

О взаимосвязи физических и информационных характеристик в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета

© Е.Е. Слядников

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

(Поступило в Редакцию 10 января 2007 г. В окончательной редакции 16 июня 2008 г.)

Развита микроскопическая модель и исследована взаимосвязь физических и информационных характеристик в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета. Рассчитаны критическая температура, удельная свободная энергия, удельная средняя энергия, удельная теплоемкость, информация, приращение информации, эффективность дипольной системы как функции температуры.

Сформулированы принципы функционирования нейрона.

PACS: 87.16.Ka

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, 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].

Каждая микротрубочка 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. Размеры димера составляют приблизительно $8 \times 4 \times 4 \text{ nm}$, а его молекулярный вес около 110 ppm [1,2]. Димер тубулина может существовать в двух (по крайней мере) различных геометрических конфигурациях, называемых конформациями. Конформации эти, по всей видимости, обусловлены тем, что в центре димера (в его „безводной части“) имеется электрон, который может занимать одно из двух возможных положений. Для того чтобы произошло „переключение“ из одной конформации в другую, достаточно, чтобы один электрон „перескочил с места на место“.

В экспериментальных исследованиях (см., например, [1,2]), выполненных при физиологической температуре и посвященных поискам пьезоэлектрических эффектов в живых системах, было обнаружено, что микротрубочка цитоскелета обладает дипольным моментом. Массивы микротрубочек цитоскелета обнаруживают сегнетоэлектрические свойства, ориентируются под действием как внешнего, так и внутриклеточного электрического поля. Каждая молекула тубулина, из которой построены микротрубочки цитоскелета, обладает дипольным моментом величиной около 100 D. Микротрубочки цитоскелета оптически мерцают при

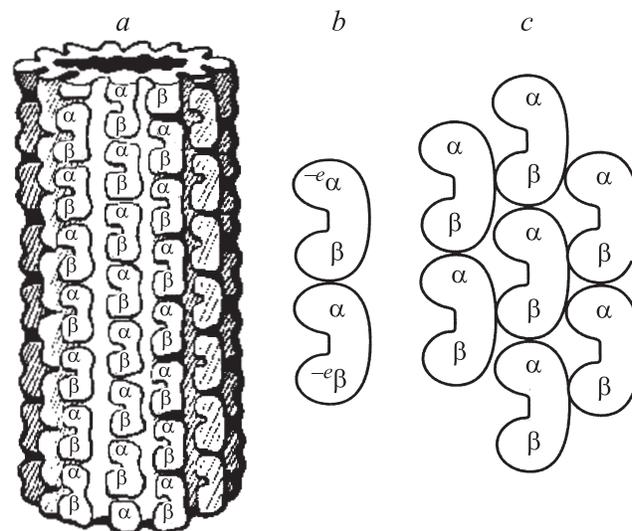


Рис. 1. Схемы: спиральной структуры микротрубочки цитоскелета (a); молекулы тубулина в различных конформациях с противоположными дипольными моментами (b); ближайшего окружения молекулы тубулина (c) [1,2].

метаболической активности, чрезвычайно чувствительны к электромагнитному излучению миллиметрового диапазона длин волн, в них обнаружены солитонные возбуждения, вызванные когерентным электромагнитным излучением [3]. Все эти экспериментально полученные результаты требуют объяснения с точки зрения теории сегнетоэлектричества.

Одна из первых теоретических моделей описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета, предполагающая существование фазового перехода при некоторой критической температуре T_c , была предложена в работе [4]. Считалось, что причина фазового перехода заключается в наличии упорядочивающего взаимодействия между дипольными моментами тубулина, которые при понижении температуры, когда разупорядочивающее влияние теплового движения становится слабее взаимодействия, образуют упорядоченное состояние с отличной от нуля поляризацией. Эта двумерная модель системы взаимодействующих диполей основывалась на приближении эффективного поля и в континуальном приближении привела к решению в виде сегнетоэлектрической доменной стенки. 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 эти методы 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 одномерные модели информационных белковых нанополимеров, учитывающие флуктуации поляризации, двухъямный характер потенциала в молекуле тубулина и возбуждение конформационных степеней свободы [8]. При исследовании реальной низкоразмерной наносистемы желательнее использовать теоретические методы, с помощью которых точно решена задача о фазовом переходе, например, в двумерной решетке Изинга [9] или в многокомпонентном классическом нелинейном поле [10], зависящем от одной пространственной координаты.

Недавно была предложена микроскопическая модель дипольной системы микротрубочки цитоскелета [11], в которой в качестве причин возникновения упорядочения наряду с диполь-дипольным взаимодействием принята во внимание роль двухъямного потенциала в молекуле тубулина. Эта модель обладает такими физическими свойствами, из которых возникает способность микротрубочки к интеллектуальной обработке информации, например, функция распознавания образов, которая является фундаментальным свойством живой природы, от клеточного уровня до высших психических функций человека. Построена фазовая диаграмма сегнетоэлектрического состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета при $T = 0$. Показано, 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:

- 1) сегнетоэлектрическая,
- 2) антисегнетоэлектрическая,
- 3) дипольное стекло.

