; 1/3)$, $(-0.80; 1/3)$, $(-1.00; 1/3)$, $(-1.50; 1/3)$, $(-1.75; 1/3)$, $(-1.95; 1/3)$, $(-0.35; 1/2)$, $(-0.5; 1/2)$, $(-0.75; 1/2)$, $(-1; 1/2)$ являются точками состояния дипольного стекла. А точки $(-2; 1/3)$, $(-3; 1/3)$, $(-1.125; 1/2)$, $(-1.5; 1/2)$, $(-0.1; 2/3)$ являются точками антиферромагнитного состояния. Эти данные в более наглядном виде представлены на рис. 2.

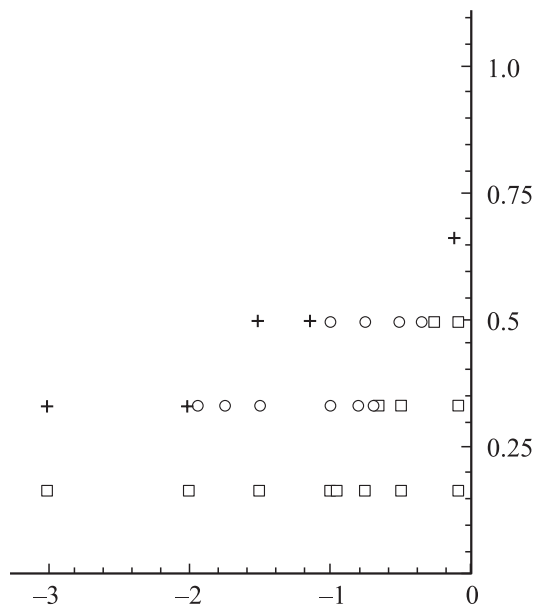


Рис. 2. Точки на фазовой диаграмме: квадраты — ферромагнитное состояние, окружности — дипольное стекло, крестики — антиферромагнитное состояние.

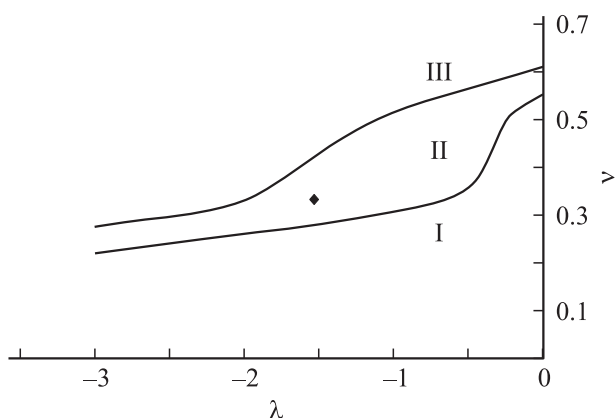


Рис. 3. Фазовая диаграмма основного состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах λ, ν .

Таким образом, точки $(0; 0.56)$, $(-0.25; 0.5)$, $(-0.65; 0.33)$, $(-3; 0.22)$ лежат на кривой, соответствующей фазовому переходу ферромагнетик–дипольное стекло. А точки $(0; 0.61)$, $(-1.13; 0.5)$, $(-2; 0.33)$, $(-3; 0.28)$ лежат на кривой фазового перехода дипольное стекло–антиферромагнетик. Интерполяцией построим эти кривые, которые разделят плоскость (λ, ν) на три области: ферромагнитное состояние (I), дипольное стекло (II) и антиферромагнитное состояние (III). Итоговая фазовая диаграмма основного состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах λ, ν представлена на рис. 3. Точкой указано состояние дипольной системы микротрубочки $\lambda^* = -1.56$, $\nu^* = 0.33$, которое является ее основным состоянием при характерных значениях параметров.

Далее исследуем уравнения (23), (24), описывающие дипольную систему микротрубочки цитоскелета при конечных температурах, при

$$J = \sum_{k=1}^z \tilde{J}_{ik} = 0.$$

Тогда из (23), (24) видно, что остается только одно уравнение для Q , а P определяется через Q . Если $E_0 = 0$, то ясно, что при

$$T = T_f = 2\sqrt{I} \tag{25}$$

появляется ненулевое решение для Q , т.е. T_f — точка фазового перехода. Это и есть переход в фазу дипольного стекла в микротрубочке цитоскелета. Если $E_0 \neq 0$, то получим

$$Q = E_0^2 / (T^2 - T_f^2), \tag{26}$$

$$P = (E_0/T) - (E_0^3/3T^3) - (T_f^3/T^3)E_0^3[T^2 - T_f^2]^{-1}. \tag{27}$$

Из (26) видно, что при высоких температурах возникает конечное значение $Q \approx R_0^2$. Это совершенно естественно, поскольку внешнее электрическое поле приводит к появлению локальной поляризации. По мере приближения T к T_f значение Q возрастает, что свидетельствует, как обычно, о появлении при $T = T_f$ спонтанной локальной поляризации, а следовательно, и спонтанного ненулевого Q . Из (27) видно, что третья производная поляризации по электрическому полю, т.е. нелинейная восприимчивость тоже расходится с приближением T к T_f .

