

Физические основы, модели представления и распознавания образов в микротрубочке цитоскелета нейрона

© Е.Е. Слядников

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

(Поступило в Редакцию 20 апреля 2010 г. В окончательной редакции 16 сентября 2010 г.)

Сформулированы физические основы, построены микроскопическая модель и гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета нейрона. Развита микроскопическая модель дипольной системы микротрубочки на область связей между диполями, когда связи не являются полностью неупорядоченными, когда на них наложены ограничения (связи обладают памятью). Получены уравнения молекулярного поля для случайной функции поляризации и ее двух первых моментов: средней поляризации и среднего квадрата поляризации. Уравнение эволюции для случайного параметра порядка в окрестности критической точки имеет релаксационный характер и описывает процесс распознавания образов. Показано, что процесс фазового перехода осуществляет нелинейное преобразование (проектирование) одного (узельного) пространства характерных признаков образа с большей размерностью в другое пространство характерных признаков (параметров порядка) с существенно меньшей размерностью, сопровождающееся колоссальным сокращением обработки данных.

Введение

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

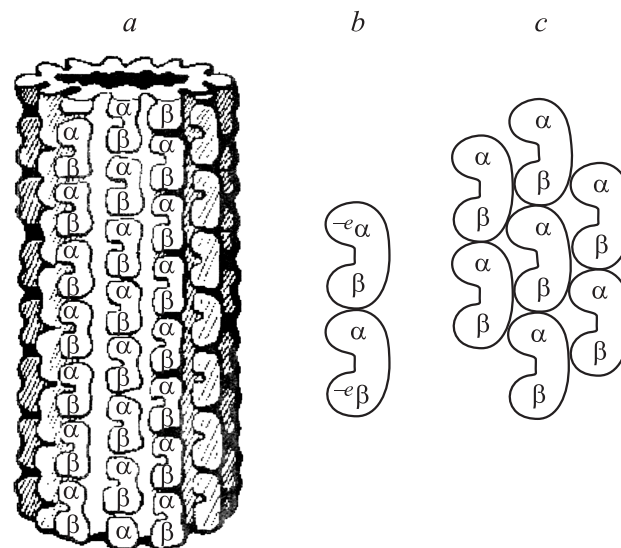


Рис. 1. Схемы: *a* — спиральной структуры микротрубочки цитоскелета; *b* — молекулы тубулина в различных конформациях с противоположными дипольными моментами; *c* — ближайшего окружения молекулы тубулина [1,2].

системы взаимодействующих диполей основывалась на приближении эффективного поля и в континуальном приближении привела к решению в виде сегнетоэлектрической доменной стенки. 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 [5].

Однако микротрубочки цитоскелета являются существенно одномерными наноструктурами, которые представляют собой полимерные цепочки, свернутые в спирали [1,2]. Известно, что при исследовании фазовых переходов в низкоразмерных системах необходимо учитывать флуктуации [6], особенно вблизи точек фазового перехода второго рода, где они оказываются коррелированными на очень больших расстояниях. Это не позволяет применять здесь обычные методы расщепления корреляционных функций, поскольку методы эти основываются на пренебрежении вкладом объемов, в которых существенны корреляции. 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 низкоммерные модели информационных белковых наноструктур, учитывающие флуктуации поляризации, двухъямный характер потенциала в молекуле тубулина и возбуждение конформационных степеней свободы [8]. Причем эти модели должны обладать такими физическими свойствами, из которых возникает способность микротрубочки к интеллектуальной обработке информации, например функция распознавания образов, которая является фундаментальным свойством живой природы от клеточного уровня до высших психических функций человека.

Недавно была 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. Построена фазовая диаграмма сегнетоэлектрического состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета при $T = 0$. Обнаружено, что наличие фрустрированных связей J_{ij} между диполями является важнейшей особенностью дипольной системы микротрубочки цитоскелета. Фазовая диаграмма сегнетоэлектрического состояния микротрубочки цитоскелета показывает, что имеются три области сегнетоэлектрического состояния: сегнетоэлектрическая, антисегнетоэлектрическая и дипольное стекло. Для характерных значений параметров микротрубочки цитоскелета (концентрация антиферромагнитных псевдоспиновых связей $\nu = 1/3$, отношение констант связи $\lambda = J_2/J_1 < 0$) основное состояние дипольной системы микротрубочки цитоскеле-

та, по-видимому, является дипольным стеклом. В данном 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. Затем была исследована взаимосвязь физических и информационных характеристик в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета [10]. Рассчитаны критическая температура, удельная свободная энергия, удельная средняя энергия, удельная теплоемкость, информация, приращение информации, эффективность дипольной системы как функции температуры. В работе [11] эта модель с полностью неупорядоченными связями была продолжена на случай конечных температур, получены самосогласованные уравнения для параметров порядка, построена температурная фазовая диаграмма.

Целью настоящей работы является формулировка физических основ, построение микроскопического гамильтониана, развитие микроскопической модели микротрубочки цитоскелета [9–11] на область связей между диполями, когда связи не являются полностью неупорядоченными, когда на них наложены ограничения (связи обладают памятью), и вывод уравнения эволюции для случайного параметра порядка, которое описывает процессы представления и распознавания образов.

1. Микроскопическая модель и гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета

Проблема построения физических основ модели подсистемы микротрубочки цитоскелета, ответственной за ее уникальные сегнетоэлектрические свойства, является сложной, междисциплинарной и требует для своего решения привлечения представлений и формализмов из резонансной квантовой оптики [12], теории межмолекулярных взаимодействий [13], теории поля [14], теории сегнетоэлектрических переходов [8–11].

1. 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 электрических полей. 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 субмиллиметрового диапазона длин волн, в них обнаружены солитонные воз-

буждения, вызванные когерентным электромагнитным излучением [3].

Для объяснения физики этих явлений используем представления о взаимодействии квазимонохроматического электрического поля, частота которого близка к частоте перехода, связывающего два самых низких энергетических уровня молекулы тубулина квазирезонансным переходом [8,12].

Интересующие нас электродипольные переходы в изолированной молекуле тубулина, взаимодействующей с электрическим полем, можно описать следующим гамильтонианом:

$$\hat{H} = \hat{H}_a - (\hat{\mathbf{d}}\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_0)). \quad (1)$$

Здесь $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор дипольного момента молекулы тубулина (операторы будем обозначать „шляпкой“), а $\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_0)$ — оператор электрического поля в точке \mathbf{r}_0 нахождения диполя. Пусть оператор Гамильтона \hat{H}_a изолированной молекулы тубулина обладает некоторым дискретным спектром $E_+, E_-, E_3 \dots$. Соответствующие двум первым энергиям собственные функции оператора H_a обозначим через $|+\rangle$ (симметричная) и $|-\rangle$ (антисимметричная).

Нас будут интересовать только переходы между состояниями $|+\rangle$ и $|-\rangle$, поэтому достаточно рассматривать двумерное гильбертово пространство, натянутое на эти векторы. Укажем матричные элементы соответствующих операторов:

$$\begin{aligned} \langle +|\hat{H}_a|+\rangle &= E_+, & \langle -|\hat{H}_a|-\rangle &= E_-, \\ \langle +|\hat{H}_a|-\rangle &= 0, & \langle -|\hat{H}_a|+\rangle &= 0, \\ \langle +|\hat{\mathbf{d}}_a|+\rangle &= 0, & \langle -|\hat{\mathbf{d}}_a|-\rangle &= 0, \\ \langle +|\hat{\mathbf{d}}_a|-\rangle &= \mathbf{d}_{+,-}, & \langle -|\hat{\mathbf{d}}_a|+\rangle &= (\mathbf{d}_{+,-})^*. \end{aligned} \quad (2)$$

Оператор H_a не имеет недиагональных элементов, так как состояния $|+\rangle$ и $|-\rangle$ суть его собственные функции. С другой стороны, у оператора $\hat{\mathbf{d}}$ диагональные элементы равны нулю, поскольку этот оператор по определению нечетен, а состояния $|+\rangle$ и $|-\rangle$ считаются имеющими определенную четность. Наличие таких свойств у оператора дипольного момента означает, что изолированная молекула тубулина неполярна.

Для примера найдем матричные элементы $\mathbf{d}_{+,-}$ в простом частном случае. Выберем в качестве $|+\rangle$ и $|-\rangle$ состояния (211) и (100) атома водорода (в скобках указаны тройки квантовых чисел (n, l, m_l)). Тогда в координатном представлении матричный элемент $\mathbf{d}_{+,-}$ имеет вид

$$\mathbf{d}_{+,-} = \int \Psi_{211}^*(\mathbf{r})e\mathbf{r}\Psi_{100}(\mathbf{r})d\mathbf{r}. \quad (4)$$

Его можно представить как произведение радиального и углового интегралов. Если использовать известные

функции состояний $\Psi_{211}(\mathbf{r})$ и $\Psi_{100}(\mathbf{r})$ для водорода, то указанные радиальный и угловой интегралы примут вид

$$\begin{aligned} &\int (1/2a_0^2)^{3/2}e^{-r/2a_0}[er](2r/a_0\sqrt{3})e^{-e/a_0}r^2dr, \\ &\int Y_{11}^*(\theta, \varphi)[\mathbf{x}\sin(\theta)\cos(\varphi) + \mathbf{y}\sin(\theta)\sin(\theta) \\ &\quad + \mathbf{z}\cos(\theta)]Y_{00}(\theta, \varphi)d\theta d\varphi. \end{aligned}$$

Оба интеграла легко вычисляются (a_0 — радиус Бора, e — заряд электрона) и дают при перемножении

$$\mathbf{d}_{+,-} = -(2^7/3^5)ea_0(\mathbf{x} - i\mathbf{y}), \quad (5)$$

где \mathbf{x} и \mathbf{y} — единичные векторы, ортогональные выделенной оси квантования атома водорода \mathbf{z} и друг другу. В молекуле тубулина дипольные матричные элементы также являются комплексными векторами

$$\mathbf{d}_{+,-} = \mathbf{d}_R + i\mathbf{d}_I, \quad \mathbf{d}_{-,+} = \mathbf{d}_R - i\mathbf{d}_I, \quad (6)$$

где \mathbf{d}_R и \mathbf{d}_I — некоторые вещественные векторы. Для приведенного выше примера атома водорода

$$\mathbf{d}_R = -(2^7/3^5)ea_0\mathbf{x}, \quad \mathbf{d}_I = (2^7/3^5)ea_0\mathbf{y}.$$

Поэтому эрмитов оператор дипольного момента $\hat{\mathbf{d}}$ молекулы тубулина можно всегда представить как недиагональную матрицу в двумерном пространстве, обладающую матричными элементами,

$$\hat{\mathbf{d}} = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \mathbf{d}_R + i\mathbf{d}_I \\ \mathbf{d}_R - i\mathbf{d}_I & \dots & 0 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Здесь целесообразно использовать известные двумерные матрицы Паули $\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3$:

$$\begin{aligned} \hat{S}_1 &= 1/2 \begin{bmatrix} 0 & \dots & 1 \\ 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}, & \hat{S}_2 &= 1/2 \begin{bmatrix} 0 & \dots & -i \\ i & \dots & 0 \end{bmatrix}, \\ \hat{S}_3 &= 1/2 \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & -1 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (8)$$

которые удовлетворяют простым коммутационным соотношениям $[\hat{S}_1\hat{S}_2] = i\hat{S}_3$. Тогда в двумерном пространстве оператор дипольного момента молекулы тубулина запишется как

$$\hat{\mathbf{d}} = \mathbf{d}_R\hat{S}_1 - \mathbf{d}_I\hat{S}_2, \quad (9)$$

а оператор \hat{H}_a как

$$\begin{aligned} \hat{H}_a &= 1/2(E_+ + E_-)\hat{I} + (E_+ - E_-)\hat{S}_3 \\ &= 1/2(E_+ + E_-)\hat{I} - \hbar\omega_0\hat{S}_3, \end{aligned} \quad (10)$$

где \hat{I} — единичный 2×2 оператор, а величина $\omega_0 = (E_- - E_+)/\hbar$ — есть частота квантового перехода молекулы тубулина, связывающего уровни энергии E_- и E_+ .

Таким образом, формулируемая модель подсистемы микротрубочки цитоскелета, ответственной за ее сегнетоэлектрические свойства, должна удовлетворять следующим критериям.

При описании изолированной молекулы тубулина необходимо принять во внимание два самых низких энергетических уровня молекулы тубулина, связанных квазирезонансным переходом, и оператор дипольного момента молекулы тубулина с такими свойствами, что изолированная молекула тубулина должна быть неполярно.

2. Известно, что микротрубочка цитоскелета представляет собой белковый полимер, состоящий из субъединиц, называемых тубулинами. Каждая молекула тубулина, в свою очередь, представляет собой димер, т.е. состоит из двух соединенных тонкой перемычкой частей, называемых α -тубулин и β -тубулин (рис. 1). Эти пары глобулярных белков, напоминающих по форме орех арахиса, связаны между собой в полимерную цепочку, свернутую в спираль-микротрубочку (рис. 1). Обычно на каждую микротрубочку приходится по 13 рядов димеров тубулина. Размер димера составляет приблизительно $8 \times 4 \times 4$ nm, а его молекулярный вес около $110 \cdot 10^3$ a.m.u. [1,2]. Связь между молекулами тубулина осуществляется слабыми межмолекулярными (ван-дер-ваальсовыми) силами. Характерная энергия этих связей имеет порядок несколько сотых долей электрон-вольта на молекулу.

Межмолекулярные силы обусловлены электромагнитными взаимодействиями между составляющими молекулы тубулина электронами и ядрами. При построении последовательной модели межмолекулярных сил в микротрубочке цитоскелета необходимо учитывать квантовый характер движения электронов и ядер молекул тубулина. Следовательно, задача сводится к решению уравнения Шредингера для системы взаимодействующих молекул и может быть решена только приближенно. Существенное упрощение и наглядность достигаются здесь вследствие возможного разделения электронного и ядерного движений и введения концепции межмолекулярного потенциала [13].

Рассмотрим эту проблему на примере двух взаимодействующих молекул тубулина. Обозначим через \mathbf{R}_a , \mathbf{R}_b радиусы-векторы положительно заряженных ядер a и b , а через \mathbf{r}_{ai} , \mathbf{r}_{bi} радиусы-векторы электронов. Поскольку электроны вследствие малой массы, движутся значительно быстрее ядер, ядра в нулевом приближении можно считать покоящимися. Гамильтониан системы из двух молекул тубулина в приближении замороженных ядер имеет вид

$$H = - (1/2m) \sum_i \hbar^2 \nabla_i^2 - \sum_i (Z_a e / r_{ai} + Z_b e / r_{bi}) + \sum_{i \neq j} e^2 / r_{ij} + Z_a Z_b / R, \quad (11)$$

где r_{ai} — расстояние от i -го электрона до ядра a , r_{ij} — расстояние между электронами i и j , Z_a — заряд ядра a ,

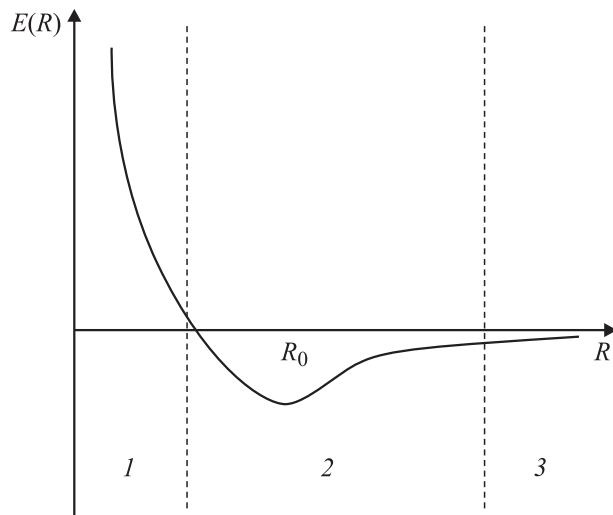


Рис. 2. Типичный вид межмолекулярного потенциала, усредненного по ориентациям молекул, в зависимости от расстояния между центрами тяжести молекул R .

m — масса электрона, R — расстояние между центрами тяжести молекул.

Движение ядер молекул тубулина можно рассматривать происходящим в адиабатическом потенциале межмолекулярного взаимодействия (межмолекулярном потенциале). На рис. 2 изображен вид межмолекулярного потенциала, усредненного по ориентациям молекул, в зависимости от расстояния между центрами тяжести молекул R . Выделены три области межмолекулярных расстояний: 1 — область близких расстояний $R < 2 \cdot 10^{-10}$ m, на которых потенциал имеет отталкивающий характер, а электронный обмен в связи с перекрыванием электронных оболочек весьма существен; 2 — область промежуточных расстояний с ван-дер-ваальсовым минимумом $R < 8 \cdot 10^{-10}$ m, положение которого определяется балансом сил отталкивания и притяжения; 3 — область далеких межмолекулярных расстояний, где электронным обменом можно пренебречь, а межмолекулярные силы имеют характер притяжения.

Для каждой области расстояний характерны свои расчетные приближения, позволяющие выделить различные типы взаимодействий и оценить их вклад в межмолекулярный потенциал. В микротрубочке цитоскелета минимальное расстояние между центрами тяжести двух молекул равно $R = 6 \cdot 10^{-9}$ m, здесь межмолекулярные взаимодействия малы, а обмен электронов пренебрежимо мал, поэтому справедлива стандартная теория возмущений Рэлея–Шредингера. Первый порядок теории возмущений дает энергию непосредственного электростатического взаимодействия молекул. Последующие порядки теории возмущений дают поляризационную энергию, являющуюся следствием поляризации одной молекулой поля электронного облака другой молекулы. Для одинаковых молекул, одна из которых находится в основном, другая — в возбужденном состоянии, возникает резонансное взаимодействие, если энергия пе-

рехода в возбужденное состояние в молекулах одинакова (молекулы находятся в резонансе) [15].

Приведенная классификация межмолекулярных взаимодействий в значительной степени условна, поскольку она основывается на рассмотрении проблемы с помощью приближенных методов расчета. Однако при представлении энергии взаимодействия двух молекул тубулина в виде суммы различных членов она позволяет выделить члены, дающие наибольший вклад в данной области расстояний. При этом каждый из членов обладает конкретным физическим смыслом. Последнее позволяет связать его с определенными физическими характеристиками молекул (поляризуемостью, дипольным моментом и т.д.). Это дает возможность проводить качественную оценку величины межмолекулярного взаимодействия для молекул тубулина, не прибегая к сложному количественному расчету.

При изучении свойств межмолекулярного взаимодействия микротрубочки цитоскелета, в которой энергия внутримолекулярных связей много больше энергии межмолекулярных связей, мы будем интересоваться электронными возбужденными состояниями молекул тубулина. 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 может занимать одно из двух возможных положений. На способность молекул димера переключаться из одной конформации в другую влияют ван-дер-ваальсовы силы притяжения соседних молекул. Для того чтобы произошло „переключение“ из одной конформации в другую, достаточно, чтобы один электрон „перескочил с места на место“. Будем считать, что самые низкие электронные возбуждения молекулы тубулина связаны с переходами этого электрона в центре димера, поэтому перекрыванием волновых функций „центральных“ электронов соседних молекул можно пренебречь.

Поскольку изолированная молекула тубулина нейтральна (суммарный заряд молекулы равен нулю) и неполярна (дипольный момент молекулы равен нулю), а межмолекулярные взаимодействия в микротрубочке цитоскелета малы (межмолекулярный обмен электронов пренебрежимо мал), то самый большой вклад в энергию межмолекулярного электростатического взаимодействия дают резонансные взаимодействия, вызывающие самые низкие электронные возбуждения молекулы тубулина. Такие взаимодействия возникают между молекулами тубулина, находящимися одна в основном, другая в возбужденном состоянии, если энергия перехода в возбужденное состояние в молекулах одинакова (молекулы находятся в резонансе). Подобная ситуация всегда имеет место при взаимодействии одинаковых молекул [15].

Пусть изолированная молекула a может находиться в основном состоянии (с энергией ε_n , волновой функцией ψ_0^a) и только в одном возбужденном состоянии (с энергией ε_n , волновой функцией ψ_n^a). Состояние

системы из двух таких молекул a и b при отсутствии взаимодействия описывается волновой функцией $\psi_a^a\psi_b^b$, где индексы α, β могут принимать значения 0, n .

В основном и возбужденном состояниях молекулы при энергии возбуждения, меньшей энергии ионизации, волновые функции электронов соседних молекул перекрываются слабо. Нас будут интересовать только малые электронные возбуждения, поэтому будем пренебрегать перекрыванием волновых функций электронов соседних молекул. Основное состояние системы из двух изолированных молекул описывается волновой функцией $\psi_0^a\psi_0^b$ и имеет энергию $\varepsilon_0 + \varepsilon_0$. Возбужденное состояние системы, соответствующее возбуждению одной молекулы $\psi_0^a\psi_n^b$, имеет энергию $\varepsilon_0 + \varepsilon_n$. Это состояние двукратно вырождено, так как любая из молекул может находиться в возбужденном состоянии ψ_n^a . Возбужденное состояние системы, соответствующее возбуждению двух молекул $\psi_n^a\psi_n^b$, имеет энергию $\varepsilon_n + \varepsilon_n$. Произвольное резонансное взаимодействие V вызывает переходы между всеми состояниями $\psi_0^a\psi_0^b$, $\psi_0^a\psi_n^b$, $\psi_n^a\psi_0^b$, $\psi_n^a\psi_n^b$, поэтому энергия резонансного взаимодействия двух молекул имеет вид

$$V_{\text{res}}^{ab} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \psi_\alpha^a \psi_\beta^b | V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ab} | \psi_\gamma^a \psi_\delta^b \rangle. \quad (12)$$

Энергия резонансного взаимодействия, учитывающая переходы, соответствующие возбуждению только одной молекулы, равна

$$V_{\text{res}}^{ab} = \langle \psi_n^a \psi_0^b | V | \psi_n^a \psi_0^b \rangle + \langle \psi_0^a \psi_n^b | V | \psi_0^a \psi_n^b \rangle + \langle \psi_n^a \psi_n^b | V | \psi_0^a \psi_n^b \rangle + \langle \psi_n^a \psi_0^b | V | \psi_0^a \psi_n^b \rangle. \quad (13)$$

Первый член в (13) представляет энергию электростатического взаимодействия молекулы a , находящейся в n -м возбужденном состоянии, с молекулой b , находящейся в основном состоянии. Второй член представляет собой взаимодействие переходных электронных плотностей молекул a и b , и обусловлен переходом возбуждения с молекулы a на молекулу b . Его принято называть матричным элементом передачи возбуждения или резонансным интегралом. Их можно выразить через плотности электронов. Для этого введем функции распределения электронной плотности в молекулах a и b :

$$\rho_{nn}^a(i) = N_a \int |\psi_n^a(1 \dots i \dots N_a)|^2 dv_i, \quad (14)$$

$$\rho_{0n}^a(i) = N_a \int \psi_0^{a*}(1 \dots i \dots N_a) \psi_n^a(1 \dots i \dots N_a) dv_i, \quad (15)$$

где dv_i — элемент объема конфигурационного пространства всех электронов молекулы a кроме i . Интегрирование включает суммирование по всем спиновым переменным. Множитель перед интегралом обеспечивает сохранение электрического заряда, так как интеграл по конфигурационному пространству оставшегося i -го

электрона равен числу электронов молекулы a . Подставляя (14), (15) в (13), получим

$$V_{nm,00} = \int \rho_{nm}^a(i) \rho_{00}^b(j) V(i, j) dv_i dv_j, \quad (16)$$

$$V_{0n,n0} = \int \rho_{0n}^a(i) \rho_{n0}^b(j) V(i, j) dv_i dv_j. \quad (17)$$

На достаточно больших расстояниях между центрами тяжести взаимодействующих молекул тубулина $R = 6 \cdot 10^{-9}$ м зарядовые облака практически не перекрываются, и энергия электростатического взаимодействия может быть разложена в мультипольный ряд по степеням $1/R$ [14]. Такое разложение основано на введении мультипольных моментов распределения зарядов. Потенциал поля $\varphi(\mathbf{R})$, создаваемого системой зарядов на расстояниях, больших по сравнению с размерами системы, может быть представлен в виде ряда по мультипольным моментам. Первые два члена такого разложения в декартовых координатах в точке, характеризуемой радиусом-вектором \mathbf{R} , имеют вид

$$\varphi(\mathbf{R}) = \sum_i e_i |\mathbf{R} - \mathbf{r}_i| = q/R + (\mathbf{d}\mathbf{R})/R^3 + \dots, \quad (18)$$

$$q = \sum_i e_i, \quad \mathbf{d} = \sum_i e_i \mathbf{r}_i. \quad (19)$$

Выражение (18) является рядом Тейлора по степеням \mathbf{r}_i/\mathbf{R} , где сумма по i есть сумма по всем зарядам системы e_i , \mathbf{r}_i — радиус-вектор заряда i , q — суммарный заряд системы зарядов, \mathbf{d} — вектор дипольного момента системы зарядов.