Для характерных значений параметров микротрубочки цитоскелета (концентрация антиферромагнитных псевдоспиновых связей $\nu = 1/3$, отношение констант связи $\lambda = J_2/J_1 = -0.15$) основное состояние дипольной системы микротрубочки цитоскелета может быть сегнетоэлектриком или дипольным стеклом. В последнем случае это приводит к расщеплению основного состояния дипольной системы на большое число низлежащих по энергии состояний, в результате чего дипольная система может играть роль распределенной структуры с ассоциативной памятью.

Целью настоящей работы являются развитие модели [11] и исследование взаимосвязи физических и информационных характеристик в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода (параэлектрик-сегнетоэлектрик) в дипольной системе микротрубочки цитоскелета: расчет критической температуры, свободной энергии, средней энергии, теплоемкости, информации, приращения информации, эффективности дипольной системы как функций температуры.

1. Микроскопическая модель и гамильтониан дипольной системы микротрубочки цитоскелета в континуальном приближении

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 молекулах тубулина микротрубочки цитоскелета и осциллируют около определенных положений равновесия 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. Движение ансамбля таких активных в смысле сегнетоэлектрического перехода диполей (дипольных осцилляторов), можно описать гамильтонианом

$$H = T + V, \quad (1)$$

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 сегнетоэлектрическую 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. 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 X_i , где i — номер молекулы тубулина. Смещения электронов из равновесного положения обозначим вектором u_i , так что положение электронов в любой момент времени x_i имеет вид

$$x_i = X_i + u_i. \quad (2)$$

Тогда кинетическую энергию дипольных моментов можно записать в виде

$$T = (1/2m_e) \sum_i p_i^2 = (1/2m_e) \sum_i \hbar^2 \nabla_i^2, \quad (3)$$

где $p_i = \hbar \nabla_i$ — импульс электрона в i молекуле тубулина, m_e — 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

$$V = \sum_i V(u_i) + (1/2) \sum_{i \neq j} J_{ij} u_i u_j, \quad (4)$$

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

Равновесные положения электрона в высокотемпературной фазе X_i (относительно которых определяются

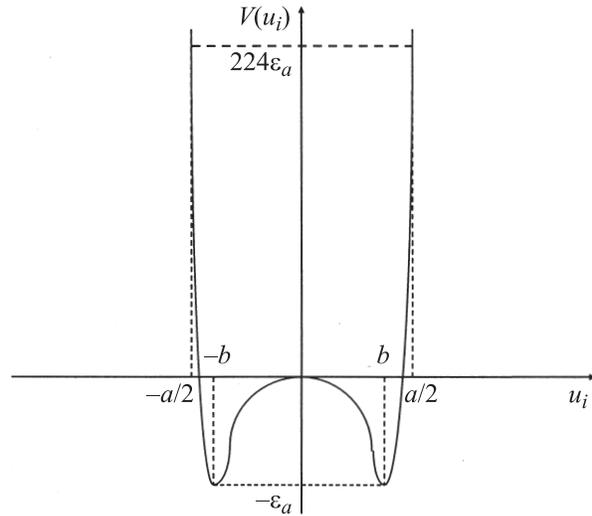


Рис. 2. Качественная зависимость одночастичной потенциальной энергии электрона $V(u_i)$ в молекуле тубулина от смещения u_i .

смещения u_i) образуют N узлов одномерной цепочки (спирали) с периодом a . Предполагается, что каждый дипольный момент взаимодействует с дипольными моментами только своих ближайших соседей (второй член в (4)) и находится в двухъямном одночастичном потенциале $V(u_i)$, качественная зависимость которого от смещения u_i изображена на (рис. 2).

Разумно предположить, что этот потенциал имеет характерные значения для высоты горба потенциала $\epsilon_a \approx 4.3 \cdot 10^{-21}$ J (порядка тепловой энергии электрона при температуре человеческого тела), а для высоты боковой стенки потенциала — $224\epsilon_a \approx 9.6 \cdot 10^{-19}$ J (порядка энергии выхода электрона из молекулы тубулина).

Можно представить, что этот двухъямный потенциал обусловлен неактивной при сегнетоэлектрическом переходе частью структуры молекулы тубулина. Можно предположить, что потенциал имеет одноосную анизотропию, которая эффективно ограничивает смещения электронов одним направлением. Тогда импульсы p_i и смещения u_i являются скалярными величинами, а одночастичная потенциальная энергия

$$\sum_i V(u_i)$$

— периодической функцией с периодом a . Для получения количественной зависимости $V(u_i)$ представим двухъямный потенциал электрона в молекуле тубулина в модельном виде

$$V(u_i) = \epsilon_a \{ \exp[-2d^{-1}(u_i + b)] - 2 \exp[-d^{-1}(u_i + b)] \} + \epsilon_a \{ \exp[2d^{-1}(u_i - b)] - 2 \exp[d^{-1}(u_i - b)] \} \quad (5)$$

для $-a/2 \leq u_i \leq a/2$.