Численно исследовав уравнения (23), (24) в среде MATLAB при различных значениях J, I , построим фазовую диаграмму дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах $T/\sqrt{I}, J/\sqrt{I}$ (рис. 4) и зависимость среднего квадрата поляризации $Q^{1/2}$ от температуры в дипольной системе микротрубочки цитоскелета при $J = 0$ (рис. 5).

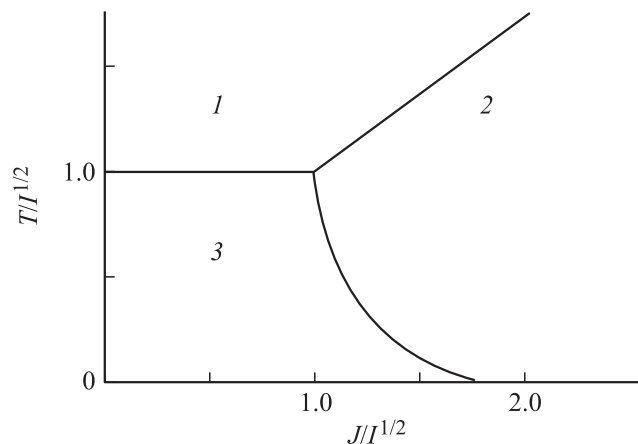


Рис. 4. Фазовая диаграмма дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах $T/\sqrt{I}, J/\sqrt{I}$.

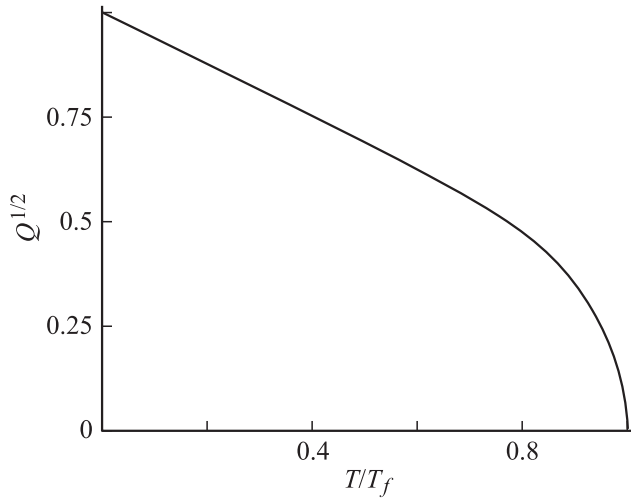


Рис. 5. Зависимость среднего квадрата поляризации $Q^{1/2}$ от температуры в дипольной системе микротрубочки цитоскелета при $J = 0$.

3. Обсуждение результатов и их выводы

1. Развита модель дипольной системы микротрубочки цитоскелета, согласно которой дипольная система микротрубочки цитоскелета представляет собой цепочку дипольных моментов (псевдоспинов), в которой основную роль играют взаимодействие ближайших соседей с антиферромагнитным коэффициентом связи $J_2 < 0$ и взаимодействие следующих за ближайшими соседями с ферромагнитным коэффициентом $J_2 > 0$, причем отношение $J_2/J_1 \approx -1.56$. Следовательно, между парами псевдоспинов происходят случайные взаимодействия разных знаков — ферро- или антиферромагнитные. Именно наличие таких взаимодействий разного знака позволяет предположить, что половина пар псевдоспинов случайным образом взаимодействуют друг с другом ферромагнитно, а другая — антиферромагнитно. При таком взаимодействии в дипольной системе микротрубочки цитоскелета может протекать фазовый переход, связанный с локальным замораживанием псевдоспинов. Этот фазовый переход можно описать с помощью параметров порядка — двух первых моментов случайной функции поляризации: средней поляризации P и среднего квадрата поляризации Q микротрубочки цитоскелета, которые связаны между собой двумя уравнениями молекулярного поля.

2. Построена фазовая диаграмма основного состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах λ, ν (рис. 3). Наличие фрустрированных связей J_{ij} между диполями приводит к возникновению трех областей основного состояния: сегнетоэлектрическое, антисегнетоэлектрическое и дипольное стекло. Для характерных значений параметров микротрубочки цитоскелета (концентрация антиферромагнитных псевдоспиновых связей $\nu^* = 1/3$, отношение констант связи $\lambda^* = J_2/J_1 = -1.56$), основное состояние дипольной

системы микротрубочки цитоскелета является дипольным стеклом. В последнем случае это приводит к расщеплению основного состояния дипольной системы на большое число низколежащих по энергии состояний, в результате чего дипольная система может играть роль распределенной структуры с ассоциативной памятью.