Первый член в (18) отвечает приближению, когда весь заряд считается стянутым в начало координат, т.е. система зарядов заменена одним суммарным точечным зарядом. Второй член определяется дипольным моментом системы и убывает как $1/R^3$. Он пропорционален косинусу угла между \mathbf{d} и \mathbf{R} , т.е. потенциал максимален в направлении вектора дипольного момента. Если система зарядов нейтральна, то член с дипольным моментом является определяющим. Этот случай распространен, так как изолированные атомы и молекулы нейтральны.

Простейшей моделью нейтральной системы, обладающей дипольным моментом, является система из двух равных и противоположных по знаку зарядов. Ее дипольный момент равен

$$\mathbf{d} = e\mathbf{r}_+ - e\mathbf{r}_- = e\Delta\mathbf{r}, \quad (20)$$

где $\Delta\mathbf{r}$ — вектор, равный расстоянию между зарядами и направленный от отрицательного заряда к положительному. Так же, естественно, направлен и дипольный момент. В нейтральных системах дипольный момент является характеристикой распределения заряда.

Энергию электростатического взаимодействия двух молекул тубулина можно рассматривать как потенциальную энергию системы зарядов одной молекулы a во

внешнем поле, создаваемом системой зарядов другой молекулы b

$$V_{ab} = \sum_i e_i \varphi_b(\mathbf{r}_i), \quad (21)$$

где $\varphi_b(\mathbf{r}_i)$ — потенциал, создаваемый системой зарядов другой молекулы b , в точках расположения зарядов молекулы a . Если системы зарядов молекул находятся далеко друг от друга, то потенциал поля $\varphi_b(\mathbf{r}_i)$ слабо меняется в области пространства, занятого молекулой a . В этом случае его удобно разложить в ряд Тейлора по степеням \mathbf{r}_i , выбрав точку разложения 0 внутри системы зарядов молекулы a :

$$\varphi_b(\mathbf{r}_i) = \varphi_b(0) + \sum_\alpha (\partial\varphi_b(\mathbf{r}_i)/\partial x_{i\alpha})_0 x_{i\alpha} + \dots \quad (22)$$

Подставив (22) в (21), получим

$$\begin{aligned} V_{ab} &= \varphi_b(0) \sum_{i \in 0} e_i + \sum_\alpha (\partial\varphi_b(\mathbf{r}_i)/\partial x_{i\alpha})_0 \sum_{i \in 0} e_i x_{i\alpha} + \dots \\ &= \varphi_b(0) q_a + \mathbf{d}_a \nabla \varphi_b(0) + \dots, \end{aligned} \quad (23)$$

где явно выделен дипольный момент молекулы a . Далее подставим в (23) мультипольное разложение потенциала $\varphi_b(0)$ (18). Тогда первый член в (23) даст монополь-мультипольные взаимодействия, второй диполь-мультипольные и т.д. Для электрически нейтральных молекул первым членом в энергии (23) будет $\mathbf{d}_a \nabla (\mathbf{d}_b \mathbf{R}/R^3)$. Действие оператора набла на второй член (23) приводит его к виду

$$V_{ab} = (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3) [\mathbf{d}_a \mathbf{d}_b - 3(\mathbf{d}_a \mathbf{R})(\mathbf{d}_b \mathbf{R})/R^2] = \dots, \quad (24)$$

где $\epsilon \approx 2$ — диэлектрическая проницаемость среды [16], $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м — диэлектрическая проницаемость вакуума, R — расстояние между центрами тяжести молекул.

Мультипольное разложение справедливо на больших расстояниях между взаимодействующими системами. Необходимым условием его справедливости является отсутствие перекрывания зарядовых распределений. Между тем вследствие квантово-механической „размазанности“ зарядов такое перекрывание всегда имеет место, но для взаимодействующих молекул тубулина оно пренебрежимо мало. Поскольку перекрывание экспоненциально убывает с расстоянием, то запись энергии электростатического взаимодействия в виде мультипольного ряда означает пренебрежение экспоненциально убывающими членами.

Если ввести сферический угол Θ — угол между направлениями оси диполя (орт \mathbf{x}) и нормированного на единицу вектора $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$, соединяющего центры тяжести молекул, получим энергию электростатического взаимодействия двух электрических диполей \mathbf{d}_a и \mathbf{d}_b , находящихся на расстоянии R друг от друга, которая зависит от взаимной ориентации диполей:

$$\begin{aligned} V_{ab} &= (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3) [\mathbf{d}_a \mathbf{d}_b - 3(\mathbf{d}_a \mathbf{n})(\mathbf{d}_b \mathbf{n})] \\ &= -(1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3) [3 \cos^2 \Theta - 1] d_{ax} d_{bx}. \end{aligned} \quad (25)$$

Если изолированная молекула нейтральна, но полярна (матричные элементы дипольного момента молекулы тубулина $\langle +|\hat{\mathbf{d}}|+ \rangle$, $\langle -|\hat{\mathbf{d}}|- \rangle$, $\langle +|\hat{\mathbf{d}}|- \rangle$, $\langle -|\hat{\mathbf{d}}|+ \rangle$ отличны от нуля), первым исчезающим членом ряда (23) будет диполь-дипольный, поэтому вклад в энергию электростатического взаимодействия, убывающий с расстоянием по закону $1/R^3$, будет вносить как прямое, так и резонансное кулоновское взаимодействие. Однако, мы считаем, что изолированная молекула тубулина нейтральна и неполярна (матричные элементы дипольного момента молекулы тубулина $\langle +|\hat{\mathbf{d}}|+ \rangle$, $\langle -|\hat{\mathbf{d}}|- \rangle$ равны нулю, а $\langle +|\hat{\mathbf{d}}|- \rangle$, $\langle -|\hat{\mathbf{d}}|+ \rangle$ отличны от нуля), поэтому для неполярных молекул тубулина имеет место только резонансное диполь-дипольное взаимодействие, убывающее с расстоянием $1/R^3$. Это резонансное взаимодействие более дальнотствующее, чем поляризационное, убывающее как $1/R^6$, и в зависимости от четности стационарного состояния энергия резонансного взаимодействия может быть как отрицательной, так и положительной.

Таким образом, формулируемая модель подсистемы микротрубочки цитоскелета, ответственной за ее сегнетоэлектрические свойства, должна удовлетворять второму критерию: при построении последовательной модели межмолекулярных сил в микротрубочке цитоскелета необходимо принять во внимание нейтральность и неполярность изолированных молекул тубулина, отсутствие обменного взаимодействия, поэтому больший вклад в энергию электростатического взаимодействия будет вносить резонансное диполь-дипольное взаимодействие, более дальнотствующее, чем поляризационное.

3. Известно, что димер тубулина может существовать, по крайней мере, в двух различных геометрических конфигурациях, называемых конформациями [1,2]. Конформации эти, по всей видимости, обусловлены тем, что в центре димера (в его „безводной части“) имеется электрон, который может занимать одно из двух возможных положений. На способность молекул димера переключаться из одной конформации в другую влияют ван-дер-ваальсовы силы притяжения соседних молекул. Для того чтобы произошло „переключение“ из одной конформации в другую, достаточно, чтобы один электрон „перескочил с места на место“.

Проанализировав полученные выше экспериментальные и теоретические результаты, выводы [8–11], учитывая критерии, приступим к построению модели подсистемы микротрубочки цитоскелета, описывающей уникальные сегнетоэлектрические свойства микротрубочки цитоскелета. Большинство сегнетоэлектрических явлений можно объяснить взаимодействием связанных электрических зарядов (электрон-ионных пар) между собой и с электромагнитным полем [12]. Примем, что эти заряды содержатся во всех электрически нейтральных неполярных молекулах тубулина микротрубочки цитоскелета и осциллируют с малыми амплитудами около определенных положений равновесия в центре молекулы. Иначе говоря, активная в смысле сегнетоэлектрического перехода электрон-ионная пара в молекуле тубулина ведет

себя как простой осциллятор, который взаимодействует с электрон-ионной парой в другой молекуле тубулина посредством своего дипольного момента. Движение ансамбля таких активных в смысле сегнетоэлектрического перехода диполей (дипольных осцилляторов) можно описать гамильтонианом

$$H = T + V,$$

где T — кинетическая энергия, V — потенциальная энергия диполей в микротрубочке цитоскелета.

Сегнетоэлектрический переход — это процесс превращения из высокотемпературной параэлектрической фазы со средним дипольным моментом, равным нулю, в низкотемпературную ферроэлектрическую фазу со средним дипольным моментом, отличным от нуля. Поскольку дипольный момент связанной электрон-ионной пары есть произведение заряда электрона на его смещение, то в предлагаемой модели этот процесс связан с изменением равновесного положения электрона, активного в смысле сегнетоэлектрического перехода. В высокотемпературной фазе этот электрон полностью делокализован в одночастичном потенциале молекулы тубулина (равновероятно может занимать одно из двух возможных положений), т.е. вероятность обнаружить молекулу тубулина в состояниях α -тубулин и β -тубулин одинакова. Ниже критической температуры (в низкотемпературной фазе) равновесное положение электрона смещается относительно его равновесного положения в высокотемпературной фазе. Пусть в высокотемпературной фазе равновесное положение электрона, которое совпадает с положением единичного положительного заряда, определяется вектором \mathbf{X}_i , где i — номер молекулы тубулина. Смещения электронов из равновесного положения обозначим вектором \mathbf{u}_i , так что положение электронов в любой момент времени \mathbf{x}_i имеет вид

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i. \quad (26)$$

Считая положительные заряды неподвижными, запишем кинетическую энергию дипольных моментов в виде

$$T = (1/2m) \sum_i \mathbf{p}_i^2 = (1/2m) \sum_i \hbar^2 \nabla_i^2, \quad (27)$$

где $\mathbf{p}_i = \hbar \nabla_i$ — импульс электрона в i -й молекуле тубулина, m — масса электрона, \hbar — постоянная Планка, суммирование по i идет по всем молекулам тубулина микротрубочки цитоскелета.

Потенциальную энергию дипольных моментов запишем в виде суммы одночастичного и двухчастичного потенциалов [10]

$$V = \sum_i V(\mathbf{u}_i) - (1/2) \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j, \quad (28)$$

где \mathbf{u}_i — смещение электрона в i -й молекуле тубулина, J_{ij} — элементы матрицы коэффициентов связи смещений электронов (дипольных моментов) i и j молекул тубулина, в простейшем случае ближайших соседей.

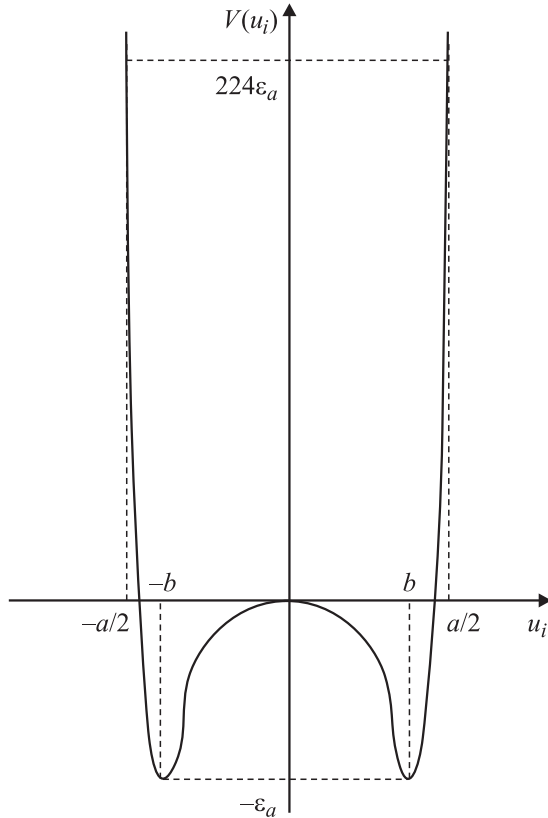


Рис. 3. Качественная зависимость одночастичной потенциальной энергии электрона V в молекуле тубулина от смещения u_i .

Равновесные положения электрона в высокотемпературной фазе \mathbf{X}_i (относительно которых определяются смещения \mathbf{u}_i) образуют N узлов одномерной цепочки (спирали) с периодом a . Предполагается, что дипольные моменты взаимодействуют только со своими ближайшими соседями посредством своих дипольных моментов (второй член (28)) и находятся в двухъямном одночастичном потенциале $V(\mathbf{u}_i)$, качественная зависимость которого от смещения \mathbf{u}_i изображена на рис. 3. Разумно предположить, что этот потенциал имеет характерные значения для высоты барьера потенциала $\varepsilon_a \approx 4.3 \cdot 10^{-21}$ J (порядка тепловой энергии электрона при температуре человеческого тела), а для высоты боковой стенки потенциала $224\varepsilon_a \approx 9.6 \cdot 10^{-19}$ J (порядка энергии выхода электрона из молекулы тубулина).

Можно представить себе, что этот двухъямный потенциал обусловлен неактивной при сегнетоэлектрическом переходе частью структуры молекулы тубулина. Для простоты можно предположить, что потенциал имеет одноосную анизотропию, которая эффективно ограничивает смещения электронов одним направлением, например, по оси x . Тогда импульсы \mathbf{p}_i и смещения \mathbf{u}_i являются скалярными величинами, а одночастичная потенциальная энергия $\sum_i V(\mathbf{u}_i)$ — периодической функцией с периодом a .

Для получения количественной зависимости $V(u_i)$ представим двухъямный потенциал электрона в молеку-

ле тубулина в модельном виде [10]

$$V(u_i) = \varepsilon_a \{ \exp[-2d^{-1}(u_i + b)] - 2 \exp[-d^{-1}(u_i + b)] \} + \varepsilon_a \{ \exp[2d^{-1}(u_i - b)] - 2 \exp[d^{-1}(u_i - b)] \} \quad \text{для } -a/2 \leq u_i \leq a/2. \quad (29)$$

Здесь a — период цепочки молекул тубулина в микротрубочке цитоскелета по оси x , d — половина ширины как левой, так и правой ямы, b — половина расстояния между левой и правой ямами двухъямного потенциала, ε_a — глубина левой и правой ям двухъямного потенциала. Выполнив модельные расчеты потенциала (29) в среде MATLAB при различных значениях b, d , получим, что потенциал $\varepsilon_a^{-1}V(2u_i/a)$ (29) в безразмерных координатах $(2u_i/a)$ соответствует качественному виду рис. 3 при $b = 0.25a$, $d = 0.09a$.

Вычислим энергию основного состояния E_0 электрона с массой m в потенциальной яме, изображенной на рис. 3, где для простоты рассмотрим движение электрона только в левой яме, сместив ее в начало координат. В этом случае уравнение Шредингера для электрона будет иметь вид

$$d^2\psi/dx^2 + 2m\hbar^2(E - \varepsilon_a \{ \exp[-2d^{-1}x] - 2 \exp[-d^{-1}x] \})\psi = 0. \quad (30)$$

Согласно [17], энергия основного состояния для уравнения (30) равна

$$-E_0 = \varepsilon_a \{ 1 - (d^{-1}\hbar)/(2\sqrt{2m\varepsilon_a}) \}^2. \quad (31)$$

Причем, чтобы E_0 принадлежала к дискретному спектру, необходимо, чтобы потенциальная яма была достаточно глубока, т.е. выполнялось условие

$$\lambda = (d^{-1}\hbar)/(2\sqrt{2m\varepsilon_a}) < 1. \quad (32)$$

Подставляя в (32) характерные значения физических величин для электрона и молекулы тубулина $m = 9.108 \cdot 10^{-31}$ kg, $a = 8 \cdot 10^{-9}$ m, $d = 0.72 \cdot 10^{-9}$ m, $\varepsilon_a = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ J·s, получаем $E_0 = -0.044\varepsilon_a$, $\lambda = 0.79 < 1$. Щель между уровнем энергии связанного состояния и началом отсчета энергий непрерывных состояний равна $\Delta = 0 - E_0 = 0.044\varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ J, а левая яма должна быть достаточно глубокой, не меньше $\varepsilon_a = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J. Таким образом, электрон в левой потенциальной яме молекулы тубулина имеет, по крайней мере, одно связанное состояние — основное состояние с энергией — $E_0 = 0.044\varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ J. Поэтому можно говорить о сегнетоэлектрическом фазовом переходе в дипольной системе микротрубочки тубулина с критической температурой перехода [10]

$$\beta_k = (b/2d)(1/\sqrt{2J\varepsilon_a}). \quad (33)$$

Подставляя в (33) характерные значения физических величин для молекулы тубулина, $a = 8 \cdot 10^{-9}$ m,

$d = 0.72 \cdot 10^{-9} \text{ m}$, $b = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}$, $\varepsilon_a = 4.3 \cdot 10^{-21} \text{ J}$,
 $J = 4.3 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$, получаем, что критическая температура

$$\beta_k^{-1} \equiv (k_B T_k) = (2d/b) \sqrt{2J\varepsilon_a} = 4.37 \cdot 10^{-21} \text{ J},$$

$$T_k = 317 \text{ K}. \quad (34)$$

Таким образом, тубулины — это молекулы-димеры, существующие в двух пространственных конформациях, а электрон молекулы тубулина, ответственный за „переключение“ между конформациями, находится в симметричном потенциале, который имеет два одинаковых по глубине локальных минимума (рис. 3). Левая яма соответствует α -состоянию молекулы, а правая яма — β -состоянию. Для простоты вычислений будем считать, что локальные минимумы потенциала лежат на одной оси, например x . В двухъямном потенциале тубулина электрон имеет, по крайней мере, одно связанное состояние — основное состояние с энергией $-E_0 = 0.044\varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21} \text{ J}$. Кроме основного состояния имеются, конечно, более высокие возбужденные состояния. Так как разность частот основного и следующих возбужденных состояний много больше, чем расщепление дублета основного состояния, обычно можно пренебречь возбужденными состояниями и ограничиться рассмотрением двухуровневой системы.

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

$$E = (1/2)mu^2 + V(x), \quad (35)$$

где m — масса, u — скорость, x — координата электрона, $V(x)$ — потенциальная энергия, которая имеет две потенциальные ямы, разделенные потенциальным барьером высотой ε_1 (рис. 3). Температурная зависимость частоты перехода электрона через барьер описывается формулой Аррениуса [17]

$$\omega(T) = A \exp(-\varepsilon/k_B T). \quad (36)$$

Здесь ε — энергии активации, множитель A по порядку величины близок к частоте столкновений с барьером. В молекуле тубулина $\varepsilon \cong E_0 = 0.044\varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21} \text{ J}$, следовательно, при температуре $T_k = 317 \text{ K}$ множитель $\exp(-\varepsilon/k_B T_k) \cong 1$. Для оценки величины A рассмотрим классическое вращательное движение электрона вокруг единичного положительного заряда на расстоянии r_0 :

$$m\omega_e^2 r(r/r) + \mathbf{F} = 0, \quad \mathbf{F} = (-e^2/4\pi\varepsilon_0 r^2)\mathbf{r}/r,$$

$$\omega_e = e^2/4\pi\varepsilon_0 m r_0^3. \quad (37)$$

Подставляя в (37) характерные для тубулина значения $r_0 = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}$, $m = 10^{-30} \text{ kg}$, $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ F}$, $\varepsilon \cong 2$ [16], получим

$$A \approx \omega_e = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}, \quad \omega(T_k) \approx \omega_e = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}. \quad (38)$$

При температурах, близких к абсолютному нулю ($\exp(-\varepsilon/k_B T) \rightarrow 0$), выражение (36) пренебрежимо мало. Однако из эксперимента известно, что частота перехода электрона через барьер имеет конечный низкотемпературный предел [17].

Согласно квантовой механике, частица может оказаться в классически запрещенной области и, более того, проникнуть через эту подбарьерную область из одной ямы в другую. Это явление называется туннельным эффектом. Вероятность туннелирования частицы под барьером за одно столкновение с ним определяется формулой Гамова [18]

$$T = \exp(-2l\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar), \quad (39)$$

где m — масса частицы, l — ширина барьера, ε — разность между высотой барьера и полной энергией частицы. Для электрона с массой 10^{-27} g при высоте барьера порядка 1 eV , длине барьера 1 \AA прозрачность потенциального барьера становится порядка единицы. Туннельным эффектом определяется множество самых различных явлений: радиоактивный распад [17], фотосинтез [18]. 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

$$\omega = A \exp(-\varepsilon/k_B T) + B \exp(-2l\sqrt{2m\varepsilon}/\hbar). \quad (40)$$

Здесь B — множитель порядка частоты столкновения с барьером туннелирующей частицы.

Для сравнения вкладов температурного и туннельного механизмов в частоту электронного перехода вычислим энергию основного состояния ε и частоту туннелирования электрона ω в двухъямном потенциале молекулы тубулина. Для этого исследуем движение электрона в одночастичном двухъямном потенциале $V(x)$ молекулы тубулина. Когда ширина локальных ям много меньше расстояния между ними, для потенциала $V(x)$, в котором находится электрон, можно использовать следующее представление [8]:

$$V(x) = -Vd\delta(x + b/2) - Vd\delta(x - b/2). \quad (41)$$

Здесь $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, ось x совпадает с осью, вдоль которой идет квантовый переход электрона в молекуле тубулина, b — расстояние между левым и правым минимумом потенциала, v — глубина левой и правой ямы соответственно, d — ширина как левой, так и правой локальной ям. Интегралы

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

дают нам площадь (мощность) локальной ямы в точках $-b/2$ и $b/2$ соответственно.