Здесь a — период цепочки молекул тубулина в микротрубочке цитоскелета, d — половина ширины как левой,

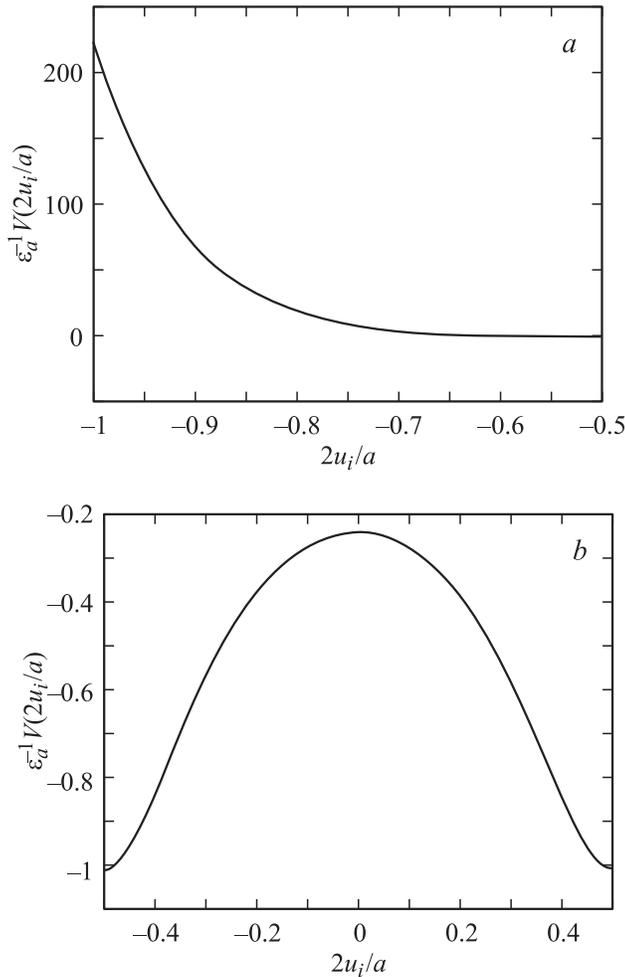


Рис. 3. Зависимость одночастичной потенциальной энергии электрона $\varepsilon_a^{-1}V(2u_i/a)$ (5) в молекуле тубулина от смещения при $b = 0.25a$, $d = 0.09a$; a — $-1 < (2u_i/a) < -0.5$, b — $-0.5 < (2u_i/a) < 0.5$.

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 (5) в среде MATLAB при различных значениях b, d , получим, что потенциал $\varepsilon_a^{-1}(2u_i/a)$ (5), изображенный на рис. 3, a, b в безразмерных координатах $(2u_i/a)$, соответствует качественному виду рис. 2 при $b = 0.25a$, $d = 0.09a$.

Для применения методов квантовой теории поля гамильтониан (1) удобно записать в континуальном приближении

$$\sum_i \dots \rightarrow (1/a) \int_0^L \dots dx$$

$$T = (1/2m_e) \int_0^L \dot{S}^2(x)(dx/a), \quad (6)$$

$$V = \int_0^L V(S(x))(dx/a) - (1/2)J \int_0^L S(x)S(x \pm a)(dx/a), \quad (7)$$

$$V(S(x)) = \varepsilon_a \{ \exp[-2d^{-1}(S(x) + b)] - 2 \exp[-d^{-1}(S(x) + b)] \} + \varepsilon_a \{ \exp[2d^{-1}(S(x) - b)] - 2 \exp[d^{-1}(S(x) - b)] \}, \quad (8)$$

$$S(x) = \sum_i^N u(x_i)\delta(x - x_i),$$

$$J(x - x') = J\delta(x - x' \pm a), \quad L = aN,$$

L — длина микротрубочки, $S(x)$ — плотность дипольного момента микротрубочки, N — число молекул тубулина.

Для простейшего учета дисперсии запишем

$$S(x + a) = S(x) + a\partial S(x)/\partial x + (1/2)a^2\partial^2 S(x)/\partial x^2. \quad (9)$$

Подставив (9) в гамильтониан (7), получим

$$V = \int_0^L V(S(x))(dx/a) + (Ja^2/2) \int_0^L [\partial S(x)/\partial x]^2(dx/a). \quad (10)$$

При получении (10) использовалась замена вида

$$S(x)\partial^2 S(x)/\partial x^2 \rightarrow -[\partial S(x)/\partial x]^2,$$

которая эквивалентна процедуре взятия интеграла по частям, для простоты, при граничных условиях $S(x = 0) = S(x = L) = 0$ (изложенное ниже с небольшими изменениями остается справедливым и для случая других граничных условий).

При исследовании сегнетоэлектрических свойств микротрубочки цитоскелета с гамильтонианом (6), (10) используем метод [10], разработанный для произвольного многокомпонентного классического нелинейного поля, зависящего от одной пространственной координаты.

2. Термодинамические свойства дипольной системы микротрубочки цитоскелета

Статистическая сумма системы, описываемой гамильтонианом (1) в континуальном приближении, выражается через функциональный интеграл

$$Z = \int \partial S(x) \exp \left\{ -\beta(1/2m_e) \int_0^L \dot{S}^2(x)(dx/a) \right\} \times \int \delta S(x) \exp \left\{ -\beta \int_0^L (dx/a) (Ja^2/2) [\partial S(x)/\partial x]^2 + U(S) \right\}, \quad (11)$$

где $\beta = 1/k_B T$ — обратная температура в энергетических единицах, а интегрирование проводится при условии $S(x = 0) = S(x = L) = 0$.