3. Построены фазовая диаграмма дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах $T/\sqrt{I}, J/\sqrt{I}$ (рис. 4) и зависимость среднего квадрата поляризации $Q^{1/2}$ от температуры в дипольной системе микротрубочки цитоскелета (рис. 5). На фазовой диаграмме видны три области — параэлектрическая фаза (1), в которой $P = Q = 0$, сегнетоэлектрическая фаза (2) с $P \neq 0, Q \neq 0$ и фаза дипольного стекла (3), где $P = 0$, а $Q \neq 0$. В микротрубочке цитоскелета дипольное стекло возникает из-за конкуренции ферромагнитного и антиферромагнитного взаимодействия псевдоспинов в низкотемпературной фазе. Характерной особенностью этой фазовой диаграммы является наличие такой области параметров, в которой при понижении температуры при определенной температуре $T_c = J$ появляется спонтанная поляризация, а с дальнейшим понижением температуры она исчезает (рис. 4).

Приведенные результаты позволяют надеяться, что теория молекулярного поля качественно описывает сегнетоэлектрические свойства микротрубочки цитоскелета, по крайней мере, в окрестности трикритической точки.

Приложение

$$J_{ij}^{\nu=1/6} = \begin{pmatrix} 0 & J_2 & J_1 & J_1 & J_1 & J_1 & J_2 \\ J_2 & 0 & J_1 & 0 & 0 & 0 & J_1 \\ J_1 & J_1 & 0 & J_1 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & J_1 & 0 & J_1 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & J_1 & 0 & J_1 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & 0 & J_1 & 0 & J_1 \\ J_2 & J_1 & 0 & 0 & 0 & J_1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_{ij}^{\nu=1/3} = \begin{pmatrix} 0 & J_1 & J_2 & J_1 & J_1 & J_2 & J_1 \\ J_1 & 0 & J_1 & 0 & 0 & 0 & J_2 \\ J_2 & J_1 & 0 & J_1 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & J_1 & 0 & J_2 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & J_2 & 0 & J_1 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1 & 0 & J_1 \\ J_1 & J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_{ij}^{\nu=1/2} = \begin{pmatrix} 0 & J_1 & J_2 & J_1 & J_2 & J_1 & J_2 \\ J_1 & 0 & J_1 & 0 & 0 & 0 & J_2 \\ J_2 & J_1 & 0 & J_2 & 0 & 0 & 0 \\ J_1 & 0 & J_2 & 0 & J_1 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & J_1 & 0 & J_2 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 & J_1 \\ J_2 & J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_{ij}^{\nu=2/3} = \begin{pmatrix} 0 & J_2 & J_1 & J_2 & J_2 & J_1 & J_2 \\ J_2 & 0 & J_2 & 0 & 0 & 0 & J_1 \\ J_1 & J_2 & 0 & J_2 & 0 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & J_2 & 0 & J_1 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & J_1 & 0 & J_2 & 0 \\ J_1 & 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 & J_2 \\ J_2 & J_1 & 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 \end{pmatrix},$$

$$J_{ij}^{\nu=5/6} = \begin{pmatrix} 0 & J_1 & J_2 & J_2 & J_2 & J_2 & J_1 \\ J_1 & 0 & J_2 & 0 & 0 & 0 & J_2 \\ J_2 & J_2 & 0 & J_2 & 0 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & J_2 & 0 & J_2 & 0 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & J_2 & 0 & J_2 & 0 \\ J_2 & 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 & J_2 \\ J_1 & J_2 & 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Список литературы

- [1] Пенроуз Р. Тени разума: в поисках науки о сознании. Ижевск: ИКИ, 2005. 690 с.
- [2] Hameroff S., Penrose R. // J. Consciousness Studies. 1994. J. 1. P. 91–118.
- [3] Благодатский В.И., Гаряев П.П., Маслов М.Ю., Решетняк С.А., Щеглов В.А. // Laser Physics. 1996. Vol. 6. N 4. P. 621–653.
- [4] Tuszynski J.A., Hameroff S.H., Sataric M.V., Trpisova S.T., Nir M.L. // J. Theor. Biol. 1995. Vol. 174. P. 371–380.
- [5] Sataric M.V., Trpisova S.T., Zakula R.B. // Phys. Rev. E. 1993. Vol. 48. N 1. P. 589–597.
- [6] Broun J.A., Tuszynski J.A. // Ferroelectrics. 1999. Vol. 220. P. 141–155.
- [7] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 323 с.
- [8] Слядников Е.Е. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 8. С. 52–59.
- [9] Слядников Е.Е. // ЖТФ. 2007. Т. 32. Вып. 7. С. 77–86.
- [10] Слядников Е.Е. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 7. С. 1–12.
- [11] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 620 с.
- [12] Edwards S.F., Anderson P.W. // J. Phys. F. 1975. Vol. 5. P. 965–974.
- [13] Глурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высш. образование, 2006. 479 с.