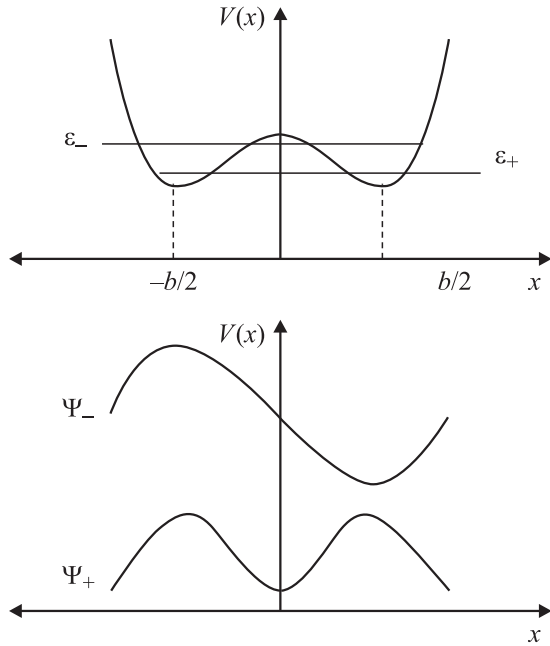


Рис. 4. Основное состояние и собственные функции электрона для симметричного двухъямного потенциала.

Хорошо известно, что движение электрона в потенциальной яме $V(x)$ (41) подчиняется уравнению Шредингера [17]

$$[-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + V(x)]\Psi(x) = -\varepsilon\Psi(x), \quad (42)$$

где $\Psi(x)$ — волновая функция электрона, $-\varepsilon$ — собственное значение энергии электрона, которое выбрано отрицательным ($\varepsilon > 0$), так как ищем только локализованные в потенциальной яме решения уравнения Шредингера. Симметричный потенциал $V(x)$ 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 локальной ямами снимает это вырождение ($\varepsilon_+ > \varepsilon_-$) и существенно влияет на динамику такой двухуровневой системы. Чтобы найти собственные энергии ε_+ , ε_- и собственные функции Ψ_+ , Ψ_- из уравнения (42), запишем волновые функции Ψ_+ , Ψ_- в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm} &= A_{\pm} \{ \exp[\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \\ &\quad \text{для } x < -b/2, \\ \Psi_{\pm} &= A_{\pm} \{ \exp[\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \\ &\quad \text{для } -b/2 < x < b/2, \\ \Psi_{\pm} &= A_{\pm} \{ \exp[-\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \\ &\quad \text{для } x > b/2. \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь κ_{\pm}^{-1} — характерный радиус локализации четной (+) и нечетной (-) волновых функций, A_{\pm} — нормировочная константа. Волновые функции (43) должны удовлетворять граничным условиям и условиям нормировки, которые позволяют определить величины κ_{\pm} и A_{\pm} :

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(-b/2 - 0) &= \Psi_{\pm}(-b/2 + 0), \\ \Psi_{\pm}(b/2 - 0) &= \Psi_{\pm}(b/2 + 0), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} -(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(-b/2 + 0) - \partial_x \Psi_{\pm}(-b/2 - 0)]\Psi(x) &= -Vd\Psi_{\pm}(-b/2), \\ -(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(b/2 + 0) - \partial_x \Psi_{\pm}(b/2 - 0)]\Psi(x) &= -Vd\Psi_{\pm}(b/2), \end{aligned} \quad (45)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_{\pm}(x)|^2 dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_+(x)\Psi_-(x) dx = 0. \quad (46)$$

Решая уравнение Шредингера (42) совместно с (44)–(46), получим [8]

$$(\hbar^2/m)\kappa_{\pm} = Vd[1 \pm \exp(-\kappa_{\pm}b)], \quad \varepsilon_{\pm} = (\hbar^2/2m)\kappa_{\pm}^2. \quad (47)$$

В пределе „слабого“ туннелирования $\kappa_{\pm}b \gg 1$, что соответствует случаю классической двухуровневой системы, выражения (47) принимают вид [8]

$$\begin{aligned} (\hbar^2/m)\kappa_{\pm} &= Vd[1 \pm \exp(-K_q^{-1})], \quad k_0 = Vd/(\hbar^2/m), \\ K_q &= (\hbar^2/m)/(Vdb) = (1/k_0b), \end{aligned} \quad (48)$$

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \varepsilon_+ - \varepsilon_- = (\hbar^2/2m)[\kappa_+^2 - \kappa_-^2] \\ &= 2Vdk_0 \exp(-K_q^{-1}) \rightarrow 0, \quad \varepsilon_0 = (\hbar^2/2m)\kappa_0^2. \end{aligned} \quad (49)$$

Здесь $\hbar\omega$ — расщепление энергий четного и нечетного состояний электрона, $\varepsilon_0 = 1.92 \cdot 10^{-21}$ J — энергия дважды вырожденного связанного (основного) состояния электрона, $\kappa_0^{-1} = 1.6 \cdot 10^{-9}$ m — характерный радиус локализации волновой функции связанного (основного) состояния, K_q — коэффициент квантовости двухуровневой системы, который мал, когда туннелирование мало, и стремится к единице, когда туннелирование велико. Из (48), (49) 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 классическим движением электрона в двухъямном потенциале, в котором существует дважды вырожденное связанное (основное) состояние электрона с энергией $\varepsilon_0 = 1.92 \cdot 10^{-21}$ J и характерным радиусом локализации волновой функции $\kappa_0^{-1} = 1.6 \cdot 10^{-9}$ m.

Проведем оценку величин (48), (49) для значений $\hbar \approx 10^{-34}$ J·s, $V = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, $d = 2(0.72 \cdot 10^{-9}) = 1.44 \cdot 10^{-9}$ m, $b = 2(2 \cdot 10^{-9}) = 4 \cdot 10^{-9}$ m, $m = 10^{-30}$ kg, получим $\kappa_0 = 6.2 \cdot 10^8$ m⁻¹, $K_q^{-1} = k_0b = 2.48$, $\kappa_+ = 1.084k_0$, $\kappa_- = 0.916k_0$. Это означает,

что для барьера, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала, с высотой, равной $V = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, и шириной 4 nm 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. Таким образом, в молекуле тубулина реализуется предел „сильного“ туннелирования $\kappa_{\pm}b \approx 2.5$, что соответствует случаю квантовой двухуровневой системы, а выражения (47) принимают вид

$$K_q\kappa_{\pm}b = [1 \pm \exp(-\kappa_{\pm}b)],$$

$$\hbar\omega = \varepsilon_+ - \varepsilon_- = (\hbar^2/2m)[\kappa_+^2 - \kappa_-^2]. \quad (50)$$

Вычисляя энергии четного, нечетного состояний и энергию расщепления основного дублета ε_+ , ε_- , $\hbar\omega$, получим $\varepsilon_+ = 2.26 \cdot 10^{-21}$ J, $\varepsilon_- = 1.61 \cdot 10^{-21}$ J, $\hbar\omega = 6.5 \cdot 10^{-22}$ J. Это означает, что для барьера, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала, с высотой, равной $V = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, и шириной 4 nm расщепление энергий дублета основного состояния $\hbar\omega$ отлично от нуля, и квантовое туннелирование электрона велико, поэтому необходимо учитывать квантовые свойства двухуровневой системы. Частота туннелирования электрона составляет $\omega = 6.5 \cdot 10^{12}$ s⁻¹, соответственно длина волны самопроизвольного излучения при переходе из состояния с энергией ε_- в состояние с энергией ε_+ равна $\lambda = (2\pi c/\omega) = 2.9 \cdot 10^{-4}$ m.

Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состояниями электрона велика, и мы имеем дело с квантовым движением электрона в двухъямном потенциале молекулы тубулина, в котором существует связанное (основное) состояние электрона (дублет) с энергиями $\varepsilon_+ = 2.26 \cdot 10^{-21}$ J, $\varepsilon_- = 1.61 \cdot 10^{-21}$ J, расщеплением $\hbar\omega = 6.5 \cdot 10^{-22}$ J, частотой $\omega = 6.5 \cdot 10^{12}$ s⁻¹, длиной волны самопроизвольного излучения $\lambda = 2.9 \cdot 10^{-4}$ m.

Таким образом, наряду с тепловыми (классически) перескоками электрона между левой и правой потенциальными ямами в двухъямном потенциале молекулы тубулина с частотой $\omega(T_k) \approx \omega_e = 5 \cdot 10^{13}$ s⁻¹ существуют дополнительные квантовые переходы электронов с частотой туннелирования $\omega = 6.5 \cdot 10^{12}$ s⁻¹, совместно определяющие дискретные конформационные степени свободы молекулы. Следовательно, волновая функция электрона в двухъямном потенциале молекулы 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 ось квантования псевдоспина z . Для нашего случая двухуровневой системы волновая функция электрона будет иметь вид псевдоспинора $\Psi(x, S^z)$, который представляет собой совокупность двух различных функций координат: четной $\Psi(x, +1/2) = \Psi_+(x)$ и нечет-

ной $\Psi(x, -1/2) = \Psi_-(x)$, 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 [15]

$$[\hat{S}_a^\alpha, \hat{S}_b^\beta] = i\delta_{ab}\hat{S}_a^\gamma, \quad (51)$$

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 $1/2$ ($\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z$ и единичную матрицу). Подобное псевдоспиновое представление системы весьма полезно в связи с тем что при таком преобразовании удастся обойти сильный ангармонизм задачи благодаря аналогии с магнитными системами, такими как модели Изинга и Гайзенберга [19].

Чтобы лучше понять псевдоспиновый формализм, получим выражение модельного гамильтониана дипольной системы микротрубочки цитоскелета, где каждый электрон тубулина движется между двумя ямами одночастичного потенциала, а между диполями действует кулоновское резонансное взаимодействие.

В двухъямном потенциале изолированной молекулы тубулина a связанный электрон может находиться только в основном состоянии — дублете (состоянии с энергией E_+ и симметричной волновой функцией Ψ_+^a , состоянии с энергией E_- и антисимметричной волновой функцией Ψ_-^a). Состояние системы из двух таких электронов молекул a и b при отсутствии взаимодействия описывается волновой функцией $\Psi_a^a\Psi_b^b$, где индексы a, β могут принимать значения $+, -$.

В основном и возбужденном состояниях электрона при энергии возбуждения, меньшей энергии ионизации, волновые функции электронов соседних молекул перекрываются слабо. Нас будут интересовать только малые электронные возбуждения ($\Psi_+^a \leftrightarrow \Psi_-^a$, $\Psi_+^b \leftrightarrow \Psi_-^b$), поэтому будем пренебрегать перекрыванием волновых функций электронов соседних молекул. Основное состояние системы из двух электронов изолированных молекул описывается волновой функцией $\Psi_+^a\Psi_+^b$ и имеет энергию $E_+ + E_+$. Возбужденное состояние системы, соответствующее возбуждению одного электрона $\Psi_+^a\Psi_-^b$, имеет энергию $E_+ + E_-$. Это состояние двукратно вырождено, так как любой из электронов может находиться в возбужденном состоянии Ψ_-^a . Возбужденное состояние системы, соответствующее возбуждению двух электронов $\Psi_-^a\Psi_-^b$, имеет энергию $E_- + E_-$. Произвольное резонансное взаимодействие \hat{V} вызывает переходы между всеми состояниями $\Psi_+^a\Psi_+^b$, $\Psi_+^a\Psi_-^b$, $\Psi_-^a\Psi_+^b$, $\Psi_-^a\Psi_-^b$, поэтому энергия резонансного взаимодействия двух электронов имеет вид

$$V_{\text{res}}^{ab} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \Psi_\alpha^a \Psi_\beta^b | \hat{V}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ab} | \Psi_\gamma^a \Psi_\delta^b \rangle. \quad (52)$$

Модельный гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета, где каждый электрон тубулина движется между двумя ямами одночастичного потенциала, а между диполями действует кулоновское резонансное взаимодействие, состоит из одночастичного гамильтониана $\hat{H}_0(i)$ и гамильтониана двухчастичного взаимодействия $\hat{H}_1(i, j)$:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_0(i) + \sum_{i \neq j} \hat{H}_1(i, j). \quad (53)$$

В представлении четной и нечетной волновых функций Ψ_+, Ψ_- , в котором одночастичный гамильтониан $\hat{H}_0(i)$ диагонален, с помощью метода вторичного квантования из (52), (53) получаем

$$\hat{H}_0(i) = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{i\alpha}, \quad (54)$$

$$\hat{H}_1(i, j) = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{i\beta} \hat{a}_{j\gamma}^+ \hat{a}_{j\delta}, \quad (55)$$

где $\hat{a}_{i\alpha}^+$ и $\hat{a}_{i\alpha}$ — фермиевские операторы рождения и уничтожения для электрона в молекуле тубулина в одночастичном квантовом состоянии α . Поскольку основным состоянием электрона в потенциале с двумя минимумами молекулы тубулина является дублет и если пренебречь более высокими возбужденными состояниями, то одночастичные квантовые числа $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ могут принимать только два значения, которые будем обозначать плюс и минус. Матричные элементы $V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij}$ представляют собой соответствующие резонансные интегралы (12), (25) диполь-дипольного взаимодействия, которые зависят не только от расстояний между центрами тяжести молекул i и j , но и от их квантовых состояний. Поскольку матричные элементы оператора дипольного момента неполярной молекулы тубулина обладают свойствами $\langle +|\mathbf{d}|+\rangle = 0$, $\langle -|\mathbf{d}|-\rangle = 0$, $\langle +|\mathbf{d}|-\rangle = \mathbf{d}_{+-}$, $\langle -|\mathbf{d}|+\rangle = (\mathbf{d}_{+-})^*$, в (55) останутся только члены

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(i, j) = & V_{+,-,+,-}^{ij} \hat{a}_{i+}^+ \hat{a}_{i-} \hat{a}_{j+}^+ \hat{a}_{j-} \\ & + V_{+,-,-,+}^{ij} \hat{a}_{i+}^+ \hat{a}_{i-} \hat{a}_{j-}^+ \hat{a}_{j+} + V_{-,+,-,+}^{ij} \hat{a}_{i-}^+ \hat{a}_{i+} \hat{a}_{j+}^+ \hat{a}_{j-} \\ & + V_{-,+,-,-}^{ij} \hat{a}_{i-}^+ \hat{a}_{i+} \hat{a}_{j-}^+ \hat{a}_{j+}. \end{aligned} \quad (56)$$

В приближении, что одночастичный потенциал тубулина имеет одноосную анизотропию по оси x , получим для резонансного диполь-дипольного взаимодействия (25) в представлении четной и нечетной волновых функций Ψ_+, Ψ_- (43)

$$V_{+,-,+,-}^{ij} = V_{+,-,-,+}^{ij} = V_{-,+,-,+}^{ij} = V_{-,+,-,-}^{ij}, \quad (57)$$

$$\begin{aligned} V_{+,-,+,-}^{ij} = & -(1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3)[3 \cos^2 \Theta - 1] \\ & \times \langle \Psi_+^i \Psi_+^j | d_{ix} d_{jx} | \Psi_-^i \Psi_-^j \rangle = -(1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3)[3 \cos^2 \Theta - 1] e^2 \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_+^*(x) x \Psi_-(x) dx \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_+^*(x') x \Psi_-(x') dx'. \end{aligned} \quad (58)$$

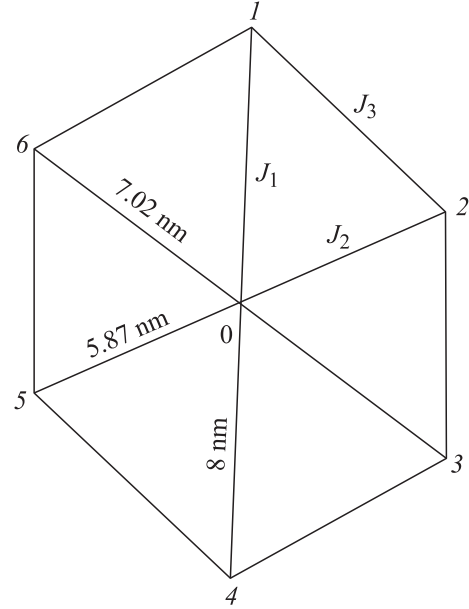


Рис. 5. Схема псевдоспиновых связей элементарной ячейки гексагональной решетки микротрубочки цитоскелета [1,2].

Из (58) видно, что при $\Theta = 0$ (связь 0–1 рис. 5, когда направление вектора R , соединяющего центры тяжести молекул тубулина, совпадает с направлением вектора дипольного момента молекулы тубулина (ось x)) энергия резонансного диполь-дипольного взаимодействия отрицательна и максимальна, что приводит к ферроэлектрическому упорядочению дипольных моментов на этой связи и притяжению молекул.

Соответствующие собственные функции

$$\Psi_+ = (1/2)^{1/2}(\varphi_L + \varphi_R), \quad \Psi_- = (1/2)^{1/2}(\varphi_L - \varphi_R) \quad (59)$$

являются симметричной и антисимметричной линейной комбинацией волновых функций, локализованных в левом φ_L и правом φ_R равновесных положениях потенциала рис. 4. Условие того, что в двухъямном потенциале находится только один электрон, выражается теперь в виде

$$\hat{a}_{i+}^+ \hat{a}_{i+} + \hat{a}_{i-}^+ \hat{a}_{i-} = 1. \quad (60)$$

Используя ограничения (60), можно связать произведения операторов рождения и уничтожения электрона с фиктивными операторами спина 1/2 [15]

$$\begin{aligned} S_i^x &= (1/2)[a_{i+}^+ a_{i-} + a_{i-}^+ a_{i+}], \\ S_i^y &= (1/2)[a_{i+}^+ a_{i-} - a_{i-}^+ a_{i+}], \\ \hat{S}_i^z &= (1/2)[\hat{a}_{i+}^+ \hat{a}_{i+} - \hat{a}_{i-}^+ \hat{a}_{i-}]. \end{aligned} \quad (61)$$

Эти операторы на самом деле подчиняются известным правилам коммутации для псевдоспиновых операторов (51). Физический смысл псевдоспиновых операторов проясняется, если перейти от представления, в котором диагонален одночастичный гамильтониан, к представлению локализованных состояний φ_L, φ_R .

Оператор $a_{i\alpha}^+$ рождения частицы в квантовых состояниях $\alpha = +, -$ и оператор $a_{i\alpha}$ уничтожения частицы в этих состояниях суть симметричные ($\alpha = +$) и антисимметричные линейные комбинации соответствующих операторов рождения и уничтожения частицы в левом и правом равновесных положениях двухъямного потенциала

$$\begin{aligned} a_{i+} &= (1/\sqrt{2})(a_{iL} + a_{iR}), & a_{i+}^+ &= (1/\sqrt{2})(a_{iL}^+ + a_{iR}^+), \\ a_{i-} &= (1/\sqrt{2})(a_{iL} - a_{iR}), & a_{i-}^+ &= (1/\sqrt{2})(a_{iL}^+ - a_{iR}^+). \end{aligned} \quad (62)$$

Используя выражения (61) и (62), получим

$$\begin{aligned} S_i^x &= (1/2)[a_{iL}^+ a_{iR} + a_{iR}^+ a_{iL}], & S_i^y &= (1/2)[a_{iL}^+ a_{iR} - a_{iR}^+ a_{iL}], \\ S_i^z &= (1/2)[a_{iL}^+ a_{iL} - a_{iR}^+ a_{iR}]. \end{aligned} \quad (63)$$

Таким образом, в представлении локализованных состояний φ_L, φ_R z -компонента псевдоспина задает оператор дипольного момента, y -компонента — оператор локального тока, а x -компонента — оператор туннелирования. Это эквивалентно утверждению, что математическое ожидание S_i^z характеризует разницу между заселенностями левого и правого равновесных положений, в то время как математическое ожидание S_i^x характеризует разницу в заселенностях симметричного и антисимметричного состояний.

Вводя псевдоспиновые операторы и выражения (59)–(63) для гамильтониана дипольной системы микротрубочки цитоскелета (53) в приближении, что одночастичный потенциал тубулина имеет одноосную анизотропию по оси x , получим в представлении четной и нечетной волновых функций Ψ_+, Ψ_-

$$H = -\hbar\omega \sum_i S_i^z - (1/2) \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^x S_j^x, \quad (64)$$

где

$$\begin{aligned} J_{ij} &= (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3)[3 \cos^2 \Theta - 1]e^2(b/2)^2, \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_+^*(x)x\Psi_-(x)dx = b/2, \end{aligned} \quad (65)$$

$$\hbar\omega = E_- - E_+, \quad (66)$$

а в представлении локализованных состояний φ_L, φ_R

$$H = -\hbar\omega \sum_i S_i^x - (1/2) \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^z S_j^z, \quad (67)$$

где b — расстояние между левым и правым минимумами потенциала молекулы тубулина, R — расстояние между центрами тяжести молекул тубулина. Из (67) видно, что гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета в приближении, когда одночастичный потенциал тубулина имеет одноосную анизотропию по оси x , и в представлении локализованных состояний φ_L, φ_R действительно совпадает с гамильтонианом модели Изинга в поперечном поле.

Известно, что в простейших системах (ансамбли двухуровневых атомов, взаимодействующих через поле излучения, диполь-дипольное взаимодействие) возможен целый ряд светоиндуцированных фазовых переходов [20]. На основании представлений об обменном взаимодействии системы двухуровневых атомов, участвующих в процессе сверхизлучения, в работе [21] из первых принципов выводится гамильтониан сверхизлучения системы, аналогичный гамильтониану Гейзенберга. Интересно исследовать взаимосвязь между неравновесным сверхизлучательным переходом и равновесным фазовым переходом второго рода, протекающим в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, что и будет сделано в следующей работе.

Поскольку частота тепловых перескоков электрона между левой и правой потенциальными ямами потенциала тубулина ($\omega(T_k) \approx \omega_e = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$) больше, чем частота квантовых переходов электрона (частота туннелирования $\omega = 6.5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$), то для последовательного изучения равновесных сегнетоэлектрических свойств микротрубочки цитоскелета при конечных температурах и получения важных предельных значений физических величин вначале исследуем случай отсутствия туннелирования в двухъямном потенциале молекулы тубулина. В этом случае переход электрона из одной потенциальной ямы в другую в молекуле тубулина при температуре человеческого тела имеет тепловой флуктуационный характер, а систему 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 $S_i^x = +1/2, S_i^z = -1/2$. Гамильтониан системы взаимодействующих классических дипольных моментов молекул тубулина можно записать в виде суммы двухчастичных взаимодействий классических псевдоспинов

$$H = -(1/2) \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i^z S_j^z. \quad (68)$$

Здесь J_{ij} элементы матрицы коэффициентов связи псевдоспинов (дипольных моментов) (65). Суммирование по i, j идет по всем молекулам тубулина микротрубочки цитоскелета.