Статистическую сумму (11) можно представить в виде

$$Z/Z_0 = \int \delta S(x) \exp \left\{ -\beta \int_0^L (dx/a)(Ja^2/2) [\partial S(x)/dx]^2 + U(S) \right\} / \int \delta S(x) \exp \left\{ -\beta \int_0^L dx (Ja^2/2) [\partial S(x)/dx]^2 \right\}, \quad (12)$$

где Z_0 — статистическая сумма системы дипольных моментов при отсутствии взаимодействия $U(S)$.

Функция Грина уравнения Шредингера частицы с мнимым временем [10] удовлетворяет уравнению

$$\partial/\partial \tau \Psi(S) = [(\hbar^2 p^2/2m) + \Phi(S)] \Psi(S), \quad p = -i\partial/\partial S \quad (13)$$

и имеет вид

$$G(S\tau, S_0\tau_0) = (1/N) \int \prod_{\tau_0 S_0}^{\tau S} dS' \times \exp \left\{ -(m/2\hbar^2) \int_{\tau_0}^{\tau} (dS'/d\tau')^2 d\tau' - \int_{\tau_0}^{\tau} \Phi(S') d\tau' \right\}, \quad (14)$$

где N — нормировочный множитель.

Выражение для статистической суммы (12) совпадает с соотношением (14), если в последнем под мнимым временем τ понимать координату x , массу m положить равной $(\beta J \hbar^2 a)$, а потенциальную энергию $\Phi(S)$ заменить на $(\beta/a)U(S)$.

Таким образом, получаем соотношение

$$\exp -\beta(F - F_0) = G(0L, 00)/G_0(0L, 00), \quad (15)$$

где $G(SL, S_0L_0)$ — гриновская функция, удовлетворяющая уравнению

$$\left\{ \partial/\partial L - [p^2/2(\beta J \hbar^2 a)] - (\beta/a)U(S) \right\} G(SL, S_0L_0) = \delta(S - S_0)\delta(L - L_0), \quad (16)$$

$G(SL, S_0L_0) = 0$ при $L < L_0$, а $G(SL, S_0L_0)$ — гриновская функция уравнения с $U \equiv 0$.

Известно [10], что

$$G(SL, S_0L_0) = \int_{\lambda} \Psi_{\lambda}(S) \Psi_{\lambda}^*(S_0) \exp \{ -(L - L_0)E_{\lambda} \} \quad \text{при } L \geq L_0, \quad (17)$$

$$G(SL, S_0L_0) = 0 \quad \text{при } L < L_0. \quad (18)$$

Здесь $\Phi_{\lambda}(S)$ и E_{λ} — собственные функции и собственные значения „гамильтониана“

$$h(\beta) = p^2/2(\beta J \hbar^2 a) + (\beta/a)U(S), \quad (19)$$

а под символом \int_{λ} следует понимать суммирование по дискретным энергиям и интегрирование по области непрерывного спектра. Так как „масса“ частицы, описываемой „гамильтонианом“ (19), и поле, в котором она движется, зависят от температуры, то собственные значения $E_{\lambda} = E_{\lambda}(\beta)$.

Подставив выражения (17) в (15), получим

$$\exp(-\beta \Delta F) = \int \Psi_{\lambda}(0) \Psi_{\lambda}^*(0) \exp[-LE_{\lambda}(\beta)] \times \left\{ (2\pi)^{-n} \int dp \exp[Lp^2/2(\beta J \hbar^2 a^{-1})] \right\}^{-1}. \quad (20)$$

Для получения качественного результата будем считать микротрубочку большой системой, получаемой предельным переходом $L \rightarrow \infty$. В этом случае имеет смысл говорить об удельной свободной энергии $\Delta f = \lim(\Delta F/L)$, $L \rightarrow \infty$, которая, согласно формуле (20), есть

$$\Delta f = -\beta^{-1} \lim_{L \rightarrow \infty} L^{-1} \ln \left\{ \sum_k \Psi_k(0) \Psi_k^*(0) \exp[-LE_k] + \int_{\lambda} \Psi_{\lambda}(0) \Psi_{\lambda}^*(0) \exp[-LE_{\lambda}] \right\} \times \left\{ (2\pi)^{-1} \int dp \exp[Lp^2/2(\beta J \hbar^2 a)] \right\}^{-1}. \quad (21)$$

Здесь явно выделено суммирование по дискретным уровням E_k оператора $h(\beta)$, а символ \int_{λ} обозначает интегрирование по непрерывному спектру.

Из выражения (21) следует, что с асимптотической точностью

$$-\beta \Delta f = |E_0|, \quad (22)$$

где E_0 — энергия основного состояния частицы.

Гамильтониан $h(\beta)$ заменой единицы масштаба „энергии“ E приводится к виду

$$\tilde{h}(\beta) = p^2/2 + \beta^2 J \hbar^2 U(S). \quad (23)$$

С увеличением температуры T (с уменьшением β) глубина ямы уменьшается и снижаются значения энергий связанных состояний частицы. По достижении некоторого критического значения β_k яма не будет в состоянии „удержать“ частицу — связанные состояния исчезнут.

Таким образом, учитывая соотношение (22), получим

$$\begin{aligned} -\beta \Delta f &= |E_0| \quad \text{при } \beta \geq \beta_k, \\ -\beta \Delta f &= 0 \quad \text{при } \beta < \beta_k. \end{aligned} \quad (24)$$

Видно, что в точке β_k , где свойства оператора $h(\beta)$ меняются таким образом, что исчезает уровень, соответствующий основному состоянию „частицы“ с массой $(\beta J \hbar^2 a)$ в поле $(\beta/a)U(S)$, происходит фазовый переход в рассматриваемой системе дипольных моментов (сегнетоэлектрический переход).

Вычислим энергию основного состояния E_0 электрона с массой m_e 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

$$d^2\psi/dx^2 + 2m_e\hbar^{-2}(E - \varepsilon_a \{ \exp[-2d^{-1}x] - 2 \exp[-d^{-1}x] \})\psi = 0. \quad (25)$$

Согласно [13], энергия основного состояния для уравнения (25) равна

$$-E_0 = \varepsilon_a \{ 1 - (d^{-1}\hbar) / (2\sqrt{2m_e\varepsilon_a}) \}^2. \quad (26)$$

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

$$\lambda = (d^{-1}\hbar) / (2\sqrt{2m_e\varepsilon_a}) < 1. \quad (27)$$

Подставив в (27) характерные значения физических величин для электрона и молекулы тубулина $m_e = 9.108 \cdot 10^{-31}$ kg, $a = 8 \cdot 10^{-9}$ m, $d = 0.72 \cdot 10^{-9}$ m, $\varepsilon_a = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, $\hbar = 1.054 \cdot 10^{-34}$ Js, получим $E_0 = -0.044 \cdot \varepsilon_a$, $\lambda = 0.79 < 1$. Щель между уровнем энергии связанного состояния и началом отсчета энергий непрерывных состояний равна $\Delta = 0 - E_0 = 0.044 \cdot \varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ 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 $+E_0 = 0.044 \cdot \varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ J. Поэтому можно говорить о фазовом переходе в дипольной системе микротрубочки тубулина и выполнять преобразования массы $m \rightarrow (\beta J \hbar^2 a)$, потенциальной энергии $U(S) \rightarrow (\beta/a)U(S)$, а также $d^{-1} \rightarrow (bd^{-1})$ в формуле для энергии основного состояния. Тогда получим

$$-E_0 = \beta a^{-1} \varepsilon_a \{ 1 - (bd^{-1}\hbar) / (2\sqrt{2\beta J \hbar^2 a \beta a^{-1} \varepsilon_a}) \}^2. \quad (28)$$

Отсюда легко получается критическая температура перехода

$$\beta_k = (b/2d)(1/\sqrt{2J\varepsilon_a}). \quad (29)$$

Подставив в (29) характерные значения физических величин для молекулы тубулина $a = 8 \cdot 10^{-9}$ m, $d = 0.72 \cdot 10^{-9}$ m, $b = 2 \cdot 10^{-9}$ m, $\varepsilon_a = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, $J = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J, $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ JK⁻¹, получим, что критическая температура

$$\beta_k^{-1} \equiv (k_B T_k) = (2d/b)\sqrt{2J\varepsilon_a} = 4.37 \cdot 10^{-21} \text{ J}, \\ T_k = 317 \text{ K}. \quad (30)$$

Тогда формулу (28) в окрестности точки перехода удобно переписать в виде

$$-E_0 = -\beta \Delta f = \beta_k^{-1} a^{-1} \varepsilon_a (\beta - \beta_k)^2. \quad (31)$$

Из выражения для удельной свободной энергии (24) и (31) можно легко получить все термодинамические характеристики системы. Так, для удельной средней энергии $\Delta\varepsilon$, равной $\Delta\varepsilon = \partial\beta\Delta f/\partial\beta$, получаем

$$\Delta\varepsilon = dE_0/d\beta = -2\beta_k^{-1} a^{-1} \varepsilon_a (\beta - \beta_k) \quad \text{при } \beta \geq \beta_k, \\ \Delta\varepsilon = 0 \quad \text{при } \beta < \beta_k. \quad (32)$$

Для изменения удельной теплоемкости $\Delta C = -\beta^2 d\Delta\varepsilon/d\beta$ имеем

$$\Delta C = -\beta^2 d^2 E_0 / d\beta^2 = 2\beta_k a^{-1} \varepsilon_a \quad \text{при } \beta \geq \beta_k \\ \Delta C = 0 \quad \text{при } \beta < \beta_k. \quad (33)$$

Из (33) видно, что теплоемкость возрастает при переходе из высокотемпературной в низкотемпературную фазу.

Исчезновению связанного состояния предшествует приближение „собственной энергии“ $E_0(\beta)$ к нулю. Именно квадратичный характер этого приближения и определяет особенность термодинамических характеристик системы в точке перехода. Зависимость удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета от обратной температуры схематически представлена на рис. 4.