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 по методу дифракции гамма-лучей показали [5], что молекулы тубулина образуют почти правильную гексагональную решетку, которая показана на рис. 5. Каждая молекула тубулина обладает дипольным моментом $p = e(b/2) \approx 3.2 \cdot 10^{-28} \text{ C} \cdot \text{m}$, где e — заряд электрона и $b = 4 \text{ nm}$, чья проекция на вертикальную ось x может быть $+p$ или $-p$. Коэффициенты резонансного диполь-дипольного взаимодействия (коэффициенты связи) между молекулами i и j имеют вид (65)

$$J_{ij} = (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 R^3)[3 \cos^2 \Theta - 1]e^2(b/2)^2, \quad (69)$$

где $\varepsilon \approx 2$ — диэлектрическая проницаемость среды, $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ F/m — диэлектрическая проницаемость вакуума, R_{ij} — расстояния между центрами тяжести молекул i, j , \mathbf{n} — нормированный на единицу вектор, соединяющий узлы i и j , Θ — угол между направлениями оси диполя (вертикальная ось x) и вектора \mathbf{n} . Из (69) видно, что резонансное диполь-дипольное взаимодействие является знакопеременным и разные пары псевдоспинов могут взаимодействовать друг с другом как ферроэлектрическим, так и антиферроэлектрическим образом. Для характерных значений этих физических величин рассчитаем значения коэффициентов псевдоспиновой связи для ближайших соседей

$$\begin{aligned} J_1 &= 1.8 \cdot 10^{-21} \text{ J}, \quad \Theta_1 = 0 \text{ deg}; \\ J_2 &= -3.6 \cdot 10^{-22} \text{ J}, \quad \Theta_2 = 58.2 \text{ deg}; \\ J_3 &= 6.7 \cdot 10^{-22} \text{ J}, \quad \Theta_3 = 45 \text{ deg}. \end{aligned} \quad (70)$$

Проблема определения основного состояния системы состоит в том, что коэффициенты связи J_{ij} являются случайными по знаку и заморожены, т.е. в данном конкретном образце они зафиксированы. При этом возникает следующее явление. Рассмотрим три произвольных взаимодействующих между собой псевдоспина и будем считать, что взаимодействия J_1, J_2, J_3 одинаковы по величине, но могут иметь разный знак. Если все три константы связи J_1, J_2, J_3 оказались положительными либо две из них отрицательными (т.е. когда произведение взаимодействий вдоль треугольника положительно), то основное состояние (минимум энергии) этой трехспиновой системы будет единственным (с точностью до одновременного изменения знака всех трех псевдоспинов). Однако если произведение взаимодействий вдоль треугольника оказалось отрицательным (одно из взаимодействий отрицательно либо все три взаимодействия отрицательны), то основное состояние такой системы оказывается вырожденным: если мы зафиксируем первый псевдоспин, скажем „вверх“, и будем совершать обход вокруг треугольника, выставляя ориентацию псевдоспинов в соответствии с заданными взаимодействиями, то ориентация последнего, третьего, псевдоспина окажется неопределенной — энергии состояния „вверх“ и состояния „вниз“ будут одинаковы. Для ситуации (3), когда два взаимодействия положительны, третье отрицательно: если первый псевдоспин смотрит „вверх“, то в соответствии с J_1 второй псевдоспин должен смотреть „вверх“, однако для третьего псевдоспина возникает неопределенность: в соответствии с J_2 он должен смотреть „вниз“, а в соответствии с J_3 он должен смотреть „вверх“.

То же самое явление вырождения основного состояния происходит в любой замкнутой цепочке, состоящей из произвольного числа псевдоспинов, если произведение коэффициентов связи вдоль цепочки отрицательно. Связи, соединяющие дипольные моменты (1), (2); (2), (3); (4), (5); (5), (6), взаимная ориентация которых не соответствует знаку их констант, являются фрустрированными. Наличие фрустрированных связей — важ-

нейшая особенность неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета.

В многоспиновых системах можно нарисовать огромное число всевозможных замкнутых многоспиновых цепочек, и если при этом псевдоспин-псевдоспиновые взаимодействия случайны по знаку, то соответственно будет присутствовать большое количество фрустраций, и это может привести к колоссальному вырождению основного состояния. В действительности вырождение именно основного состояния, по-видимому, не очень важно — важно, что в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния, которые благодаря своей большой энтропии могут вносить конечный (и даже доминирующий) вклад в термодинамику даже в пределе низких температур. В изинговых системах, описываемых гамильтонианом (68), число таких состояний составляет $\sim \exp(\lambda N)$, где λ — некоторое число, много меньше $\ln 2$, при том что полное число таких состояний равно $2^N = \exp(N \ln 2)$.

Таким образом, микротрубочка цитоскелета может быть дипольным стеклом, в котором основную роль играют взаимодействие ближайших соседей с антиферроэлектрическим коэффициентом связи $J_2 < 0$ и взаимодействие следующих за ближайшими соседями с ферроэлектрическим коэффициентом $J_1, J_3 > 0$. Дипольная система представляет собой цепочку псевдоспинов, между которыми осуществляются конкурирующие антиферро- и ферроэлектрические 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 выбросить 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, какие J_{ik} находятся на других связях. В этом случае статистические свойства J_{ik} полностью определяются функцией распределения $f(J_{ik})$ на данной связи. Обычно предполагают, что $f(J_{ik})$ — гауссова функция распределения

$$f(J_{ik}) = (1/I_{ik}\sqrt{2\pi}) \exp(-J_{ik}^2/2I_{ik}^2). \quad (71)$$

В этом случае она задается двумя параметрами — средним значением \tilde{J}_{ik} и дисперсией I_{ik} :

$$\langle J_{ik} \rangle = \tilde{J}_{ik}, \quad I_{ik} = \langle J_{ik}^2 \rangle - \langle J_{ik} \rangle^2. \quad (72)$$

В предлагаемой модели между разными парами псевдоспинов происходят случайные взаимодействия разных знаков — ферро- или антиферроэлектрические. Именно наличие взаимодействий разного знака и лежит в основе физики дипольных стекол.

Пусть для простоты $\langle J_{ik} \rangle = \tilde{J}_{ik} = 0$. Это означает, что половина пар псевдоспинов случайным образом взаимодействует друг с другом ферроэлектрически, а другая — антиферроэлектрически. Возникает вопрос, может ли происходить при таком взаимодействии какой-нибудь фазовый переход. Ясно, что ни ферроэлектрического, ни антиферроэлектрического, ни какого-нибудь геликоидального упорядочения в такой системе быть не может. На первый взгляд вообще никакого фазового перехода представить себе нельзя. Однако Андерсон и Эдвардс в работе [22] показали, что в системе с гамильтонианом (68), (71), (72) 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

$$S_i = \langle S_i^z \rangle_T, \quad (73)$$

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

$$\langle S_i^z \rangle_T = \left[\sum_{S_i^z} S_i^z \exp(-H/T) \right] \left[\sum_{S_i} \exp(-H/T) \right]^{-1}. \quad (74)$$

После усреднения по Гиббсу получаем случайную функцию координат S_i . Легко показать, что в параэлектрической области $S_i = 0$ во всех узлах микротрубочки цитоскелета. При снижении температуры может возникнуть отличная от нуля во всех узлах случайная функция S_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 S_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 S_i . Как 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 простейшие моменты

$$S_i = \langle S_i \rangle_C, \quad Q_{ij} = \langle S_i S_j \rangle_C, \quad (75)$$

где $\langle \dots \rangle_C$ — усреднение по конфигурациям. Очевидно, что S_i есть средний дипольный момент в узле i , $Q_{ii} \equiv Q_{ii}$ определяет средний квадрат дипольного момента в узле i , Q_{ij} — корреляционные функции. Для однородного случая величина $Q \equiv Q_{ii}$ 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 S и Q описываются двумя уравнениями, которые для спинового стекла получены с помощью метода реплик [23].

2. Уравнения молекулярного поля для дипольной системы микротрубочки цитоскелета

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

$$E_i = E_0 + \sum_{k=1}^z 2J_{ik} S(E_k), \quad (76)$$

где E_0 — внешнее электрическое поле, z — число ближайших соседей, $S(E_i)$ — зависимость поляризации от электрического поля. Для модели Изинга с гамильтонианом (68)

$$S(E_i) = \langle S_i \rangle_T = \left[\sum_{S_i} S_i \exp(S_i E_i / T) \right] \times \left[\sum_{S_i} \exp(S_i E_i / T) \right]^{-1} = \text{th}(E_i / T). \quad (77)$$

Тогда из (77) имеем

$$E_i = E_0 + \sum_{k=1}^z 2J_{ik} \langle S_k \rangle_T = E_0 + \sum_{k=1}^z 2J_{ik} \text{th}(E_k / T). \quad (78)$$

Сделаем упрощающее предположение, а именно будем считать, что E_i статистически не зависят от J_{ij} . Тогда, усредняя обе части (78) и учитывая, что при нашем предположении

$$\begin{aligned} \langle J_{ik} \langle S_k \rangle_T \rangle &= \langle J_{ik} \rangle \langle S_k \rangle_{T,E} = \langle J_{ik} \text{th}(E_k / T) \rangle \\ &= \langle J_{ik} \rangle \langle \text{th}(E_k / T) \rangle_E, \end{aligned} \quad (79)$$

получаем

$$\begin{aligned} \langle E_i \rangle_E &= E_0 + 2 \sum_j \langle J_{ij} \rangle \langle S_j \rangle_{T,E} \\ &= E_0 + 2 \sum_j \langle J_{ij} \rangle \langle \text{th}(E_j / T) \rangle_E, \end{aligned} \quad (80)$$

$$\begin{aligned} \langle E_i^2 \rangle_E - \langle E_i \rangle_E^2 &= 4 \left\{ \sum_j \langle J_{ij}^2 \rangle \langle S_j^2 \rangle_{T,E} - \sum_j \langle J_{ij} \rangle^2 \langle S_j \rangle_{T,E}^2 \right\} \\ &= 4 \left\{ \sum_j J_{ij} \langle S_j^2 \rangle_{T,E} + \sum_j \langle J_{ij} \rangle^2 [\langle S_j^2 \rangle_{T,E} - \langle S_j \rangle_{T,E}^2] \right\} \\ &= 4 \left\{ \sum_j I_{ij} \langle \text{th}^2(E_j / T) \rangle_E + \sum_j \langle J_{ij} \rangle^2 [\langle \text{th}^2(E_j / T) \rangle_E - \langle \text{th}(E_j / T) \rangle_E^2] \right\}, \end{aligned} \quad (81)$$

$$I_{ij} = \langle J_{ij}^2 \rangle - \langle J_{ij} \rangle^2. \quad (82)$$

Решения уравнений (80), (81) в общем случае найти очень трудно, поэтому исследуем эти уравнения для некоторых предельных случаев.

1. Рассмотрим сначала уравнения (80), (81) для полностью неупорядоченной (однородной) системы дипольных моментов. Для однородной системы характерные величины одинаковы для любого узла (не зависят от индекса узла), поэтому можно положить: $J_1 = \sum_j \langle J_{ij} \rangle \equiv J_0$, $I_i = \sum_j I_{ij} \equiv I_0$, $\langle S_j \rangle_{T,E} \equiv \langle S_j \rangle_{T,E}$, $\langle S_j^2 \rangle_{T,E} \equiv \langle S^2 \rangle_{T,E}$, $E_j \equiv E$. Тогда уравнения (80), (81) примут вид

$$\langle E \rangle_H = E_0 + 2J_0 \langle \text{th}(E/T) \rangle_E, \quad (83)$$

$$\langle E^2 \rangle_E - \langle E \rangle_H^2 = 4\{I_0 \langle \text{th}^2(E/T) \rangle_E + (J_0^2/z) [\langle \text{th}^2(E/T) \rangle_E - \langle \text{th}(E/T) \rangle_E^2]\}, \quad (84)$$

$$J_0 = \sum_{k=1}^z \tilde{J}_{ik}, \quad I_0 = \sum_{k=1}^z I_{ik}. \quad (85)$$

Обычно теория молекулярного поля применима при $x \ll 1$. В нашем случае ситуация аналогична, поэтому будем считать, что

$$z \ll 1. \quad (86)$$

Кроме этого, предположим, что

$$J_0^2 \approx I_0. \quad (87)$$

тогда $(J_i^2/z) \approx (I_i/z) \gg I$, и из (83), (84) получим

$$\langle E \rangle_H = E_0 + 2J_0 \langle \text{th}(E/T) \rangle_E, \quad (88)$$

$$\langle E^2 \rangle_E - \langle E \rangle_H^2 = 4I_0 \langle \text{th}^2(E/T) \rangle_E. \quad (89)$$

Усреднение в (88), (89) ведется по некоторой функции распределения молекулярных полей $f(E)$. Если $z \gg 1$, то, как видно из (78), E представляет собой сумму большого числа слагаемых. Тогда функция распределения $f(E)$ является гауссовой [24]:

$$f(E) = [2\pi(\langle E^2 \rangle_E - \langle E \rangle_H^2)]^{-1/2} \times \exp\{-\{(E - \langle E \rangle_H)^2 / [2(\langle E^2 \rangle_E - \langle E \rangle_H^2)]\}^{-1}\}. \quad (90)$$

Из (88), (89) получим следующие уравнения для $\langle E \rangle_E$ и $\langle E^2 \rangle_E - \langle E \rangle_E^2$:

$$\langle E \rangle_H - E_0 + 2J_0 S, \quad \langle E^2 \rangle_E - \langle E \rangle_E^2 = 4I_0 Q, \quad (91)$$

$$S = \int dR f(E) \text{th}(E/T) = \langle \text{th}(E/T) \rangle_E = \langle S(E) \rangle_E, \quad (92)$$

$$Q = \int dR f(E) \text{th}^2(E/T) = \langle \text{th}^2(E/T) \rangle_E = \langle S^2(E) \rangle_E. \quad (93)$$

Становится очевидным смысл формул (92), (93). Пусть ансамбль диполей расположен в случайных электрических полях с функцией распределения (90). Тогда при вычислении различных средних необходимо производить

два вида усреднения: по Гиббсу $\langle \dots \rangle_T$ и по конфигурациям случайных электрических полей $\langle \dots \rangle_E$. Усреднение по Гиббсу во внешнем электрическом поле имеет вид

$$\langle \dots \rangle_T = \left[\sum_{S_i} (\dots) \exp(S_i E_i / T) \right] \left[\sum_{S_i} (\dots) \exp(S_i E_i / T) \right]^{-1}. \quad (94)$$

То есть в (77) вычислено среднее по Гиббсу для дипольного момента, находящегося во внешнем электрическом поле, а в (93) усреднен квадрат этого среднего по конфигурациям внешнего электрического поля $\langle \dots \rangle_E$. Эта процедура полностью соответствует двум видам усреднения в формулах (75). При этом усреднение по конфигурациям дипольного момента (75) в приближении молекулярного поля переходит в усреднение по конфигурациям случайного электрического поля.

Очевидно, что S и Q есть величины, определенные в (75). Перепишем эти уравнения в более удобном для расчетов виде

$$S = [2\pi]^{-1/2} \times \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}[T^{-1}(E_0 + 2J_0 S + 2x\sqrt{I_0 Q})], \quad (95)$$

$$Q = [2\pi]^{-1/2} \times \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}^2[T^{-1}(E_0 + 2J_0 S + 2x\sqrt{I_0 Q})]. \quad (96)$$

В приближении молекулярного поля уравнения (95), (96) являются уравнениями самосогласования, реализующие экстремум удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета $G(S, Q)$,

$$\begin{aligned} \partial G(S, Q) / \partial S &= S - [2\pi]^{-1/2} \\ &\times \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}[T^{-1}(E_0 + 2J_0 S + 2x\sqrt{I_0 Q})] = 0, \end{aligned} \quad (97)$$

$$\begin{aligned} \partial G(S, Q) / \partial Q &= Q - [2\pi]^{-1/2} \\ &\times \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}^2[T^{-1}(E_0 + 2J_0 S + 2x\sqrt{I_0 Q})] = 0. \end{aligned} \quad (98)$$

Разлагая уравнения (97), (98) по степеням параметров порядка S и Q при $E_0 = 0$, восстановим разложение удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета $G(S, Q)$ по S и Q в окрестности трикритической точки

$$G(S, Q) = (1/2)\alpha_1 S^2 + (1/4)\beta_1 S^2 + (1/2)\alpha_2 Q^2 + (1/3)\beta_2 Q^3 + \text{член} \sim S^2 Q, \quad (99)$$

$$\partial G(S, Q) / \partial S = \alpha_1 S + \beta_1 S^3 + \gamma_1 S Q = 0, \quad (100)$$

$$\partial G(S, Q) / \partial Q = \alpha_2 Q + \beta_2 Q^2 - \gamma_2 S^2 = 0, \quad (101)$$

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 1 - (2J_0/T)c_0 = (T - T_c)/T_c, \quad \beta_1 = (8J_0^3/3T_c^3)c_0, \\ \gamma_1 &= (8J_0 I_0 / T_0^3)c_2, \end{aligned} \quad (102)$$

$$\alpha_2 = 1 - (4J_0/T^2)c_2 = 2(T - T_f)/T_f, \quad \beta_2 = (32J_0^2/3T_f^4)c_4, \quad \gamma_2 = (2J_0^2/T_f^2)c_0, \quad (103)$$

$$c_0 = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-x^2/2) = 1, \quad c_2 = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx [x^2 \exp(-x^2/2)] = 1, \quad (104)$$

$$c_4 = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx [x^4 \exp(-x^2/2)] = 3, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = (\pi/\alpha)^{1/2}, \quad (105)$$

где α_1, α_2 — коэффициенты, меняющие знак при изменении температуры, а коэффициенты $\beta_1, \beta_2, \gamma_1, \gamma_2$ — положительные. Здесь $T_c = 2J_0$ ($T_f = 2\sqrt{I_0}$) — температура сегнетоэлектрического перехода в ферроэлектрическое состояние (состояние дипольного стекла) дипольной системы микротрубочки цитоскелета.

Если положить $I_0 = 0$, то тогда из (100), (101) видно, что остается только одно уравнение для S , а Q определяется через S . Ясно, что при

$$T = T_c = 2J_0 \quad (106)$$

появляется ненулевое решение для S , т.е. T_c — точка фазового перехода. Это и есть сегнетоэлектрический переход в ферроэлектрическую фазу в микротрубочке цитоскелета. В этом случае решение уравнений самосогласования (100), (101) имеет вид

$$S^2 = -\alpha_1/\beta_1, \quad Q = (\gamma_2/\alpha_2)S^2 = \gamma_2 S^2 \quad \text{при } \alpha_1 \leq 0, \quad (107)$$

$$S = 0, \quad Q = 0 \quad \text{при } \alpha_1 > 0. \quad (108)$$

Если положить $J_0 = 0$, то тогда из (100), (101) видно, что остается только одно уравнение для Q , а $S = 0$. Ясно, что при

$$T = T_f = 2\sqrt{I_0} \quad (109)$$

появляется ненулевое решение для Q , т.е. T_f — точка фазового перехода. Это и есть переход в фазу дипольного стекла в микротрубочке цитоскелета. В этом случае решение уравнений самосогласования (100), (101) имеет вид

$$Q = -\alpha_2/\beta_2, \quad S = 0 \quad \text{при } \alpha_2 \leq 0, \quad (110)$$

$$Q = 0, \quad S = 0 \quad \text{при } \alpha_2 > 0. \quad (111)$$

Таким образом, низкотемпературная фаза, в которую происходит переход в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, определяется соотношением параметров J_0 и I_0 : если $J_0 > I_0$, то в начале возникает ферроэлектрическая фаза, если $J_0 < I_0$, то в начале реализуется фаза дипольного стекла.

Хорошо известно, что энергия фазы дипольного стекла в микротрубочке цитоскелета обладает большим количеством глобальных и локальных минимумов в пространстве конфигураций дипольных моментов [9]. Поэтому даже полностью неупорядоченная дипольная система микротрубочки цитоскелета (J_{ik} распределен случайно согласно $J_0 = \sum_{k=1}^z \tilde{J}_{ik} = 0, I_0 = \sum_{k=1}^z I_{ik} \neq 0$) обладает своего рода памятью. Так, если приложить к системе сильное внешнее поле $E_0 = (E_1, E_2, \dots, E_N)$, то система перейдет в состояние $\mathbf{S}(0) = (S_1(0), S_2(0), \dots, S_N(0))$, где $S_i(0) = \text{sign}(E_i)$. Если выключить внешнее поле, система перейдет в ближайший глобальный минимум $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T = (\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T, \langle \mathbf{S}_2^* \rangle_T, \dots, \langle \mathbf{S}_N^* \rangle_T)$, т.е. в состояние с наибольшим перекрытием с начальным образом $\mathbf{S}(0)$. Поскольку состояние $\mathbf{S}(0)$ никак не связано с распределением J_{ik} , то даже неупорядоченная дипольная система микротрубочки цитоскелета способна частично запомнить введенную в нее информацию (заключенную в конфигурации $\mathbf{S}(0)$).

2. Чтобы система лучше запомнила вводимую информацию (образ), следует должным образом подстроить случайные связи J_{ik} к вводимому образу. Пусть случайная величина J_{ik} , заданная на связи между узлами i и k , не зависит от того, какие J_{ik} находятся на других связях. В этом случае статистические свойства J_{ik} полностью определяются функцией распределения $f(J_{ik})$ на данной связи. Предположим, что $f(J_{ik})$ — гауссова функция распределения (71), которая задается двумя параметрами — средним значением \tilde{J}_{ik} и дисперсией I_{ik} (72).

Положим, мы хотим запомнить прототип образа, описываемый детерминированным вектором

$$\langle \mathbf{S}^* \rangle_T = (\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T, \langle \mathbf{S}_2^* \rangle_T, \dots, \langle \mathbf{S}_N^* \rangle_T), \quad (112)$$

где $\langle \mathbf{S}_i^* \rangle_T = \mathbf{e}_i \langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ — проекция $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ на \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i — i -й базисный вектор узельной системы координат). Для запоминания прототипа образа наложим на связи J_{ij} ограничения

$$\langle J_{ij} \rangle = \langle \mathbf{S}_i^* \rangle_T \langle \mathbf{S}_j^* \rangle_T. \quad (113)$$

Так как ограничения (113) симметричны по индексам i и j , то можем сформировать симметричную матрицу $\langle \mathbf{J} \rangle$ с детерминированными матричными элементами $\langle J_{ij} \rangle = \langle \mathbf{S}_i^* \rangle_T \langle \mathbf{S}_j^* \rangle_T$ и привести ее к диагональному виду с вещественными собственными значениями $\langle \lambda_j \rangle$. Для этого разложим произвольный вектор $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ по ортогональным собственным векторам $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$. В общем случае это разложение можно записать в виде

$$\langle \mathbf{S} \rangle_T = \langle \mathbf{U} \rangle_T \xi, \quad \langle \mathbf{S}_i \rangle_T = \sum_j \langle \mathbf{U} \rangle_T \xi_j \quad (114)$$

или более подробно как

$$\langle \mathbf{S} \rangle_T = \sum_j \xi_j \langle \mathbf{u}_j \rangle_T, \quad \xi_j = \langle \mathbf{u}_j \rangle_T \langle \mathbf{S} \rangle_T. \quad (115)$$

Матрица $\langle \mathbf{U} \rangle_T$ состоит из собственных векторов $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$

$$(\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T, \langle \mathbf{u}_2 \rangle_T, \dots, \langle \mathbf{u}_N \rangle_T = \langle \mathbf{U} \rangle_T, \langle \mathbf{J} \rangle \langle \mathbf{u}_j \rangle_T = \langle \lambda_j \rangle \langle \mathbf{u}_j \rangle_T, \quad (116)$$

а элементы матрицы $\langle \mathbf{U} \rangle_T$ определяются соотношением

$$\langle u_{kj} \rangle = \langle U_{kj} \rangle = \mathbf{e}_k \langle \mathbf{u}_j \rangle_T. \quad (117)$$

Здесь \mathbf{e}_k — k -й базисный вектор узельной системы координат. Индекс k позволяет различать отдельные компоненты вектора, а индекс j — различные собственные векторы.

Подчеркнем, что вектор $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ — случайная величина, тогда как собственные векторы $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ — величины детерминистические. Следовательно, входящий в разложение (114), (115) вектор ξ должен иметь компоненты, которые являются случайными величинами. Попробуем выразить сумму $\sum_{ij} \langle J_{ij} \rangle \langle S_j \rangle_T \langle S_j \rangle_T$ через новую переменную ξ . Для этого транспонируем вектор $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ (115), т.е. возьмем вектор

$$\langle \mathbf{S}^{\text{tr}} \rangle_T = \xi^{\text{tr}} \langle \mathbf{U}^{\text{tr}} \rangle_T, \quad (118)$$

где $\langle \mathbf{U}^{\text{tr}} \rangle_T$ — матрица, транспонированная относительно матрицы $\langle \mathbf{U} \rangle_T$. Тогда

$$\langle \mathbf{S}^{\text{tr}} \rangle_T \langle \mathbf{J} \rangle \langle \mathbf{S} \rangle_T = \xi^{\text{tr}} \langle \mathbf{U}^{\text{tr}} \rangle_T \langle \mathbf{J} \rangle \langle \mathbf{U} \rangle_T \xi. \quad (119)$$

Матрица $\langle \mathbf{U} \rangle_T$ позволяет записать уравнения (116) в виде единого матричного уравнения

$$\langle \mathbf{J} \rangle \langle \mathbf{U} \rangle_T = \langle \mathbf{U} \rangle_T \langle \mathbf{\Lambda} \rangle, \quad (120)$$

где матрица $\langle \mathbf{\Lambda} \rangle$ имеет элементы

$$\langle \Lambda_{kj} \rangle = \langle \lambda_k \rangle \delta_{kj}. \quad (121)$$

Так как $\langle \mathbf{J} \rangle$ — симметричная матрица, то справедливо соотношение

$$\langle \mathbf{U}^{\text{tr}} \rangle_T \langle \mathbf{U} \rangle_T = \mathbf{1}. \quad (122)$$

Учитывая (120), (121), из (119) получим, что

$$\langle \mathbf{S}^{\text{tr}} \rangle_T \langle \mathbf{J} \rangle \langle \mathbf{S} \rangle_T = \xi^{\text{tr}} \langle \mathbf{\Lambda} \rangle \xi. \quad (123)$$

Таким образом, преобразования (114), (120), (123) позволяют привести разложения (80), (81) к виду

$$\langle \tilde{E}_i \rangle_E = \tilde{E}_i^0 + 2 \langle \lambda_i \rangle \langle \xi_i \rangle_E = \tilde{E}_i^0 + 2 \langle \lambda_i \rangle \langle \text{th}(\tilde{E}_i/T) \rangle_E, \quad (124)$$

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{E}_i^2 \rangle_E - \langle \tilde{E}_i \rangle_E^2 \\ &= 4 \left\{ [\langle \lambda_i^2 \rangle - \langle \lambda_i \rangle^2] \langle \xi_i^2 \rangle_{T,E} + \langle \lambda_i \rangle^2 [\langle \xi_i^2 \rangle_{T,E} - \langle \xi_i \rangle_{T,E}^2] \right\} \\ &= 4 \left\{ [\langle \lambda_i^2 \rangle - \langle \lambda_i \rangle^2] \langle \text{th}^2(\tilde{E}_i/T) \rangle_{T,E} + \langle \lambda_i \rangle^2 [\langle \text{th}^2(\tilde{E}_i/T) \rangle_{T,E} - \langle \text{th}(\tilde{E}_i/T) \rangle_{T,E}^2] \right\}, \end{aligned} \quad (125)$$

$$\langle \xi_i \rangle_E = \int dE f_i(E) \text{th}(E/T) = \langle \text{th}(\tilde{E}_i/T) \rangle_E, \quad (126)$$

$$\langle \xi_i^2 \rangle_E = \int dE f_i(E) \text{th}^2(E/T) = \langle \text{th}^2(\tilde{E}_i/T) \rangle_E, \quad (127)$$

$$\begin{aligned} f_i(E) &= [2\pi(\langle \tilde{E}_i^2 \rangle_E - \langle \tilde{E}_i \rangle_E^2)]^{-1/2} \\ &\times \exp - \left\{ (E - \langle \tilde{E}_i \rangle_E)^2 [2(\langle \tilde{E}_i^2 \rangle_E - \langle \tilde{E}_i \rangle_E^2)]^{-1} \right\}, \end{aligned} \quad (128)$$

$$\langle \mathbf{E} \rangle = \langle \mathbf{U} \rangle_T \langle \tilde{\mathbf{E}} \rangle, \quad \langle \mathbf{E}_0 \rangle = \langle \mathbf{U} \rangle_T \tilde{\mathbf{E}}^0, \quad (129)$$

$$\sum_k \langle J_{ik} \rangle \langle S_k \rangle_{T,E} = \sum_k \langle \lambda_i \rangle \delta_k \langle \xi_k \rangle_{T,E} = \langle \lambda_i \rangle \langle \xi_i \rangle_{T,E}, \quad (130)$$

$$\begin{aligned} & \sum_j \langle J_{ij}^2 \rangle \langle S_j^2 \rangle_{T,E} - \sum_j \langle J_{ik} \rangle^2 \langle S_j^2 \rangle_{T,E} \\ &= \sum_j \langle \lambda_i^2 \rangle \delta_{ij} \langle \xi_j^2 \rangle_{T,E} - \sum_j \langle \lambda_i \rangle^2 \delta_{ij} \langle \xi_j \rangle_{T,E}^2. \end{aligned} \quad (131)$$

В отличие от случая полностью неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета ($J_i = J_0$, $I_i = I_0$), из наличия явной зависимости (130), $\langle \lambda_i \rangle$, $\langle \lambda_i^2 \rangle$ от i следует, что случайная дипольная система микротрубочки цитоскелета с памятью (с ограничениями на коэффициенты связи $\langle J_{ij} \rangle = \langle S_i^* \rangle_T \langle S_j^* \rangle_T$) обладает внутренней структурой, заложенной в коэффициентах связи.

Разумно предположить, что дипольное состояние $\langle S^* \rangle_T$ обладает энергией существенно более низкой, чем все другие состояния, и при достаточно низких температурах происходит фазовый переход, при котором дипольная система замерзает в этом состоянии. Т.е. если мы будем вычислять термодинамические средние псевдоспинов в узлах, то обнаружим, что величины $\langle S_i \rangle_T$ не равны нулю, хотя, разумеется, от узла к узлу они будут различными как по величине, так и по знаку. По этой причине параметр, описывающий среднюю поляризацию системы

$$S = (1/N) \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_T, \quad (132)$$

как и в параэлектрике, останется равным нулю, однако другой параметр

$$Q = (1/N) \sum_{i=1}^N \langle S_i^2 \rangle_T \quad (133)$$

не будет равным нулю. При этом, естественно, вся термодинамика системы в таком состоянии (наблюдаемые типа восприимчивости, теплоемкости и др.) будет существенно отличаться от параэлектрической. Временные релаксации, разумеется, могут оказаться аномально медленными, так как в той области фазового пространства, где система замерзла, может оказаться множество метастабильных состояний, разделенных барьерами различной (конечной) высоты.

Этот вариант, являющийся в принципе новым явлением в физике фазовых переходов в дипольных системах, тем не менее представляет собой сильно усложненный вариант ферроэлектрического фазового перехода. В обычном ферроэлектрике система „замерзает“ в состоянии, в котором все спины смотрят в одну сторону, а здесь она „замерзает“ в другом состоянии,

являющемся собственным вектором матрицы коэффициентов связи $\langle \mathbf{J} \rangle$. Можно в принципе представить себе, что существует некоторый (зависящий от коэффициентов связи $\langle J_{ij} \rangle$) поворот в N -мерном пространстве состояний $\langle \mathbf{U} \rangle_T = (\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T, \langle \mathbf{u}_2 \rangle_T, \dots, \langle \mathbf{u}_N \rangle_T)$, который переводит узельную систему координат с базисом \mathbf{e}_k в систему координат с базисом $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$. После этого состояние $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T = \langle \mathbf{S}^* \rangle_T$, в котором система замерзает, станет „упорядоченным“. Существующие вокруг многочисленных метастабильные состояния $(\langle \mathbf{u}_2 \rangle_T, \dots, \langle \mathbf{u}_N \rangle_T)$, разумеется, сильно усложняют картину по сравнению с ферроэлектриком, но качественно это ничего не меняет (кроме того, что временные релаксации становятся аномально медленными).

В приближении молекулярного поля уравнения (126), (127) являются уравнениями самосогласования, реализующими экстремум удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета $G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle)$

$$\begin{aligned} \partial G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle) / \partial \langle \xi_i \rangle &= \langle \xi_i \rangle \\ &- [2\pi]^{-1/2} \int dx \exp(-x^2/2) \text{th} \left[T^{-1}(\tilde{E}_0 + 2\langle \lambda_i \rangle \langle \xi_i \rangle \right. \\ &\left. + 2x \sqrt{\langle \lambda_i^2 \rangle \langle \xi_i^2 \rangle - \langle \lambda_i \rangle^2 \langle \xi_i \rangle^2} \right] = 0, \end{aligned} \quad (134)$$

$$\begin{aligned} \partial G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle) / \partial \langle \xi_i^2 \rangle &= \langle \xi_i^2 \rangle \\ &- [2\pi]^{-1/2} \int dx \exp(-x^2/2) \text{th}^2 \left[T^{-1}(\tilde{E}_0 + 2\langle \lambda_i \rangle \langle \xi_i \rangle \right. \\ &\left. + 2x \sqrt{\langle \lambda_i^2 \rangle \langle \xi_i^2 \rangle - \langle \lambda_i \rangle^2 \langle \xi_i \rangle^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (135)$$

Разлагая уравнения (134), (135) по степеням параметров порядка $\langle \xi_i \rangle$ и $\langle \xi_i^2 \rangle$ при $\tilde{E}_0 = 0$, восстановим разложение удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета $G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle)$ по $\langle \xi_i \rangle$ и $\langle \xi_i^2 \rangle$ и в окрестности трикритической точки

$$\begin{aligned} G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle) &= \sum_i [(1/2)\alpha_{1i} \langle \xi_i \rangle^2 + (1/4)\beta_{1i} \langle \xi_i \rangle^4 \\ &+ (1/2)\alpha_{2i} \langle \xi_i^2 \rangle^2 + (1/3)\beta_{2i} \langle \xi_i^2 \rangle^3 \\ &+ \text{члены} \sim \langle \delta \xi_i^2 \rangle \text{ и } \langle \delta \lambda_i^2 \rangle], \end{aligned} \quad (136)$$

$$\begin{aligned} \delta \xi_i^2 &= (\xi_i - \langle \xi_i \rangle)^2, \quad \delta \lambda_i^2 = (\lambda_i - \langle \lambda_i \rangle)^2, \\ \partial G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle) / \partial \langle \xi_i \rangle &= \alpha_{1i} \langle \xi_i \rangle + \beta_{1i} \langle \xi_i \rangle^3 \\ &+ \gamma_{1i} [\langle \xi_i \rangle \langle \delta \xi_i^2 \rangle + \langle \xi_i \rangle^3 \langle \delta \lambda_i^2 \rangle \langle \lambda_i \rangle^{-2}] = 0, \end{aligned} \quad (137)$$

$$\begin{aligned} \partial G(\langle \xi_i \rangle, \langle \xi_i^2 \rangle) / \partial \langle \xi_i^2 \rangle &= \alpha_{2i} \langle \xi_i^2 \rangle + \beta_{2i} \langle \xi_i^2 \rangle^2 \\ &+ \gamma_{2i} [\langle \xi_i \rangle^2 \langle \delta \xi_i^2 \rangle + \langle \xi_i \rangle^4 \langle \delta \lambda_i^2 \rangle \langle \lambda_i \rangle^{-2}] = 0, \end{aligned} \quad (138)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{1i} &= 1 - (2\langle \lambda_i \rangle / T) = (T - T_{ci}) / T_{ci}, \\ \beta_{1i} &= (8\langle \lambda_i \rangle^3 / 3T_{ci}^3), \quad \gamma_{1i} = (8\langle \lambda_i \rangle^3 / T_{ci}^3), \end{aligned} \quad (139)$$

$$\alpha_{2i} = 1 - (4\langle \lambda_i^2 \rangle / T^2) = 2(T - T_{fi}) / T_{fi},$$

$$\beta_{2i} = (32\langle \lambda_i^2 \rangle^2 / 3T_{fi}^4), \quad \gamma_{2i} = (128\langle \lambda_i \rangle^4 / 3T_{fi}^4), \quad (140)$$

где α_1, α_2 — коэффициенты, меняющие знак при изменении температуры, а коэффициенты $\beta_{1i}, \beta_{2i}, \gamma_{1i}, \gamma_{2i}$ — положительные. Здесь $T_{fi} = 2(\langle \lambda_i^2 \rangle)^{1/2} = 2(\langle \lambda_i \rangle^2 + \langle \delta \lambda_i^2 \rangle)^{1/2}$ — эффективная температура сегнетоэлектрического перехода в фазу дипольного стекла, $T_{ci} = 2\langle \lambda_i \rangle$ — эффективная температура сегнетоэлектрического перехода в собственное состояние $\langle \mathbf{u}_i \rangle_T$ матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$ микротрубочки цитоскелета. Поскольку дипольное состояние $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T = \langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ обладает энергией существенно более низкой ($\langle \lambda_1 \rangle$ больше $\langle \lambda_{i \neq 1} \rangle$), чем все другие собственные состояния $\langle \mathbf{u}_{i \neq 1} \rangle_T$, то при $T_{f1} = 2(\langle \lambda_1^2 \rangle)^{1/2} = 2(\langle \lambda_1 \rangle^2 + \langle \delta \lambda_1^2 \rangle)^{1/2}$ сначала происходит фазовый переход в фазу дипольного стекла, а затем при $T_{c1} = 2\langle \lambda_1 \rangle$ происходит фазовый переход в состояние $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T$, в котором дипольная система „замерзает“. Если в микротрубочке цитоскелета с памятью происходит сегнетоэлектрический переход в упорядоченное состояние $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T$, то в окрестности критической точки уравнения самосогласования (137), (138) имеют решения

$$\langle \xi_1 \rangle = [-\alpha_{11} / \beta_{11}]^{1/2} \quad \text{при } \alpha_{11} \leq 0, \quad (141)$$

$$\langle \xi_1 \rangle = 0 \quad \text{при } \alpha_{11} > 0,$$

$$\langle \xi_1^2 \rangle = (-\alpha_{21} / \beta_{21}) \quad \text{при } \alpha_{21} \leq 0, \quad (142)$$

$$\langle \xi_1 \rangle = 0 \quad \text{при } \alpha_{21} > 0.$$

Это означает, что в микротрубочке цитоскелета ниже $T_{f1} = 2(\langle \lambda_1^2 \rangle)^{1/2} = 2(\langle \lambda_1 \rangle^2 + \langle \delta \lambda_1^2 \rangle)^{1/2}$ сначала возникает первый отличный от нуля параметр порядка $\langle \xi_1^2 \rangle$, а затем ниже $T_{c1} = 2\langle \lambda_1 \rangle$ возникает второй отличный от нуля параметр порядка $\langle \xi_1 \rangle$.

Хорошо известно, что в окрестности фазового перехода динамика случайного параметра порядка ξ имеет релаксационный характер и подчиняется уравнению Ланжевена

$$\dot{\xi} = -\partial G(\xi) / \partial \xi + F(t), \quad (143)$$

$$G(\xi) = (\alpha/2)\xi^2 + (\beta/4)\xi^4, \quad (144)$$

где с учетом (136), (139) коэффициенты α, β принимают вид

$$\alpha = \alpha_{11}, \quad \beta = \beta_{11}, \quad (145)$$

а флуктуирующая сила с учетом (143), (144) характеризуется следующими свойствами:

$$\langle F(t) \rangle = 0,$$

$$\langle F(t)F'(t') \rangle = \langle \xi^2 \rangle \delta(t - t'). \quad (146)$$

Во многих приложениях, особенно когда задачи нелинейные, удобно перейти к уравнению Фоккера–Планка, записанному для функции распределения $P(\xi, t)$, которая описывает вероятность найти переменную ξ в момент времени t . Если предположить, что F имеет

гауссово распределение, то уравнение Фоккера–Планка, соответствующее уравнению (143), примет вид

$$\partial P(\xi, t)/\partial t = -\partial/\partial \xi \{[-\partial/\partial \xi G(\xi)]P(\xi, t)\} + (\langle \xi^2 \rangle / 2) [\partial^2/\partial \xi^2 P(\xi, t)]. \quad (147)$$

Нетрудно найти стационарное решение уравнения (147), определяемое выражением $\partial P(\xi, t)/\partial t = 0$, если выполняется граничное условие

$$P(\xi) \rightarrow 0 \text{ при } \xi \rightarrow \pm\infty. \quad (148)$$

Это стационарное решение имеет вид

$$P(\xi) = N \exp\{-2G(\xi)/\langle \xi^2 \rangle\}, \quad (149)$$

$$\langle \xi^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi P(\xi) \xi^2 \quad (150)$$

с нормировочным множителем, определяемым выражением

$$N^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp\{-2G(\xi)/\langle \xi^2 \rangle\}. \quad (151)$$

Выражение (149) означает, что стационарное поведение дипольной системы микротрубочки цитоскелета полностью определяется потенциалом $G(\xi)$, представимым в виде суммы двух членов (144) и величиной флуктуаций силы $\langle \xi^2 \rangle$. Максимумы решения $P(\xi)$ соответствуют минимумам потенциала $G(\xi)$.

Если мы хотим запомнить $L \gg N$ прототипов образов, описываемых детерминированными векторами

$$\langle \mathbf{S}_u^* \rangle = (\langle S_{u1}^* \rangle_T, \langle S_{u2}^* \rangle_T, \dots, \langle S_{uN}^* \rangle_T, \quad u = 1, \dots, L, \quad (152)$$

то для запоминания прототипов образов необходимо наложить на случайные связи J_{ij} ограничения

$$\langle J_{ij} \rangle = \sum_u \langle S_{ui}^* \rangle_T \langle S_{uj}^* \rangle_T. \quad (153)$$

Тогда аддитивный потенциал $G(\xi)$, зависящий от нескольких случайных параметров порядка ξ_u , имеет вид

$$G(\xi) = \sum_{u=1}^L [(\alpha_u/2)\xi_u^2 + (\beta_u/4)\xi_u^4], \quad (154)$$

а соответствующая стационарная функция распределения

$$P(\xi) = N \exp\{-2G(\xi)/\langle \xi^2 \rangle\}. \quad (155)$$

3. Критерий отбора характерных признаков образа в микротрубочке цитоскелета — принцип максимума информации с ограничениями-связями

Механизм сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета позволяет решить проблему представления и распознавания образов

в два этапа. При попадании образа в микротрубочку цитоскелета естественным образом происходит его разложение на характерные признаки, в результате чего каждому признаку ставится в соответствие символ $\langle S_i \rangle_T$ — термодинамическое среднее значение дипольного момента микротрубочки цитоскелета на узле i . На этом этапе обработки данных пространство признаков описывается узельной системой координат с базисом \mathbf{e}_i , а всему образу соответствует вектор образа $\langle \mathbf{S} \rangle_T$, который в узельной системе координат образует упорядоченный набор компонент $(\langle S_1 \rangle_T, \langle S_2 \rangle_T, \dots, \langle S_N \rangle_T)$. Компоненты вектора $\langle S_i \rangle_T$ принимают значения $-1/2$ или $+1/2$ при абсолютном нуле температур, а при конечной температуре они являются непрерывными величинами. На втором этапе, используя механизм фазового перехода, дипольная система микротрубочки релаксирует к ближайшему состоянию $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$, естественным путем разлагая образ на другие характерные признаки (по базису собственных векторов $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$), согласно которому каждому признаку ставится в соответствие параметр порядка ξ_j — проекция вектора $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ на вектор $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$.

В связи с тем что входящий образ может нести случайный шум, а сама дипольная система микротрубочки цитоскелета испытывает внутренние, например тепловые, флуктуации, мы имеем дело не с детерминистическим вектором $\langle \mathbf{S} \rangle_T$, а со случайным вектором \mathbf{S} , компонентами которого являются случайные величины с некоторой функцией распределения вероятности $p(\mathbf{S})$. Используя принцип максимума информации [25], получим функцию распределения вероятности $p(\mathbf{S})$ для микротрубочки цитоскелета, которая должна удовлетворять двум критериям:

— ограничениям на корреляционные функции, которые согласуются с измеряемыми средними величинами дипольной системы микротрубочки цитоскелета,

— выбору такого пространства характерных признаков образа, который соответствует минимуму подлежащей обработке информации в микротрубочке цитоскелета.

Для этого запишем выражение для информации в дипольной системе микротрубочки цитоскелета в виде [10]

$$I = - \sum_{\mathbf{S}} p(\mathbf{S}) \ln[p(\mathbf{S})]. \quad (156)$$

Суммирование идет по всем значениям, которые принимает случайная переменная \mathbf{S} . Способ определения $p(\mathbf{S})$ состоит в получении таких функций $p(\mathbf{S})$, которые согласуются с измеряемыми характеристиками дипольной системы микротрубочки. В нашем случае мы заведомо можем измерить, например, среднюю поляризацию микротрубочки. То есть первое ограничение (связь) имеет вид

$$\sum_{\mathbf{S}} p(\mathbf{S}) S_i = \langle S_i \rangle_C. \quad (157)$$

Разумеется, существует много различных функций $p(\mathbf{S})$, удовлетворяющих соотношению (157). Предположим,

что с подавляющей вероятностью реализоваться будут такие распределения $p(\mathbf{S})$, для которых величина информации (156) будет достигать максимума. Это означает, что с наибольшей вероятностью реализуются те функции распределения вероятностей $p(\mathbf{S})$, которые соответствуют наиболее беспорядочным конфигурациям дипольной системы микротрубочки и тем самым несут наибольшую информацию. Но в силу ограничения (157) принимать во внимание следует не все распределения. Если у нас имеется не одно, а несколько ограничений, то можно сделать обобщение. Например, пусть мы измерили корреляционные функции микротрубочки $Q_{ij} = \langle S_i S_j \rangle_C$, $V_{ijkl} = \langle S_i S_j S_k S_l \rangle_C$, поэтому ограничения-связи примет вид

$$Q_{ij} = \langle S_i S_j \rangle_C = \sum_S p(\mathbf{S}) S_i S_j, \quad (158)$$

$$V_{ijkl} = \langle S_i S_j S_k S_l \rangle_C = \sum_S p(\mathbf{S}) S_i S_j S_k S_l. \quad (159)$$

Кроме того, необходимо добавить обычное ограничение нормировки распределения вероятности

$$\sum_S p(\mathbf{S}) = 1. \quad (160)$$

Задачу нахождения экстремума выражения для информации микротрубочки цитоскелета (156) при ограничениях (157)–(160) можно решить с помощью метода множителей Лагранжа. Умножим левые части ограничения (157) на λ_i , ограничения (158) на λ_{ij} , ограничения (159) на λ_{ijkl} , ограничение (160) на $(1-\lambda)$ и возьмем сумму полученных произведений. Вычтем из этой суммы информацию I и проварьируем образовавшееся выражение по величинам $p(\mathbf{S})$

$$\delta \left[I - (\lambda - 1) \sum_S p(\mathbf{S}) - \sum_i \lambda_i \sum_S p(\mathbf{S}) S_i - \sum_{ij} \lambda_{ij} \sum_S p(\mathbf{S}) S_i S_j - \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} \sum_S p(\mathbf{S}) S_i S_j S_k S_l \right] = 0. \quad (161)$$

Дифференцируя по $p(\mathbf{S})$ и приравнявая полученное выражение нулю, получаем

$$-\ln[p(\mathbf{S})] - 1 - (\lambda - 1) - \sum_i \lambda_i S_i - \sum_{ij} \lambda_{ij} S_i S_j - \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} S_i S_j S_k S_l = 0. \quad (162)$$

Это соотношение может быть легко разрешено относительно $p(\mathbf{S})$

$$p(\mathbf{S}) = \exp(-\Phi),$$

$$\Phi = \left[\lambda + \sum_i \lambda_i S_i + \sum_{ij} \lambda_{ij} S_i S_j + \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} S_i S_j S_k S_l \right]. \quad (163)$$

Подставляя выражение (163) в условия (158), (159), получим

$$Q_{ij} = \langle S_i S_j \rangle_C = \partial \ln Z / \partial \lambda_{ij}, \quad (164)$$

$$V_{ijkl} = \langle S_i S_j S_k S_l \rangle_C = \partial \ln Z / \partial \lambda_{ijkl}, \quad (165)$$

$$\lambda = \ln Z, \quad (166)$$

$$bZ(\lambda_{ij} \lambda_{ijkl}) = \sum_S \exp \left[- \sum_i \lambda_i S_i - \sum_{ij} \lambda_{ij} S_i S_j - \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} S_i S_j S_k S_l \right].$$

Подставляя (163) в выражение для информации (156), получим максимальное значение информации микротрубочки цитоскелета

$$I_{\max} = \lambda \sum_S p(\mathbf{S}) + \sum_i \lambda_i \sum_S p(\mathbf{S}) S_i + \sum_{ij} \lambda_{ij} \sum_S p(\mathbf{S}) S_i S_j + \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} \sum_S p(\mathbf{S}) S_i S_j S_k S_l = \lambda + \sum_i \lambda_i \langle S_i \rangle_C + \sum_{ij} \lambda_{ij} Q_{ij} + \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} V_{ijkl}. \quad (167)$$

Таким образом, максимум информации может быть выражен через средние значения $\langle S_i \rangle_C$, $\langle S_i S_j \rangle_C$, $\langle S_i S_j S_k S_l \rangle_C$ и множители Лагранжа λ_i , λ_{ij} , λ_{ijkl} , следовательно, задача о нахождении $p(\mathbf{S})$ (163) и I_{\max} (167) для микротрубочки цитоскелета решена.