Ясно, что, если $\partial E_0(\beta)/\partial\beta$ по мере приближения β к β_k стремится к нулю, то зависимость удельной средней энергии $\Delta\varepsilon$ от β вблизи имеет характер, представленный на рис. 5.

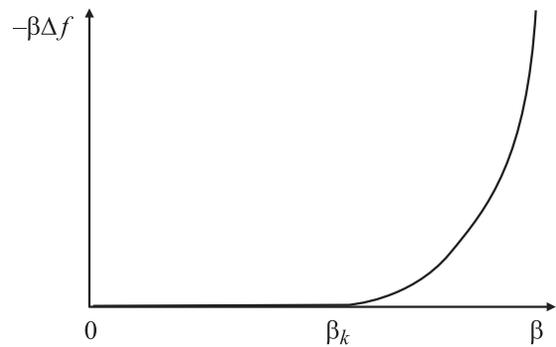


Рис. 4. Зависимость удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета от параметра β .

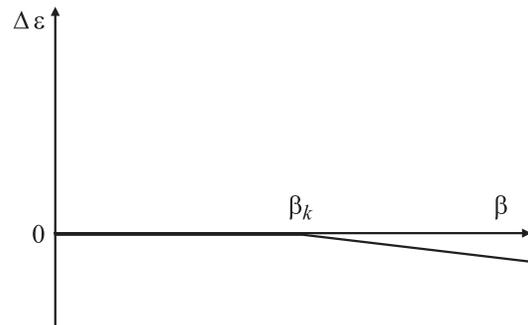


Рис. 5. Зависимость удельной средней энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета от параметра β .

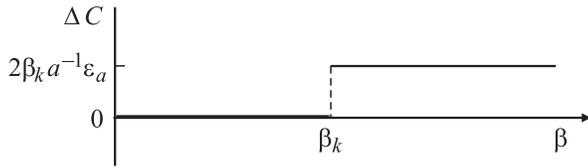


Рис. 6. Зависимость удельной теплоемкости дипольной системы микротрубочки цитоскелета от параметра β .

Видно, что $\partial^2 E_0(\beta)/\partial\beta^2$ испытывает разрыв в точке перехода β_k (рис. 6), и имеет место переход второго рода. Причина этого в том, что была выбрана потенциальная яма в виде (5).

3. Уменьшение сложности, параметр порядка и уравнение эволюции дипольной системы микротрубочки цитоскелета

Переменная $S(x)$ (плотность дипольного момента микротрубочки) полностью описывает сегнетоэлектрические свойства микротрубочки цитоскелета на микроскопическом уровне. Поле $S(x)$ удобно разложить по нормальным модам, например, плоским волнам с волновым числом k

$$S(x) = (1/\sqrt{L}) \sum_k S(k) \exp(ikx). \quad (34)$$

Появление сегнетоэлектрических свойств в микротрубочке цитоскелета происходит путем фазового перехода второго рода, который связан с качественным изменением электрических свойств тела. В случае сегнетоэлектрического перехода в микротрубочке цитоскелета это изменение может быть описано макроскопическим образом: как появление или исчезновение среднего дипольного момента микротрубочки цитоскелета. С микроскопической точки зрения речь идет об определенных свойствах распределения поля $S(x)$ по плоским волнам с волновым вектором k . Именно в сегнетоэлектрическом состоянии, в отличие от параэлектрического, конечная доля плоских волн (т.е. макроскопически большое их число) имеет равное нулю волновое число. Эти волны образуют „конденсат“ в пространстве волновых векторов, другими словами, большим числом оказывается один член суммы с $k = 0$

$$S \equiv (1/\sqrt{L}) S(0). \quad (35)$$

Таким образом, в окрестности фазового перехода любое движение поля дипольных моментов можно разбить на не критические (устойчивые) и одну критическую (неустойчивую) моду, определяющую поведение системы дипольных моментов, амплитуда которой будет параметром порядка [6]. В этом случае нам не нужно исследовать эволюцию всех величин $S(k)$, а достаточно

изучить эволюцию одной величины $S(k = 0)$ — параметра порядка. Таким образом, можно пренебречь большим количеством несущественной информации о строении дипольной системы и сосредоточить свое внимание на особенностях структуры дипольной системы, существенных при фазовом переходе. Следовательно, при таком описании фазового перехода с помощью параметра порядка в дипольной системе микротрубочки цитоскелета имеет место колоссальное сжатие информации.

Для количественной характеристики изменения дипольной структуры микротрубочки цитоскелета при прохождении через точку фазового перехода можно ввести величину S (параметр порядка), которая пробегает отличные от нуля (положительные или отрицательные) значения в низкотемпературной фазе и равна нулю в высокотемпературной фазе. Так, для сегнетоэлектрических переходов, связанных со статическим смещением электронов от их равновесных положений в симметричной фазе, под $\langle S(x) \rangle$ можно понимать величину этого смещения.

При сегнетоэлектрическом переходе в микротрубочке цитоскелета, характеризующемся смещением электрона из положения равновесия в высокотемпературной фазе в левую (правую) яму потенциала, в низкотемпературной фазе, в качестве параметра порядка удобно выбрать термодинамическое среднее значение $\langle S(x) \rangle$. По определению величина $S = \langle S(x) \rangle$ характеризует разницу между заселенностями левого и правого положений двухъямного потенциала.

Используя результаты п. 2, можно разложить выражение для изменения удельной свободной энергии дипольной системы микротрубочки цитоскелета по степеням параметра порядка S в окрестности температуры превращения:

$$\Delta f = -\alpha S^2/2 + \gamma S^4/4, \quad (36)$$

$$\alpha = -\alpha_0(T - T_k), \quad (37)$$

где α, γ — коэффициенты, имеющие размерность энергии, причем коэффициент α может менять знак при изменении температуры, а коэффициент γ — положительный. Здесь

$$k_B T_k = (2d/b) \sqrt{2J\epsilon_a}$$

— температура сегнетоэлектрического перехода в микротрубочке цитоскелета.

Соответственно уравнение самосогласования для параметра порядка $\partial\beta\Delta f/\partial S = 0$ в окрестности точки перехода будет иметь вид

$$-\alpha S + \gamma S^3 = 0. \quad (38)$$

Решение уравнения самосогласования (38) имеет вид

$$S = \pm\sqrt{\alpha\gamma} \quad \text{при} \quad \alpha \geq 0, \quad (39)$$

$$S = 0 \quad \text{при} \quad \alpha < 0. \quad (40)$$

Из выражений (38)–(40) видно, что существует интервал температур $T > T_k$, в котором дипольная подсистема находится в параэлектрическом (неупорядоченном) состоянии с $S = 0$. Под параэлектрическим состоянием здесь понимается такое термодинамическое состояние кристалла, в котором вследствие эффекта теплового перескока электрон полностью делокализован в двухъямном потенциале, т.е. вероятность обнаружить электрон в левой и правой яме потенциала одинакова, а его равновесное положение находится в центре симметрии потенциала. Также существует интервал температур $T < T_k$, в котором дипольная подсистема находится в сегнетоэлектрическом (упорядоченном) состоянии с $S = \pm\sqrt{\alpha\gamma}$. Под сегнетоэлектрическим понимается такое состояние кристалла, в котором вследствие дипольного взаимодействия и действия двухъямного потенциала электрон локализован, например, в левой яме двухъямного потенциала, т.е. вероятность обнаружить электрон в левой и правой яме потенциала различна, а его равновесное положение находится в левой яме потенциала.

Поскольку изменение удельной свободной энергии (27) должно совпадать с разложением удельной свободной энергии Ландау (36) по параметру порядка, когда он принимает равновесное значение (39), получим

$$\begin{aligned}\Delta f &= -\alpha^2/4\gamma = -[\alpha_0^2/4\gamma](T - T_k)^2 \\ &= -a^{-1}\varepsilon_a\beta_k^{-2}(\beta - \beta_k)^2.\end{aligned}\quad (41)$$

Известно [14], что динамика параметра порядка в близкой окрестности точки перехода является релаксационной. Уравнение эволюции для однородного параметра порядка S принимает вид

$$\dot{S} = -\partial\Delta f/\partial S + F(t) = \alpha S - \gamma S^3 + F(t),\quad (42)$$

где точка обозначает дифференцирование по времени.

Флуктуирующая сила характеризуется следующими свойствами:

$$\langle F(t) \rangle = 0,\quad (43)$$

$$\langle F(t)F(t') \rangle = Q\delta(t - t'),\quad (44)$$

где среднее берется по стохастическому процессу.

Если, кроме того, предположить, что F имеет гауссово распределение, то получим соответствующее уравнение (42) уравнение Фоккера–Планка

$$\dot{f}(S, t) = -\partial/\partial S[(\alpha S - \gamma S^3)f] + (Q/2)\partial^2/S^2[f].\quad (45)$$

Функция распределения, являющаяся решением для стационарного уравнения (45), имеет следующий вид

$$f_\alpha(S) = N \exp(\alpha S^2 - \gamma S^4),\quad (46)$$

с нормировочным множителем, определяемым выражением

$$N_\alpha^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(\alpha S^2 - \gamma S^4) dS.\quad (47)$$

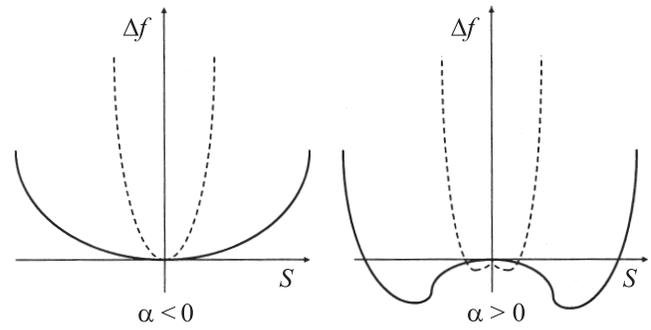


Рис. 7. Потенциал свободной энергии Ландау: слева — при $\alpha < 0$, справа — при $\alpha > 0$.