Поскольку в дипольной системе микротрубочки цитоскелета происходит сегнетоэлектрический фазовый переход, будем искать экстремум потенциала $\Psi(S)$

$$\partial \Psi / \partial S_i = 0. \quad (168)$$

В микротрубочке цитоскелета с памятью (153) Ψ может иметь несколько экстремумов (152), положение одного из которых обозначим вектором $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$. Имея в виду сегнетоэлектрический фазовый переход, выбираем $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ так, чтобы функция $\Phi(\mathbf{S}) = \Phi(\langle \mathbf{S} \rangle_T + \mathbf{w})$ обладала наибольшей симметрией относительно \mathbf{w} . Из принципа максимума информации следует, что такой набор приводит к несмещенным оценкам. Только более низкая симметрия выделяет некоторую структуру и тем самым приводит к смещению оценок. Другой способ определения $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ как вектора, указывающего положение соответствующего минимума, состоит в прослеживании эволюции $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ от параэлектрического (безструктурного) состояния путем изменения управляющего параметра — температуры. Полагая

$$S = \langle \mathbf{S}^* \rangle_T + \mathbf{w}, \quad (169)$$

в окрестности $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$, можем записать Φ в виде

$$\Phi(\lambda, \mathbf{S}) = \tilde{\Phi}(\tilde{\lambda}, \mathbf{w}), \quad (170)$$

$$\tilde{\Phi}(\tilde{\lambda}, \mathbf{w}) = \tilde{\lambda} + 0 + \sum_{ij} \alpha_{ij} w_i w_j + \sum_{ijkl} \beta_{ijkl} w_i w_j w_k w_l. \quad (171)$$

Старые коэффициенты и ограничения преобразуются в новые, например,

$$\alpha_{ij} = (1/2)[\partial^2\Phi/\partial S_i\partial S_j]_{\mathbf{s}=(\mathbf{s}^*)_T},$$

$$\tilde{Q}_{ij} = (1/2)\langle\partial^2\tilde{\Phi}(\tilde{\lambda}, \mathbf{w})/\partial\alpha_{ij}\rangle_C. \quad (172)$$

Так как ограничения (172) симметричны по индексам i и j , то множители Лагранжа также симметричны по этим индексам

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji}. \quad (173)$$

Следовательно, можно привести матрицу $\alpha = (\alpha_{ij})$ к диагональному виду с вещественными собственными значениями, разложив произвольный вектор \mathbf{w} по ортогональным собственным векторам \mathbf{u}_j матрицы α . В общем случае это разложение можно записать в виде

$$\mathbf{W} = \mathbf{U}\xi, \quad \mathbf{w} = \sum_j \xi_j \mathbf{u}_j, \quad \alpha \mathbf{u}_j = \alpha_j \mathbf{u}_j, \quad w_i = \sum_j U_{ij} \xi_j. \quad (174)$$

Подчеркнем, что вектор \mathbf{w} — случайная величина, тогда как собственные векторы \mathbf{u}_j — величины детерминированные. Следовательно, входящий в разложение (174) вектор ξ должен иметь компоненты, которые являются случайными величинами. Выразим сумму $\sum_{ij} \alpha_{ij} w_i w_j$ в правой части формулы (171) через новые переменные ξ_i аналогичным способом, что и в разд. 2. Поскольку матрица \mathbf{U} позволяет записать отдельно уравнения (174) в виде единого матричного уравнения

$$\alpha \mathbf{U} = \mathbf{U}\Lambda, \quad \Lambda_{kj} = \alpha_j \delta_{kj}, \quad (175)$$

получим, что

$$\mathbf{w}^{\text{tr}} \alpha \mathbf{w} = \xi^{\text{tr}} \Lambda \xi, \quad (176)$$

где \mathbf{w}^{tr} , ξ^{tr} — транспонированные векторы. Таким образом, преобразование (174), (175) позволяет привести разложение (171) к виду

$$\tilde{\Phi}(\tilde{\lambda} \mathbf{w}) = \Phi(\lambda, \xi), \quad (177)$$

$$\Phi(\lambda, \xi) = \tilde{\lambda} + 0 + \sum_{ij} \alpha_i \xi_i^2 + \sum_{ijkl} \beta_{ijkl} \xi_i \xi_j \xi_k \xi_l. \quad (178)$$

В результате получаем новую функцию распределения вероятности для микротрубочки цитоскелета: вместо формулы (163) она определяется выражением

$$P(\xi) = N \exp[-\Phi(\lambda, \xi)]. \quad (179)$$

В общем случае $\Phi(\lambda, \xi)$ имеет вблизи $\xi = 0$ седловую точку. Соответственно различаем положительные и отрицательные λ и записываем

$$\alpha_i \leq 0, i \rightarrow u \quad (\text{общее число таких } \lambda \text{ равно } N_u),$$

$$\alpha_i > 0, i \rightarrow s \quad (\text{общее число таких } \lambda \text{ равно } N_s). \quad (180)$$

Аналогия результатов микроскопической теории сегнетоэлектрического перехода в микротрубочке цитоскелета (154), (155) и выражений (177)–(179) позволяет

воспользоваться терминологией теории фазовых переходов. Индексы i , которые принадлежат $\alpha_i \leq 0$, заменим индексом u (unstable — неустойчивые) и обозначим через ξ_u параметры порядка. С другой стороны, значения i , которые соответствуют $\alpha_i > 0$, заменим индексом s (stable — устойчивые) и обозначим через ξ_s амплитуду подчиненной моды s . Придерживаясь этого разбиения, запишем $\Phi(\lambda, \xi)$ в виде

$$\Phi(\lambda, \xi) = \tilde{\lambda} + \Phi_u(\alpha_u, \xi_u) + \Phi_s(\alpha_s, \xi_s, \xi_u), \quad (181)$$

где правая часть относится только к параметрам порядка

$$\Phi_u(\lambda_u, \xi_u) = \sum_u \beta_u \xi_u^2 + \sum_{u,u',u'',u'''} \beta_{u,u',u'',u'''} \xi_u \xi_{u'} \xi_{u''} \xi_{u'''}. \quad (182)$$

Что касается $\Phi_s(\alpha_s, \xi_s, \xi_u)$, то эта часть имеет следующий вид:

$$\Phi_s(\alpha_s, \xi_s, \xi_u) = \sum_u \alpha_s \xi_s^2 + 4 \sum_{u,u',u'',u'''} \beta_{s,u',u'',u'''} \xi_s \xi_{u'} \xi_{u''} \xi_{u'''} + \text{суммы произведений } \xi_s \xi_{s'} \xi_{u''} \xi_{u'''} + \xi_s \xi_{s'} \xi_{s''} \xi_{u'''} + \xi_s \xi_{s'} \xi_{s''} \xi_{s'''} + \dots \quad (183)$$

Интеграл

$$\int \exp\{\Phi_s(\alpha_s, \xi_s, \xi_u)\} d^N \xi_s = g(\xi_u) > 0 \quad (184)$$

определяет функцию только параметров порядка ξ_u . Введем функцию h , определив ее соотношением

$$g(\xi_u) = \exp\{-h(\xi_u)\}, \quad (185)$$

и новую функцию W_s , задаваемую соотношением

$$h(\xi_u) + \Phi_s = W_s(\xi_u | \xi_s). \quad (186)$$

Это определение гарантирует, что величина

$$P(\xi_s | \xi_u) = \exp\{W_s(\xi_s | \xi_u)\} \quad (187)$$

нормирована в пространстве подчиненных мод при любом параметре порядка ξ_u . Чтобы разложение (181) оставалось неизменным при введении h , определим новую функцию W_u соотношением

$$\tilde{\lambda} + \Phi_u(\alpha_u, \xi_u) - h(\xi_u) = W_u(\xi_u). \quad (188)$$

В заключение запишем разложение (181) в виде

$$\Phi(\lambda, \xi) = W_u(\xi_u) + W_s(\xi_s | \xi_u). \quad (189)$$

Это позволяет нам получить соотношение

$$\exp\{-\Phi\} = P(\xi_u) P(\xi_s | \xi_u), \quad (190)$$

где

$$P(\xi_u) = \exp W_u, \quad (191)$$

а множитель $P(\xi_s | \xi_u)$ определяется соотношением (187).

Ясно, что $P(\xi_s | \xi_u)$ — условная вероятность, в то время как $P(\xi_u)$ — функция распределения только параметров порядка. То есть мы определили функцию распределения для параметров порядка, а также распределение условных вероятностей подчиненных мод для дипольной системы микротрубочки цитоскелета. Таким образом, функция распределения совместной вероятности равна

$$P(\xi_u, \xi_s) = \prod_s P(\xi_s | \xi_u) P(\xi_u). \quad (192)$$

Разложение (192) позволяет разложить информацию в дипольной системе микротрубочки цитоскелета на две части, одна из которых соответствует только параметрам порядка, а другая представляет собой сумму информации подчиненных мод, усредненных по распределению параметров порядка. Вблизи точки сегнетоэлектрического перехода информация, относящаяся к параметрам порядка, резко изменяется, в то время как информация, относящаяся к подчиненным модам, резкого изменения не испытывает [10]. Следовательно, вблизи точки сегнетоэлектрического перехода достаточно исследовать поведение информации микротрубочки цитоскелета, относящейся к параметрам порядка.

Запишем информацию в дипольной системе микротрубочки (156) в виде

$$I = - \sum_{\xi_u, \xi_s} P(\xi_u, \xi_s) \ln[P(\xi_u, \xi_s)]. \quad (193)$$

Подставляя в определение (193) выражение (192), получим

$$I = - \sum_{\xi_u, \xi_s} \prod_s P(\xi_s | \xi_u) P(\xi_u) \left\{ \ln[P(\xi_u)] + \sum_s \ln[P(\xi_s | \xi_u)] \right\}. \quad (194)$$

Используя условие перенормировки

$$\sum_{\xi_s} P(\xi_s | \xi_u) = 1, \quad (195)$$

можно записать выражение (194) в виде

$$I = I_u + \sum_{x, \xi_u} P(\xi_u) I_s(\xi_u), \quad (196)$$

где

$$I_u = - \sum_{\xi_u} P(\xi_u) \ln[P(\xi_u)] \quad (197)$$

— информация, относящаяся к параметрам порядка, в то время как

$$I_s = - \sum_{\xi_s} P(\xi_s | \xi_u) \ln[P(\xi_s | \xi_u)] \quad (198)$$

— информация, относящаяся к подчиненной подсистеме или подчиненной моде с индексом s . Величина I_s является информацией в предположении, что величина ξ_u принимает определенное значение. Это означает, что параметр порядка подчиняет моды особым образом, который гарантирует возникновение макроскопической

структуры — прототипа образа в дипольной системе микротрубочки цитоскелета через самоорганизацию.

Таким образом, вблизи точки сегнетоэлектрического перехода функция распределения вероятности для параметров порядка имеет вид

$$P(\xi_u) = N \exp\{-\Phi(\xi_u)\}, \quad (199)$$

$$\Phi(\xi_u) = \sum_u \alpha_u \xi_u^2 + \sum_{u, u', u'', u'''} \beta_{u, u', u'', u'''} \xi_s \xi_{u'} \xi_{u''} \xi_{u'''}, \quad (200)$$

где $\Phi(\xi_u)$ играет роль потенциала аналогично (154), (155). Для сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета достаточно учитывать первые четыре степени, хотя в исключительных случаях необходимо удерживать и более высокие степени. Вообще говоря, когда дипольная система обладает конкретной внутренней симметрией, это приводит к определенным соотношениям между коэффициентами членов каждого порядка в $\Phi(\xi_u)$.

Проведенные в разд. 2, 3 исследования устанавливают взаимосвязь между микроскопической теорией сегнетоэлектрического перехода в микротрубочке цитоскелета и макроскопическим подходом максимума информации в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, находящейся в тепловом равновесии. Исходным пунктом микроскопической теории и макроскопического подхода является функция распределения параметра порядка, содержащая под знаком экспоненты свободную энергию и обобщенный потенциал соответственно. Затем эта свободная энергия (потенциал) разлагается в ряд по степеням параметра порядка. Совершенно ясно, что при этом, учитывая моменты параметров порядка до четвертого включительно, приходим к тем же выражениям (199), (200), что и выше (154), (155). Таким образом, макроскопический подход максимума информации с ограничениями адекватен микроскопической теории сегнетоэлектрического перехода в микротрубочке цитоскелета с памятью.

4. Модели представления и распознавания образов в дипольной системе микротрубочки цитоскелета

Выясним теперь, чего мы достигли преобразованием от S к ξ с точки зрения информации в дипольной системе микротрубочки цитоскелета. Тогда для $T_{fu} > T > T_{cu}$ ($1 > \alpha_u > 0$) в (200) можно ограничиться только квадратичными членами по параметрам порядка, а правую часть (199) можно разложить в произведение

$$P(\xi) = \prod_u P_u(\xi_u), \quad (201)$$

где каждый множитель определяется выражением

$$P_u(\xi_u) = N_u \exp[-\alpha_u \xi_u^2], \quad (202)$$

и нормировочный коэффициент $N_u = (\alpha_u/\pi)^{1/2}$ выбирается так, чтобы множитель P_u был нормирован на единицу. Функция распределения, представленная в виде распределения (201), где множители определяются выражением (202), порождает корреляционную функцию

$$\langle \xi_u \xi_{u'} \rangle = (2\alpha_u)^{-1} \delta_{uu'}, \quad (203)$$

т.е. корреляционная матрица становится теперь диагональной.

Для непрерывного вектора \mathbf{S} информация микротрубочки цитоскелета определяется выражением

$$I = - \int d\mathbf{S} P(\mathbf{S}) \ln(\mathbf{S}), \quad (204)$$

которое с помощью проделанной выше процедуры может быть приведено к виду

$$I_u = - \int d\xi P(\xi) \ln[P(\xi)]. \quad (205)$$

Соотношение (201) позволяет записать выражение (205) как сумму отдельных вкладов

$$I_u = - \sum_j \int d\xi_j P_j(\xi_j) \ln[P_j(\xi_j)] \quad (206)$$

или кратко

$$I_u = \sum_u i_u. \quad (207)$$

Формула (202) позволяет сразу же вычислить информацию в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, вызвав ее через собственные значения α_u :

$$i_u = (-1/2) \ln(\alpha_u) + (1/2) \ln(\pi) + (1/2). \quad (208)$$

Из соотношения (208) заключаем, что наибольший вклад в информацию дает наименьшее собственное значение α_u ($1 > \alpha_u > 0$) и что полная информация в дипольной системе микротрубочки цитоскелета при $T_{fu} > T > T_{cu}$ представима в виде суммы некоррелированных вкладов парциальных информаций.

При $T < T_{cu}$ ($0 > \alpha_u > -1$) в (200) также можно ограничиться только квадратичными членами по параметрам порядка, а правую часть (199) можно разложить в произведение (201). Для этого воспользуемся методом перевала и запишем выражение для функции распределения в виде

$$P_u(\xi_u) = N_u \exp[-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4]. \quad (209)$$

Экстремум функции $-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4$ и, следовательно, $P_u(\xi_u)$ определяется условием

$$-2\alpha_u \xi_u - 4\beta_u \xi_u^3 = 0. \quad (210)$$

Решая уравнение (210), находим его ненулевые решения

$$\xi_0 = \pm(-\alpha_u/2\beta_u)^{1/2}. \quad (211)$$

Выберем пока знак „плюс“. Введем новую переменную η , определяемую соотношением

$$\xi = \xi_0 + \eta. \quad (212)$$

Разложение

$$-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4 = -\alpha_u \xi_0^2 - \beta_u \xi_0^4 + (1/2)[-2\alpha_u - 12\beta_u \xi_0^2] \eta^2 \quad (213)$$

позволяет записать функцию (209) в виде

$$P_u(\xi_u) = N_u \exp[(\alpha_u^2/4\beta_u^2) + 2\alpha_u \eta^2], \quad (214)$$

где нормировку следует выбирать в интервале $-\infty < \xi < +\infty$. Тогда нормировочный множитель определяется выражением

$$N_u = (-2\alpha_u/\pi) \exp(-\alpha_u^2/4\beta_u). \quad (215)$$

До сих пор мы рассматривали случай, когда функция $P_u(\xi_u)$ имеет только один максимум. Оценим сначала информацию для случая, когда может реализоваться только один максимум, т.е. когда мы искусственно нарушаем симметрию. Тогда информация в дипольной системе микротрубочки цитоскелета i_u легко вычисляется

$$i_u = (-1/2) \ln[-\alpha_u] + (1/2) \ln[\pi] + (1/2) \ln(2). \quad (216)$$

Вернемся к случаю, когда полная функция $P_u(\xi_u)$ имеет два максимума, т.е. когда система может находиться в одном из двух состояний. Ясно, что такая система способна хранить информацию, так как одному состоянию можно поставить в соответствие нуль, а другому единицу. Нормирующий множитель N_u определяется выражением

$$N_u \int_0^{+\infty} d\xi \exp[-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4] = 1. \quad (217)$$

Так как максимумы расположены симметрично относительно начала $\xi = 0$, можно заменить левую часть условия (217) интегралом

$$2N_u \int_0^{+\infty} d\xi \exp[-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4]. \quad (218)$$

При условии, что мы умеем вычислять интеграл в случае, когда имеется только один максимум, интеграл от 0 до $+\infty$ можно заменить интегралом от $-\infty$ до $+\infty$

$$\int_0^{+\infty} d\xi \exp[-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4] \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp[-\alpha_u \xi_u^2 - \beta_u \xi_u^4]. \quad (219)$$

Как было показано выше, этот интеграл может быть аппроксимирован величиной

$$\exp(\alpha_u^2/4\beta_u) \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \exp[2\alpha_u \eta^2] = (-\pi/2\alpha_u)^{1/2} \exp(\alpha_u^2/4\beta_u). \quad (220)$$

Тогда из (217) нормировочный множитель равен

$$N_u = (-\pi/2\alpha_u)^{-1/2} \exp(-\alpha_u^2/4\beta_u), \quad (221)$$

и информация в дипольной системе микротрубочки цитоскелета i_u легко вычисляется

$$i_u = (-1/2) \ln[-2\alpha_u] + (1/2) \ln[\pi] + (1/2) \ln(2) + 1/2. \quad (222)$$

Сравним выражение (222) при $T < T_{cu}$ ($0 > \alpha_u > -1$) с выражением (208) при $T_{fu} > T > T_{cu}$ ($1 > \alpha_u > 0$). Разность между ними равна

$$\Delta i_u = \ln(2). \quad (223)$$

Поскольку для определения информации „по всем правилам“ нам следовало выбрать не натуральный логарифм, а логарифм с основанием 2, поэтому

$$\Delta i_u = \log_2(2) = 1. \quad (224)$$

Это означает, что дипольная система микротрубочки цитоскелета с функцией распределения (209), находящаяся ниже T_{cu} , может хранить один бит, в то время как система с функцией распределения (202), находящаяся выше T_{cu} , не может хранить информацию.

Обсудим теперь, что это значит для представления и распознавания образов в микротрубочке цитоскелета. Сначала при поступлении образа дипольная система микротрубочки цитоскелета ставит ему в соответствие вектор \mathbf{S} в узельном пространстве признаков (представляет образ), затем дипольная система релаксирует к ближайшему состоянию $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$, выбирая другое пространство признаков — параметров порядка (распознает образ). С помощью механизма фазового перехода микротрубочка цитоскелета осуществляет нелинейное преобразование одного пространства характерных признаков (узельного) в другое пространство характерных признаков нового типа (параметров порядка). Новые признаки обладают тем весьма важным свойством, что информация в микротрубочке цитоскелета становится суммой парциальных вкладов (207). На этой стадии обработки информации в микротрубочке цитоскелета уже можно обратиться к методам, развитым в теории численного распознавания образов.

Разложение S по векторам $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$, выбранными, как в характеристических уравнениях (114), (174), называется разложением Карунена–Лоэва. На языке теории распознавания образов механизм фазового перехода естественным образом осуществляет разложение Карунена–Лоэва, т. е. дает нам способ систематического разложения образа на некоррелированные компоненты (признаки). Как будет показано ниже, это позволяет существенно уменьшить число компонент, или признаков вектора образа \mathbf{S} . Соответствующая разложению Карунена–Лоэва система координат $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ в микротрубочке цитоскелета является детерминистической. Компоненты или, точнее говоря, коэффициенты разложения

Карунена–Лоэва ξ_u содержат всю информацию, необходимую для восстановления образа в микротрубочке цитоскелета. Коэффициенты с наименьшим собственным значением α_u матрицы \mathbf{A} (наибольшим собственным значением λ_u матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$) содержат наибольшую информацию относительно вектора образа \mathbf{S} .

Следовательно, с помощью механизма фазового перехода микротрубочка цитоскелета обрабатывает только коэффициенты с наименьшими собственными значениями α_u , в то время как коэффициентами с большими собственными значениями α_u , содержащими пренебрежимо малое количество информации об образе, пренебрегает. Иначе говоря, можно утверждать, что процесс фазового перехода в микротрубочке цитоскелета осуществляет нелинейное преобразование вектора \mathbf{S} в систему координат параметров порядка, сопровождающееся колоссальным сокращением обработки данных. Коль скоро система координат Карунена–Лоэва определена микротрубочкой цитоскелета, она одинакова для всех образов, подлежащих разбиению на классы (образы, принадлежащие одному и тому же классу, считаются эквивалентными, или неразличимыми).

Таким образом, носителями всей информации, позволяющей дискриминировать образы, являются коэффициенты ξ_u разложения вектора \mathbf{S} , причем наибольшее количество информации об образе содержится в небольшом числе этих коэффициентов ξ_u . Используя нелинейный механизм фазового перехода, микротрубочка цитоскелета обходит вычислительные трудности, связанные с большим объемом входных данных задачи распознавания образов, резко уменьшая этот объем, поскольку последующее решение принимается в пространстве признаков гораздо меньшей размерности. Использование информации (207) обладает еще одной очень важной особенностью: чем сильнее различаются скорости изменения собственных значений $\partial \alpha_u / \partial T$, тем меньше вклад последних членов ряда парциальных информационных i_u , тем больше сокращение обработки информации при их отбрасывании. Наоборот, при близких величинах скоростей изменения собственных значений $\partial \alpha_u / \partial T$ существен вклад последних членов ряда парциальных информационных i_u , и учет только первых коэффициентов ξ_u лишь незначительно уменьшает неопределенность и обработку данных.

Используя полученные представления и результаты, сформулируем модель процесса представления распознавания образов в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, испытывающей ниже критической температуры $T_c = 317$ К [10, 11] сегнетоэлектрический переход. В этом случае необходимо принять во внимание только те $\alpha_u < 0$, для которых при температуре человеческого тела $T_0 = 310$ К выполняется условие $(T_{cu}/T_0) = (2\langle \lambda_u \rangle / T_0) > 1$, которое позволит нам воспользоваться интерпретацией алгоритма распознавания образов как механизма фазового перехода.

При попадании образа в микротрубочку цитоскелета естественным путем происходит его разложение на

характерные признаки, в результате чего каждому признаку ставится в соответствие символ $\langle S_i \rangle_T$ — термодинамическое среднее значение дипольного момента микротрубочки цитоскелета на узле i , а всему образу соответствует вектор образа $\langle \mathbf{S} \rangle_T = (\langle S_1 \rangle_T, \langle S_2 \rangle_T, \dots, \langle S_N \rangle_T)$ (происходит представление образа). Компоненты этого вектора $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ принимают значения $-1/2$ или $+1/2$ при абсолютном нуле температур, а при конечной температуре они являются непрерывными величинами, которые могут быть закодированы с помощью действительных чисел.

Мы предполагаем также, что задано L прототипов образов, которые представлены векторами $\langle \mathbf{S}_u^* \rangle_T = (\langle S_{u1}^* \rangle_T, \langle S_{u2}^* \rangle_T, \dots, \langle S_{uN}^* \rangle_T)$ (152), где индекс u принимает значения от 0 до L , причем векторы различных прототипов ортогональны: $\langle \mathbf{S}_u^* \rangle_T \langle \mathbf{S}_{u'}^* \rangle_T = \delta_{uu'}$. В зависимости от числа прототипов образов их линейная оболочка совпадает со всем узельным подпространством признаков размерности N , либо с его подпространством. В последнем случае приходится вводить дополнительные („лишние“) векторы прототипов $\langle \mathbf{S}_s^* \rangle_T$, у которых индекс s принимает значения от $L+1$ до N , а условие $(T_{cs}/T_0) = (2\langle \lambda_s \rangle/T_0) < 1$ и соответственно $\alpha_s > 0$.

Когда предъявляется образ, который должен быть распознан микротрубочкой, из-за шума, неполноты данных (отсутствия некоторых признаков) и т.д. этот образ может не совпадать ни с одним из векторов $\langle \mathbf{S}_u^* \rangle_T$ (152), но оказаться достаточно близко к одному из прототипов образов $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T$, т.е. к одной из осей нового пространства признаков — параметров порядка. Используя механизм фазового перехода, дипольная система релаксирует к ближайшему состоянию $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T = \mathbf{S}_1^*$, устанавливая уже в другом пространстве признаков — параметров порядка, какой хранящейся в памяти микротрубочки цитоскелета структуре отвечает определенный микротрубочкой вектор $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ и следовательно, входящий образ (происходит распознавание образа).

Условимся описывать предъявленный образ вектором $\mathbf{S}(0)$, где аргумент 0 относится к начальному моменту времени $t = 0$ процесса распознавания образов. Найдем уравнение для зависящего от времени вектора $\mathbf{S}(t)$, которое описывало бы эволюцию этого вектора из начального состояния $\mathbf{S}(0)$ в конечное состояние \mathbf{S}_f , согласующееся с ближайшим из прототипов векторов $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T$. Это уравнение будет построено с таким расчетом, чтобы вектор $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T$, о котором идет речь, был тем же самым вектором, к которому вектор $\mathbf{S}(0)$ подходит ближе всего. То есть величина $[\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T \langle \mathbf{S}(0) \rangle_T] / [|\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T| |\langle \mathbf{S}(0) \rangle_T|]$ имеет наименьшее значение.

Очевидно, что уравнение, описывающее процесс распознавания образов в микротрубочке цитоскелета, совпадает с динамическим уравнением (уравнением эволюции), для случайного параметра порядка \mathbf{S} имеет релаксационный характер

$$\dot{\mathbf{S}} = -\partial/\partial \mathbf{S}[\Phi(\mathbf{S})] + \mathbf{F}(t). \quad (225)$$

Как обычно, предполагаем, что флуктуирующие силы обладают следующими свойствами:

$$\langle \mathbf{F}(t) \rangle = 0, \quad \langle F_i(t) F_j(t') \rangle = Q_i \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (226)$$

Входящий в уравнение (225) потенциал $\Phi(\mathbf{S})$ определяется выражением

$$\Phi = \left[\sum_{ij} \lambda_{ij} S_i S_j + \sum_{ijkl} \lambda_{ijkl} S_i S_j S_k S_l \right]. \quad (227)$$

Уравнение (225) в окрестности сегнетоэлектрического фазового перехода, описываемого случайным параметром порядка ξ с компонентами $\xi_i(t) = \langle \mathbf{S}_i^* \rangle \mathbf{S}(t)$, принимает вид

$$\dot{\xi} = -\partial/\partial \xi [\Phi_u(\xi)] + \mathbf{F}(t). \quad (228)$$

Входящий в уравнение (228) потенциал $\Phi_u(\xi)$ определяется выражением

$$\Phi_u(\xi) = \sum_{i=1}^N [(\alpha_i/2)\xi_i^2 + (\beta_i/4)\xi_i^4]. \quad (229)$$

Первое слагаемое Φ_u „затягивает“ вектор \mathbf{S} в подпространство, натянутое на прототипы образов, поскольку только для первых ξ_1, \dots, ξ_L переменных $\alpha_u < 0$, а для последующих ξ_{L-1}, \dots, ξ_N переменных $\alpha_s > 0$. На языке теории фазовых превращений это просто пространство параметров порядка. Наконец, второе слагаемое Φ_u обеспечивает насыщение, т.е. величина $|\mathbf{S}|$ в конце концов притягивается к аттрактору — неподвижной точке на оси, например $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle_T$. Простейшие зависимости потенциала $\Phi_u(\xi)$ и параметра порядка ξ от времени изображены на рис. 6.

На качественном уровне покажем, каким образом построенная выше модель (225)–(229) описывает распознавание структур в микротрубочке. В общем виде произвольный вектор образа $\mathbf{S}(t)$ может быть записан в виде

$$\mathbf{S}(t) = \mathbf{S}(0) + \sum_u \xi_u(t) \mathbf{u}_u + \sum_s \xi_s(t) \mathbf{u}_s. \quad (230)$$

Очевидно, что ξ_u в общем случае на порядок величины больше, чем ξ_s , т.е. развивающаяся во времени дипольная структура определяется главным образом первой суммой (по u) в разложении (230), которую назовем остовом моды. Пусть возник только один параметр порядка ξ_u , а соответствующий ему вектор прототипа $\mathbf{u}_u = \mathbf{S}_u^*$ имеет в узельной системе координат компоненты

$$u_{uj} = \sin(k_u a j), \quad (231)$$

где k_u — волновой вектор, j — номер узла дипольной цепочки, a — межузельное расстояние. Тогда разложение (230) по существу вырождается в более краткое выражение

$$S_j(t) = S_j(0) + \xi_0(t) \sin(k_u a j). \quad (232)$$

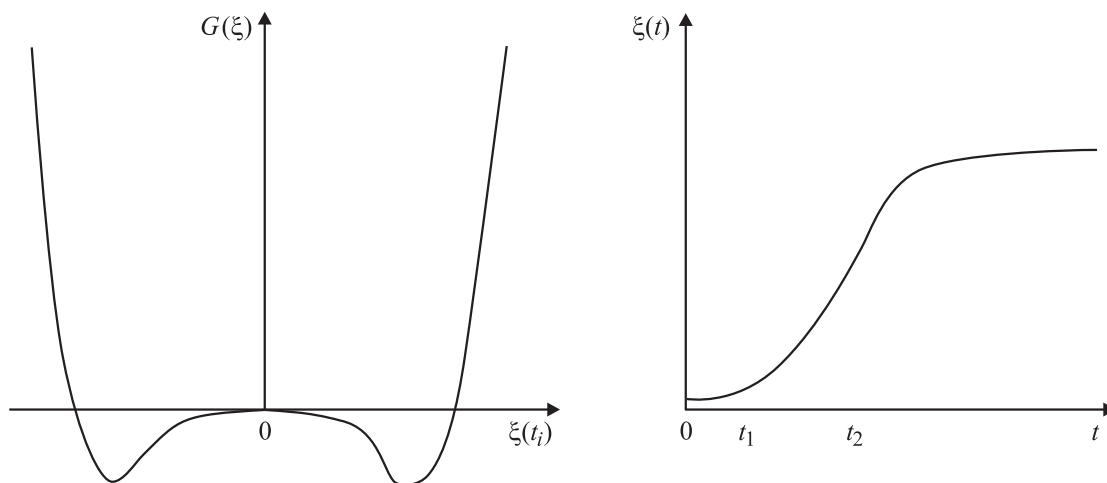


Рис. 6. Схемы: потенциала, в котором может двигаться фиктивная частица с координатой ξ (слева); временной зависимости параметра порядка ξ (справа).

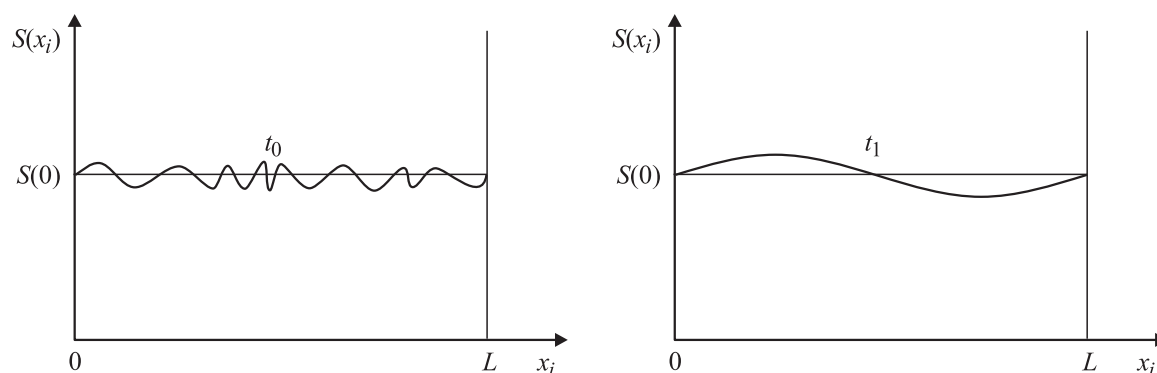


Рис. 7. Эволюция пространственной структуры $S(x_i)$ во времени. Параметр порядка ξ изменяется согласно рис. 6.

Поскольку ξ_u удовлетворяет уравнению (228), то оно описывает рост ξ_u начальной флуктуации до окончательных размеров (рис. 7). Совершенно очевидно, что при большом числе параметров порядка или более сложных функциях u_{ij} могут возникать гораздо более сложные структуры, чем те, которые описываются формулами (231), (232). Таким образом, развитая выше модель эволюции вектора \mathbf{S} описывает представление и распознавание образов как физический процесс возникновения и развития пространственных структур дипольного момента микротрубочки цитоскелета.

Описанная модель распознавания образов допускает интересную интерпретацию с точки зрения фазовых переходов. Если дипольная система находится в неупорядоченном состоянии ($T_{fu} > T > T_{cu}$) и приближается к точке перехода, то флуктуации параметров порядка нарастают и становятся особенно большими по сравнению с другими модами. Именно при такой интерпретации можно утверждать, что коэффициенты ξ_u , отвечающие условию $\alpha_u < 0$, соответствуют параметрам порядка, определяющим образ. В окрестности критической точки T_{cu} функция распределения вероятности вполне ха-

рактеризуется моментами первого и второго порядков в полном согласии с предлагаемой теорией.

5. Обсуждение результатов и выводы

Проблема построения физических основ, модели подсистемы микротрубочки цитоскелета, ответственной за ее уникальные сегнетоэлектрические свойства, является сложной междисциплинарной и требует для своего решения привлечения представлений и формализмов из различных разделов теоретической физики, удовлетворения двум критериям:

— при описании изолированной молекулы тубулина необходимо принять во внимание два самых низких энергетических уровня молекулы тубулина, связанных квазирезонансным переходом, и оператор дипольного момента молекулы тубулина с такими свойствами, что изолированная молекула тубулина должна быть неполярна;

— при построении последовательной модели межмолекулярных сил в микротрубочке цитоскелета необходимо принять во внимание нейтральность и неполярность

изолированных молекул тубулина, отсутствие обменного взаимодействия, поэтому больший вклад в энергию электростатического взаимодействия будет вносить резонансное диполь-дипольное взаимодействие, более дальнедействующее, чем поляризационное.

Проанализировав полученные выше экспериментальные и теоретические результаты, выводы, учитывая критерии, приступим к описанию физических основ, модели дипольной подсистемы микротрубочки цитоскелета, приняв во внимание, что большинство сегнетоэлектрических явлений можно объяснить взаимодействием связанных электрических зарядов (электрон-ионных пар) между собой и с электромагнитным полем. Примем, что эти заряды содержатся во всех электрически нейтральных, неполярных молекулах тубулина микротрубочки цитоскелета и осциллируют около определенных положений равновесия в центре молекулы с малыми амплитудами. Иначе говоря, активная в смысле сегнетоэлектрического перехода электрон-ионная пара в молекуле тубулина ведет себя, как простой осциллятор, который взаимодействует с электрон-ионной парой в другой молекуле тубулина посредством своего дипольного момента.

Сегнетоэлектрический переход — это процесс превращения из высокотемпературной параэлектрической фазы со средним дипольным моментом, равным нулю, в низкотемпературную ферроэлектрическую фазу со средним дипольным моментом, отличным от нуля. Поскольку дипольный момент связанной электрон-ионной пары есть произведение заряда электрона на его смещение, то в предлагаемой модели этот процесс связан с изменением равновесного положения электрона, активного в смысле сегнетоэлектрического перехода. В высокотемпературной фазе этот электрон полностью делокализован в одночастичном потенциале молекулы тубулина (равновероятно может занимать одно из двух возможных положений), т.е. вероятность обнаружить молекулу тубулина в состояниях α -тубулин и β -тубулин одинакова. Ниже критической температуры (в низкотемпературной фазе) равновесное положение электрона смещается относительно его равновесного положения в высокотемпературной фазе, которое совпадает с положением единичного положительного заряда.

Равновесные положения электрона в высокотемпературной фазе X_i (относительно которых определяются смещения электронов u_i) образуют N узлов одномерной цепочки (спирали) с периодом a . Предполагается, что дипольные моменты взаимодействуют только со своими ближайшими соседями посредством своих дипольных моментов и находятся в двухъямном одночастичном потенциале $V(u_i)$, качественная зависимость которого от смещения u_i изображена на рис. 3. Разумно предположить, что этот потенциал имеет характерные значения высоты барьера $\varepsilon_a \approx 4.3 \cdot 10^{-21}$ J (порядка тепловой энергии электрона при температуре человеческого тела), высоты боковой стенки $224\varepsilon_a \approx 9.6 \cdot 10^{-19}$ J (порядка энергии выхода электрона из молекулы тубулина).

Можно представить себе, что этот двухъямный потенциал обусловлен неактивной при сегнетоэлектрическом переходе частью структуры молекулы тубулина. Для простоты можно предположить, что потенциал имеет одноосную анизотропию, которая эффективно ограничивает смещения электронов одним направлением, например по оси x . Оценка показывает, что электрон в левой потенциальной яме молекулы тубулина имеет одно связанное состояние — основное состояние с энергией $-E_0 = 0.044\varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ J, поэтому можно говорить о сегнетоэлектрическом фазовом переходе в дипольной системе микротрубочки тубулина с критической температурой перехода $T_k = 317$ K [10].

В двухъямном потенциале изолированной молекулы тубулина связанный электрон может находиться только в основном состоянии — дублете (состоянии с энергией E_+ , симметричной волновой функцией Ψ_+ и состоянии с энергией E_- , антисимметричной волновой функцией Ψ_- , рис. 4). Для барьера, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала, с высотой, равной $V = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, и шириной 4 nm расщепление энергий $\hbar\omega = E_- - E_+$ отлично от нуля, а туннельный эффект велик. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состояниями электрона велика, и мы имеем дело с квантовым движением электрона в двухъямном потенциале молекулы тубулина, в котором существует связанное (основное) состояние электрона (дублет) с энергиями $\varepsilon_+ = 2.26 \cdot 10^{-21}$ J, $\varepsilon_- = 1.61 \cdot 10^{-21}$ J, расщеплением $\hbar\omega = 6.5 \cdot 10^{-22}$ J, частотой $\omega = 6.5 \cdot 10^{12}$ s $^{-1}$, длиной волны самопроизвольного излучения $\lambda = 2.9 \cdot 10^{-4}$ m.

Таким образом, наряду с тепловыми (классическими) перескоками электрона между левой и правой потенциальными ямами в молекуле тубулина с частотой $\omega(T_k) \approx \omega_e = 5 \cdot 10^{13}$ s $^{-1}$ существуют дополнительные квантовые переходы электрона с частотой туннелирования $\omega = 6.5 \cdot 10^{12}$ s $^{-1}$, совместно определяющие дискретные конформационные степени свободы молекулы. Следовательно, волновая функция электрона в двухъямном потенциале молекулы тубулина должна зависеть не только от непрерывной пространственной координаты x , но и от одной дискретной переменной, указывающей значение проекции псевдоспина на ось квантования псевдоспина z . Для нашего случая двухуровневой системы волновая функция электрона будет иметь вид псевдоспинора $\Psi(x, S^z)$, 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 .

Состояние системы из двух электронов молекул a и b при отсутствии взаимодействия описывается волновой функцией $\Psi_a^a \Psi_b^b$, где индексы α, β могут принимать значения $+, -$. В основном состоянии электрона (дублете) волновые функции электронов соседних молекул пере-

кряваются слабо. Поскольку нас интересуют только малые электронные возбуждения ($\Psi_+^a \Leftrightarrow \Psi_-^a, \Psi_+^b \Leftrightarrow \Psi_-^b$), поэтому будем пренебрегать перекрытием волновых функций электронов соседних молекул. Основное состояние системы из двух электронов изолированных молекул описывается волновой функцией $\Psi_+^a \Psi_+^b$ и имеет энергию $E_+ + E_+$. Возбужденное состояние системы, соответствующее возбуждению одного электрона $\Psi_+^a \Psi_-^b$, имеет энергию $E_+ + E_-$. Это состояние двукратно вырождено, так как любой из электронов может находиться в возбужденном состоянии Ψ_- . Возбужденное состояние системы, соответствующее возбуждению двух электронов $\Psi_-^a \Psi_-^b$, имеет энергию $E_- + E_-$.

Произвольное резонансное диполь-дипольное взаимодействие \hat{V} вызывает переходы между всеми состояниями $\Psi_+^a \Psi_+^b, \Psi_+^a \Psi_-^b, \Psi_-^a \Psi_+^b, \Psi_-^a \Psi_-^b$, а матричные элементы $V_{\alpha\beta\gamma\delta}^{ij}$ представляют собой соответствующие резонансные интегралы диполь-дипольного взаимодействия, которые зависят не только от расстояний между центрами тяжести молекул i и j , но и от их квантовых состояний. Поскольку матричные элементы оператора дипольного момента неполярной молекулы тубулина обладают свойствами $\langle \pm | \mathbf{d} | \pm \rangle = 0, \langle \pm | \mathbf{d} | \mp \rangle \neq 0$ в гамильтониане резонансного диполь-дипольного взаимодействия в приближении, когда одночастичный потенциал тубулина имеет одноосную анизотропию по оси x и в представлении локализованных состояний $\phi_L \phi_R$ останутся только члены $S_i^z S_j^z$, где S_i^z — характеризует разницу между заселенностями левого и правого равновесных положений потенциала молекулы тубулина i .

Если ввести сферический угол Θ — угол между направлениями оси диполя (орт \mathbf{x}) и нормированного на единицу вектора $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$, соединяющего центры тяжести молекул, то при $\Theta = 0$ (связь 0–1 рис. 5, когда направление вектора \mathbf{R} , соединяющего центры тяжести молекул тубулина, совпадает с направлением вектора дипольного момента молекулы тубулина (ось x)) энергия резонансного диполь-дипольного взаимодействия отрицательна и максимальна, что приводит к ферроэлектрическому упорядочению дипольных моментов на этой связи и притяжению молекул.

В представлении локализованных состояний ϕ_L, ϕ_R z -компонента псевдоспина задает оператор дипольного момента, y -компонента — оператор локального тока, а x -компонента — оператор туннелирования. Это эквивалентно утверждению, что математическое ожидание S_i^z характеризует разницу между заселенностями левого и правого равновесных положений, в то время как математическое ожидание S_i^x — разницу в заселенностях симметричного и антисимметричного состояний.

Гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета в приближении, когда одночастичный потенциал тубулина имеет одноосную анизотропию по оси x , и в представлении локализованных состояний ϕ_L, ϕ_R совпадает с гамильтонианом модели Изинга в поперечном поле.

Поскольку частота тепловых перескоков электрона между левой и правой потенциальными ямами потенциала тубулина ($\omega(T_k) \approx \omega_e = 5 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$) больше, чем частота квантовых переходов электрона (частота туннелирования $\omega = 6.5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$), то для последовательного изучения равновесных сегнетоэлектрических свойств микротрубочки цитоскелета при конечных температурах исследуем случай отсутствия туннелирования в двухъямном потенциале молекулы тубулина. В этом случае переход электрона из одной потенциальной ямы в другую в молекуле тубулина при температуре человеческого тела имеет тепловой флуктуационный характер, а систему 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 $S_i^z = +1/2, S_i^z = -1/2$. Гамильтониан системы взаимодействующих классических дипольных моментов молекул тубулина можно записать в виде суммы двухчастичных взаимодействий классических псевдоспинов $S_i^z S_j^z$.

Резонансное диполь-дипольное взаимодействие является знакопеременным, и разные пары псевдоспинов могут взаимодействовать друг с другом как ферроэлектрическим, так и антиферроэлектрическим образом. Для характерных значений физических величин модели значения коэффициентов псевдоспиновой связи ближайших соседей равны: $J_1 = 1.8 \cdot 10^{-21} \text{ J}, \Theta_1 = 0 \text{ deg}; J_2 = -3.6 \cdot 10^{-22} \text{ J}, \Theta_2 = 58.2 \text{ deg}; J_3 = 6.7 \cdot 10^{-22} \text{ J}, \Theta_3 = 45.6 \text{ deg}$;

Проблема определения основного состояния дипольной системы микротрубочки состоит в том, что коэффициенты связи J_{ij} являются случайными по знаку и заморожены, т.е. в данном конкретном образце они зафиксированы. При этом возникает следующее явление. Рассмотрим три произвольных взаимодействующих между собой псевдоспина и будем считать, что взаимодействия J_1, J_2, J_3 одинаковы по величине, но могут иметь разный знак. Если все три константы связи J_1, J_2, J_3 оказались положительными либо две из них отрицательными (т.е. когда произведение взаимодействий вдоль треугольника положительно), то основное состояние (минимум энергии) этой трехспиновой системы будет единственным.

Если произведение взаимодействий вдоль треугольника оказалось отрицательным, то основное состояние такой системы оказывается вырожденным: если мы зафиксируем первый псевдоспин, например, „вверх“, и будем совершать обход вокруг треугольника, выставляя ориентацию псевдоспинов в соответствии с заданными взаимодействиями, то ориентация последнего, третьего, псевдоспина окажется неопределенной — энергии состояний „вверх“ и „вниз“ будут одинаковы. Для ситуации, когда два взаимодействия положительны, третье отрицательно: если первый псевдоспин смотрит „вверх“, то в соответствии с J_1 второй псевдоспин должен смотреть „вверх“, однако для третьего псевдоспина возникает неопределенность: в соответствии с J_2 он должен смотреть „вниз“, а в соответствии с J_3 — „вверх“.

То же самое явление вырождения основного состояния происходит в любой замкнутой цепочке, состоящей из произвольного числа псевдоспинов, если произведение коэффициентов связи вдоль цепочки отрицательно. Связи, соединяющие дипольные моменты (1, 2), (2, 3), (4, 5), (5, 6) на рис. 5, взаимная ориентация которых не соответствует знаку их констант связи, являются фрустрированными. Наличие фрустрированных связей — важнейшая особенность неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета.

Таким образом, микротрубочка цитоскелета может быть дипольным стеклом, в котором основную роль играют взаимодействие ближайших соседей с антиферроэлектрическим коэффициентом связи $J_2 < 0$ и взаимодействие следующих за ближайшими соседями с ферроэлектрическим коэффициентом $J_1, J_2 > 0$. Дипольная система представляет собой цепочку псевдоспинов, между которыми осуществляются конкурирующие антиферро- и ферроэлектрическое взаимодействия.

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, какие J_{ik} находятся на других связях. В этом случае статистические свойства J_{ik} полностью определяются функцией распределения $f(J_{ik})$ на данной связи. Обычно предполагают, что $f(J_{ik})$ — гауссова функция распределения. В предлагаемой модели между разными парами псевдоспинов происходят случайные взаимодействия разных знаков — ферро- или антиферроэлектрические. 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 ферроэлектрически, а другая — антиферроэлектрически. Возникает вопрос, может ли происходить при таком взаимодействии какой-нибудь фазовый переход. Ясно, что ни ферроэлектрического, ни антиферроэлектрического, ни какого-нибудь геликоидального упорядочения в такой системе быть не может. На первый взгляд вообще никакого фазового перехода представить себе нельзя. Однако Андерсон и Эдвардс показали, что в системе с гамильтонианом Изинга 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: $S_i = \langle S_i^z \rangle_T$, где $\langle \dots \rangle_T$ — обычное термодинамическое усреднение по Гиббсу. После усреднения по Гиббсу получаем случайную функцию координат S_i . Легко показать, что в параэлектрической области $S_i = 0$ во всех узлах микротрубочки цитоскелета. При снижении температуры может возникнуть отличная от нуля во всех узлах случайная функция S_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 S_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 S_i . Как всякая случайная функция, она описывается своими моментами. Полностью описать статистические свойства случайной функции можно, лишь зная все ее моменты. Это слишком сложно, поэтому обычно используют лишь простейшие моменты: $S_i = \langle S_i \rangle_C$, $Q_{ij} = \langle S_i S_j \rangle_C$, а $\langle \dots \rangle_C$ — усреднение по конфигурациям. Очевидно, что S_i есть средний дипольный момент в узле i , $Q_{ij} \equiv Q_{ji}$ определяет средний квадрат дипольного момента в узле i , Q_{ij} — корреляционные функции.

Характер низкотемпературной фазы, в которую происходит переход в полностью неорганизованной дипольной системе микротрубочки цитоскелета (J_{ik} распределены случайно), определяется соотношением параметров среднего значения J_0 и дисперсии I_0 : если $J_0 > I_0$, то возникает ферромагнитная фаза, если $J_0 < I_0$, то реализуется фаза дипольного стекла. Энергия фазы дипольного стекла в микротрубочке цитоскелета обладает большим количеством глобальных и локальных минимумов в пространстве конфигураций дипольных моментов. Поэтому даже полностью неорганизованная дипольная система обладает своего рода памятью. Так если ввести в такую систему начальный образ $\mathbf{S}(0)$, то эволюционируя, система перейдет в ближайший глобальный минимум \mathbf{S}^* — в состояние с наибольшим перекрытием с $\mathbf{S}(0)$. Поскольку состояние $\mathbf{S}(0)$ никак не связано с распределением J_{ik} , то даже неорганизованная дипольная система способна частично запомнить введенную в нее информацию, заключенную в конфигурации $\mathbf{S}(0)$.

Чтобы дипольная система микротрубочки цитоскелета лучше запомнила вводимую информацию (образ), следует должным образом подстроить случайные связи J_{ik} к вводимому образу. Положим, мы хотим запомнить прототип образа, описываемого детерминированным вектором $\langle \mathbf{S}^* \rangle_T$, с компонентами $\langle S_i^* \rangle_T$ в узельной системе координат. Для этого наложим на связи J_{ij} ограничения $\langle J_{ij} \rangle = \langle S_i^* \rangle_T \langle S_j^* \rangle_T$. Так как эти ограничения симметричны по индексам i и j , то мы можем сформировать симметричную матрицу $\langle \mathbf{J} \rangle$ с детерминированными матричными элементами $\langle J_{ij} \rangle$ и преобразовать ее к диагональному виду с вещественными собственными значениями $\langle \lambda_i \rangle$, детерминированными собственными векторами $\langle \mathbf{u}_i \rangle_T$. Из наличия явной зависимости $\langle \lambda_i \rangle$, $\langle \lambda_i^2 \rangle$, от i следует, что случайная дипольная система с памятью (с ограничениями на связи) обладает соответствующей пространственной структурой, зафиксированной в коэффициентах связи.

Сегнетоэлектрический переход в микротрубочке цитоскелета с памятью, являющийся новым явлением в физике фазовых переходов в дипольных системах тем не менее представляет собой сильно усложненный вариант ферроэлектрического фазового перехода. В обычном ферроэлектрике система „замерзает“ в состоянии, в котором все псевдоспины смотрят в одну сторону, а здесь она „замерзает“ в некотором другом состоянии $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T$, являющемся собственным вектором матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$. Существует некоторый зависящий от связей $\langle J_{ik} \rangle$ поворот в N -мерном пространстве состояний $\langle \mathbf{U} \rangle_T$, который переводит узельную систему координат с базисом \mathbf{e}_i в систему координат параметров порядка с базисом $\langle \mathbf{u}_i \rangle_T$. После этого поворота состояние $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T = \langle \mathbf{S}^* \rangle_T$, в котором система „замерзает“, станет „упорядоченным“. Существующие другие метастабильные состояния $(\langle \mathbf{u}_2 \rangle_T, \dots, \langle \mathbf{u}_N \rangle_T)$, разумеется, сильно усложняют картину по сравнению с ферроэлектриком, но качественно это ничего не меняет (кроме того, что временные релаксации становятся аномально медленными).

Эффективная температура перехода в фазу дипольного стекла микротрубочки цитоскелета равна $T_{fi} = 2(\langle \lambda_i^2 \rangle)^{1/2}$, а эффективная температура перехода в собственное состояние $\langle \mathbf{u}_i \rangle_T$ равна $T_{ci} = 2\langle \lambda_i \rangle$. Поскольку дипольное состояние $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T = \langle \mathbf{S}^* \rangle_T$ обладает энергией, существенно более низкой ($\langle \lambda_1 \rangle > \langle \lambda_{i \neq 1} \rangle$), чем все другие собственные состояния $\langle \mathbf{u}_{i \neq 1} \rangle_T$, то ниже T_{f1} сначала происходит фазовый переход в фазу дипольного стекла и возникает первый отличный от нуля параметр порядка $\langle \xi_1^2 \rangle$, а затем ниже T_{c1} происходит фазовый переход в состояние $\langle \mathbf{u}_i \rangle_T$ и возникает второй отличный от нуля параметр порядка $\langle \xi_1 \rangle$. В окрестности критической точки фазового перехода динамика случайного параметра порядка ξ_1 имеет релаксационный характер и подчиняется уравнению Ланжевена, а функция распределения $P(\xi_1, t)$, которая описывает вероятность найти переменную ξ_1 в момент времени t , — уравнению Фоккера–Планка. Стационарное поведение дипольной системы микротрубочки цитоскелета полностью определяется свободной энергией $G(\xi_1) = (\alpha_1/2)\xi_1^2 + (\beta_1/4)\xi_1^4$ и величиной флуктуаций силы $\langle \xi_1^2 \rangle$. Максимумы стационарного решения $P(\xi_1)$ соответствуют минимумам $G(\xi_1)$.

Зависимость параметра порядка ξ_1 от времени описывает рост ξ_1 от начальной флуктуации до окончательных размеров (рис. 6, 7). Поскольку дипольная система находится в окрестности точки перехода, то флуктуации параметров порядка нарастают и становятся особенно большими по сравнению с другими подчиненными модами. Именно при такой интерпретации можно утверждать, что коэффициенты ξ_u , отвечающие условию $\alpha_u < 0$, соответствуют параметрам порядка, определяющим образ. Очевидно, что при большом числе параметров порядка ξ_u или более сложных функциях u_{ij} могут возникать очень сложные пространственные структуры дипольного момента микротрубочки цитоскелета.

Входящий образ несет случайный шум, а сама дипольная система микротрубочки цитоскелета испытывает внутренние флуктуации, поэтому мы имеем дело не с детерминистическим вектором $\langle \mathbf{S} \rangle_T$, а со случайным вектором \mathbf{S} , компонентами которого являются случайные величины с некоторой функцией распределения вероятности $p(\mathbf{S})$. Согласно принципу максимума информации, с подавляющей вероятностью реализоваться будут такие распределения $p(\mathbf{S})$, для которых величина информации I будет достигать максимума. Это означает, что с наибольшей вероятностью реализуются те функции распределения вероятностей $p(\mathbf{S})$, которые соответствуют наиболее беспорядочным конфигурациям дипольной системы микротрубочки и тем самым несут наибольшую информацию. Но в силу наличия естественных физических ограничений следует принимать во внимание не все распределения. Функция распределения вероятности $p(\mathbf{S})$ для микротрубочки цитоскелета должна удовлетворять двум критериям: ограничениям на корреляционные функции, которые согласуются с измеряемыми средними величинами дипольной системы; выбору такого пространства характерных признаков образа, который соответствует минимуму подлежащей обработке информации.

Существует взаимосвязь между микроскопической теорией сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета с памятью и макроскопическим подходом максимума информации с ограничениями-связями. Исходным пунктом как микроскопической теории, так и макроскопического подхода являются физические ограничения-связи (память), функция распределения параметра порядка, содержащая под знаком экспоненты свободную энергию и потенциал соответственно. Затем эта свободная энергия (потенциал) разлагается в ряд по степеням параметра порядка, при этом, учитывая моменты параметров порядка до четвертого включительно, мы приходим к эквивалентным выражениям. Таким образом, подход максимума информации с ограничениями-связями адекватен микроскопической теории сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета с памятью.

Используя физические основы и модель дипольной системы микротрубочки цитоскелета, сформулируем модели представления и распознавания образов в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, испытывающей ниже критической температуры $T_c = 317 \text{ K}$ [10] сегнетоэлектрический переход. В этом случае необходимо принять во внимание только те α_u и соответственно ξ_u , для которых при температуре человеческого тела $T_0 = 310 \text{ K}$ выполняется условие $(T_{cu}/T_0) = (2\langle \lambda_u \rangle)/T_0 > 1$, $\alpha_u < 0$. Выполнение этого условия позволит нам воспользоваться дипольной системой, резонансным диполь-дипольным взаимодействием, механизмом фазового перехода в качестве реальной физической системы, причины, механизма представления и распознавания образов в микротрубочке цитоскелета.

Проблему представления образов дипольная система микротрубочки цитоскелета решает с помощью физического процесса перестройки своей пространственной структуры под действием входного образа. При поступлении образа в микротрубочку ему ставится в соответствие вектор образа $\langle \mathbf{S} \rangle_T$, компоненты которого дипольная система определяет, разлагая образ на характерные признаки, в результате чего каждому признаку ставится в соответствие символ $\langle S_i \rangle_T$ — термодинамическое среднее значение дипольного момента микротрубочки цитоскелета на узле i . На этом этапе обработки данных пространство признаков описывается узельной системой координат с базисом \mathbf{e}_i , а всему образу соответствует вектор образа $\langle \mathbf{S} \rangle_T$, который в узельной системе координат образует упорядоченный набор компонент $(\langle S_1 \rangle_T, \langle S_2 \rangle_T, \dots, \langle S_N \rangle_T)$. Компоненты вектора $\langle S_i \rangle_T$ принимают значения $-1/2$ или $+1/2$ при абсолютном нуле температур, а при конечной температуре они являются непрерывными величинами, которые могут быть закодированы с помощью действительных чисел. Пусть задано L прототипов образов, которые представлены векторами $\langle \mathbf{S}_u^* \rangle_T = (\langle S_{u1}^* \rangle_T, \langle S_{u2}^* \rangle_T, \dots, \langle S_{uN}^* \rangle_T)$, где индекс u принимает значения от 0 до L . В зависимости от числа прототипов образов их линейная оболочка совпадает со всем узельным пространством признаков размерности N , либо с его подпространством. В последнем случае приходится вводить дополнительные („лишние“) векторы прототипов $\langle \mathbf{S}_s^* \rangle_T$, у которых индекс s принимает значения от $L+1$ до N и выполняется условие $(T_{cs}/T_0) = (2\langle \lambda_s \rangle_T / T_0) < 1$ и соответственно $\alpha_s > 0$.

Затем, используя механизм фазового перехода, дипольная система микротрубочки релаксирует к ближайшему состоянию $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$, естественным путем разлагая образ на другие характерные признаки (по базису собственных векторов $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$). Каждому признаку ставится в соответствие случайный параметр порядка ξ_j — проекция вектора $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ на вектор $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$. Поскольку при температуре T_0 только L коэффициентов ξ_u являются параметрами порядка, а остальные $N-L$ коэффициентов ξ_s соответствуют подчиненным модам, то микротрубочка устанавливает уже в другом пространстве признаков — параметров порядка, какой хранящейся в памяти микротрубочки структуре отвечает определенный микротрубочкой вектор $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ и, следовательно, входящий образ. Таким образом, с помощью механизма фазового перехода осуществляется нелинейное преобразование (проектирование) одного пространства характерных признаков (узельного) с размерностью N в другое пространство характерных признаков (параметров порядка) с размерностью $L \ll N$. Новое пространство признаков имеет невысокую размерность, хотя все образы при этом отчетливо различимы. Невысокая размерность пространства параметров порядка означает, что обработке подлежит не слишком большое количество данных.

Новые признаки обладают тем важным свойством, что информация в дипольной системе микротрубочки

цитоскелета становится суммой парциальных вкладов, которую можно разложить на две части, одна из которых соответствует только параметрам порядка, а другая представляет собой сумму информации подчиненных мод. Вблизи точки сегнетоэлектрического перехода информация, относящаяся к параметрам порядка, резко изменяется, в то время как информация, относящаяся к подчиненным модам, резкого изменения не испытывает. Следовательно, вблизи точки фазового перехода достаточно исследовать поведение информации микротрубочки цитоскелета, относящейся только к параметрам порядка.

Согласно методам, развитым в теории численного распознавания образов, разложение \mathbf{S} по векторам $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$, выбранным как в характеристическом уравнении, называется разложением Карунена-Лоэва. На языке теории распознавания образов микротрубочка цитоскелета естественным образом осуществляет разложение Карунена-Лоэва, т.е. дает нам способ систематического разложения образа на некоррелированные компоненты (признаки). Это позволяет существенно уменьшить число компонент или признаков вектора образа \mathbf{S} . Соответствующая разложению Карунена-Лоэва система координат $\langle \mathbf{u}_j \rangle_T$ является детерминистической. Компоненты или, точнее говоря, коэффициенты разложения Карунена-Лоэва ξ_u содержат всю информацию, необходимую для восстановления образа в микротрубочке цитоскелета. Коэффициенты с наименьшим собственным значением α_u матрицы \mathbf{a} (наибольшим собственным значением λ_u матрицы $\langle \mathbf{J} \rangle$) содержат наибольшую информацию относительно вектора образа \mathbf{S} . Осуществляя статистическое взвешивание с весом $\approx e^{\alpha}$ при распознавании образа, микротрубочка цитоскелета обрабатывает только коэффициенты с наименьшими собственными значениями α_u , в то время как коэффициентами с большими собственными значениями α_u , содержащими пренебрежимо малое количество информации об образе, пренебрегает.

Носителями всей информации, позволяющей дискриминировать образы, являются коэффициенты ξ_u разложения вектора \mathbf{S} , причем наибольшее количество информации об образе содержится в небольшом числе этих коэффициентов ξ_u . Используя нелинейный механизм фазового перехода, микротрубочка цитоскелета обходит вычислительные трудности, связанные с большим объемом входных данных задачи распознавания образов, резко уменьшая этот объем, поскольку последующее решение принимается в пространстве признаков гораздо меньшей размерности. Парциальное представление информации обладает еще одной очень важной особенностью: чем сильнее различаются скорости изменения собственных значений $\partial \alpha_u / \partial T$, тем меньше вклад последних членов ряда парциальных информаций i_u , тем больше сокращение обработки данных при их отбрасывании. Наоборот, при близких величинах скоростей изменения собственных значений $\partial \alpha_u / \partial T$ существен вклад последних членов ряда парциальных информаций i_u , и учет только первых коэффициентов ξ_u лишь незначительно уменьшает неопределенность и обработку данных.

Пусть предъявленный образ описывается вектором $\mathbf{S}(0)$, где аргумент 0 относится к начальному моменту времени $t = 0$ процесса распознавания образов. Тогда уравнение, описывающее процесс распознавания образов в микротрубочке цитоскелета, совпадает с динамическим уравнением (уравнением эволюции) Ланжевена для случайного параметра порядка $\mathbf{S}(t)$, которое имеет релаксационный характер и описывается с помощью потенциала $G(\xi_u) = \sum [(\alpha_u/2)\xi_u^2 + (\beta_u/4)\xi_u^4]$.

Первое слагаемое G „затягивает“ вектор \mathbf{S} в подпространство, натянутое на прототипы образов, поскольку только для первых ξ_1, \dots, ξ_L переменных $\alpha_u < 0$, а для последующих ξ_{L+1}, \dots, ξ_N переменных $\alpha_s > 0$. На языке теории фазовых превращений это просто пространство параметров порядка. Наконец, второе слагаемое G обеспечивает насыщение, т.е. величина $|\mathbf{S}|$ в конце концов притягивается к аттрактору — неподвижной точке на оси, например $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle$. Простейшие зависимости потенциала G от ξ и зависимости параметра порядка ξ от времени изображены на рис. 6.

Когда предъявляется образ $\mathbf{S}(0)$, который должен быть распознан микротрубочкой, из-за шума, неполноты данных (отсутствия некоторых признаков) и т.д. этот образ может не совпадать ни с одним из векторов прототипов $\langle \mathbf{S}_u^* \rangle$, но оказаться достаточно близко к одному из прототипов образов \mathbf{S}_1^* , т.е. к одной из осей нового пространства признаков — параметров порядка. Используя механизм фазового перехода, дипольная система релаксирует к ближайшему состоянию $\langle \mathbf{u}_1 \rangle_T$, устанавливая уже в другом пространстве признаков — параметров порядка, какой хранящейся в памяти микротрубочки структуре отвечает определенный микротрубочкой вектор $\langle \mathbf{S} \rangle_T$ и, следовательно, входящий образ.

Из предлагаемой модели вытекают важные выводы:

— дипольная система микротрубочки цитоскелета представляет входной образ с помощью физического процесса перестройки своей пространственной структуры и ставит ему в соответствие вектор $\langle \mathbf{S}(0) \rangle_T$, компоненты которого $\langle S_i(0) \rangle_T$ она определяет, используя статистическое взвешивание, как термодинамическое среднее дипольного момента микротрубочки цитоскелета на узле i ;

— если начальный образ $\mathbf{S}(0)$, то дипольная система микротрубочки цитоскелета дополняет его до полного вектора прототипа $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle$, т.е. действует как ассоциативная память;

— если в памяти дипольной системы микротрубочки цитоскелета хранятся прототипы образов $\langle \mathbf{S}_u^* \rangle$, а системе предъявляется образ, описываемый вектором $\langle \mathbf{S}(0) \rangle_T$, то система превращает образ $\langle \mathbf{S}(0) \rangle_T$ в ближайший к нему прототип $\langle \mathbf{S}_1^* \rangle$. Следовательно, дипольная система осуществляет распознавание образов.

Список литературы

- [1] Пенроуз Р. Тени разума: в поисках науки о сознании. Ижевск: ИКИ, 2005. 690 с.
- [2] Hameroff S., Penrose R. // J. Conscious. Stud. 1994. N 1. P. 91–118.
- [3] Благодатских В.И., Гаряев П.П., Маслов М.Ю., Решетняк С.А., Щеглов В.А. // Laser Phys. 1996. Vol. 6. N 4. P. 621–653.
- [4] Sataric M.V., Tuszynski J.A., Zakula R.B. // Phys. Rev. E. 1993. Vol. 48. N 1. P. 589–597.
- [5] Broun J.A., Tuszynski J.A. // Ferroelectrics. 1999. Vol. 220. P. 141–155.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1989. 521 с.
- [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. 8. С. 52–59.
- [10] Слядников Е.Е. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 7. С. 1–12.
- [11] Слядников Е.Е. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 5. С. 32–39.
- [12] Ален Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М.: Мир, 1978. 223 с.
- [13] Каплан И.Г. Введение в теорию молекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
- [14] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1982. 620 с.
- [15] Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1982. 646 с.
- [16] Финкельштейн А.В. Физика белка. Курс лекций: Учеб. пособие для вузов. М.: Кн. дом „Университет“, 2002. 376 с.
- [17] Волькенштейн М.В. Биофизика. М.: Наука, 1988. 591 с.
- [18] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 521 с.
- [19] Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.И. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.
- [20] Андреев А.В., Емельянов В.И., Ильинский Ю.А. Кооперативные явления в оптике. М.: Наука, 1988. 420 с.
- [21] Орленко Е.В., Матисов Б.Г. Температурная зависимость интенсивности сверхизлучения // ЖЭТФ. 1999. Т. 116. Вып. 4. С. 1148–1160.
- [22] Edwards S.F., Anderson R.W. // J. Phys. F. 1975. Vol. 5. P. 965–974.
- [23] Parisi G. // J. Stat. Phys. 1980. Vol. 23. P. 49–58.
- [24] Гмурман В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Высшее образование, 2006. 479 с.
- [25] Хакен Г. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985. 423 с.