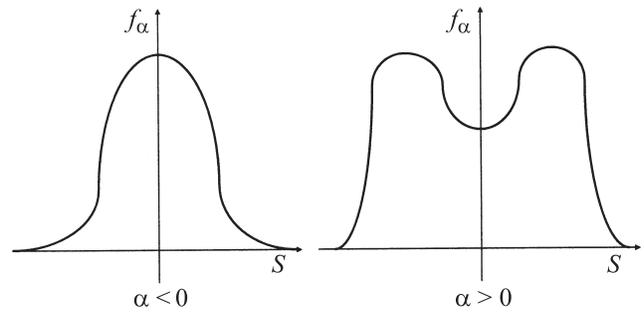


Рис. 8. Функция распределения f_α : слева — соответствующая потенциалу свободной энергии Ландау при $\alpha < 0$, справа — потенциалу свободной энергии Ландау при $\alpha > 0$.

Функцию распределения (46) можно интерпретировать как функцию распределения для координаты частицы, которая движется в потенциальной яме и подвержена действию дополнительной флуктуирующей силы.

На рис. 7 слева показан потенциал удельной свободной энергии Ландау при отрицательных α (сплошная линия соответствует значению α , достаточно близкому к нулю, штриховая — значению $\alpha \ll -1$). Видно, что существует только один минимум, к которому может релаксировать частица. Справа показан потенциал свободной энергии Ландау при положительных α (сплошная линия соответствует значению α , достаточно близкому к нулю, штриховая — большому значению $\alpha \gg 1$).

На рис. 8 слева показана функция распределения f_α , соответствующая потенциалу свободной энергии Ландау с одним минимумом при $\alpha < 0$, она имеет один максимум. Справа при $\alpha > 0$ у функции распределения f_α возникают два максимума. При $\alpha \ll -1$ функция распределения f_α становится более локализованной (узкой), имеет форму пика. При $\alpha \gg 1$ функция распределения f_α принимает форму двух непересекающихся узких пиков в точках $S = -\sqrt{\alpha\gamma}$ и $S = \sqrt{\alpha\gamma}$. Ясно, что в этом состоянии микротрубочка цитоскелета способна хранить информацию, так как одному состоянию можно поставить в соответствие нуль, а другому — единицу.

4. Информация, приращение информации и эффективность дипольной системы микротрубочки цитоскелета в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода

Вычислим выражения для информации I_f , приращения информации K_f и эффективности дипольной системы W , относящихся к параметру порядка, при сегнетоэлектрическом переходе второго рода.

Информацией, по определению, является величина

$$I_f = - \sum_j p_j \ln p_j = - \sum_S f(S) \ln f(S). \quad (48)$$

Здесь p_j — распределение вероятности состояний, характеризующих индексом j . В нашем случае j нужно отождествлять со значениями, принимаемыми стохастической переменной — параметром порядка S . Причем будем понимать под S не только сами переменные, но и их допустимые значения.

Приращение информации определяется выражением

$$\begin{aligned} K_f &= - \sum_j p_{nj} \ln(p_{nj}/p_{aj}) \\ &= - \sum_S f_n(S) \ln[f_n(S)/f_a(S)], \end{aligned} \quad (49)$$

где p_{nj} и p_{aj} — два различных распределения вероятностей, различаемых по индексам n и a .

Мерой макроскопического действия системы является квадрат параметра порядка

$$\Omega(\alpha) = \langle S^2 \rangle = \int S^2 f(S) dS. \quad (50)$$

Эффективность дипольной системы W определяется как скорость изменения величины Ω при изменении управляющего параметра α

$$W = d\Omega/d\alpha. \quad (51)$$

Вычислим I_f , K_f , W , используя знание функции распределения, относящейся к параметру порядка для системы, испытывающей сегнетоэлектрический переход второго рода.

Подставив экспоненту (46) в определения I , K , W , получим

$$I_f = - \ln N - \alpha \langle S^2 \rangle + \gamma \langle S^4 \rangle, \quad (52)$$

$$\begin{aligned} K_f &\equiv K(f_\alpha, f_{\alpha_0}) = \int f_\alpha \ln[f_\alpha/f_{\alpha_0}] dS \\ &= \ln N(\alpha) - \ln N(\alpha_0) + (\alpha - \alpha_0) \langle S^2 \rangle_\alpha, \end{aligned} \quad (53)$$

$$W = \langle S^4 \rangle - \langle S^2 \rangle^2, \quad (54)$$

где для краткости использовано обозначение

$$\langle S^n \rangle = \int f(S) S^n dS. \quad (55)$$

Найдем соотношения между I_f , K_f , W и управляющими параметрами α , γ . В зависимости от величины параметра α существуют различные режимы, а именно область неустойчивости при $\alpha \approx 0$ и область устойчивости при $|\alpha| \gg 0$.

Используя выражение для стандартного интеграла

$$\begin{aligned} \int_0^\infty x^n \exp(\alpha x^{2m} - \gamma x^{4m}) dx &= (2m)^{-1} (2\gamma)^{-[(n+1)/4m]} \\ &\times \Gamma(n + 1/2m) D_{-[(n+1)/4m]}(\lambda) \exp(\lambda^2/4), \end{aligned} \quad (56)$$

где $\lambda = -(\alpha/\sqrt{2\gamma})$, Γ — гамма-функция и D -функция параболического цилиндра, получим

$$N = (2\gamma)^{1/4} \pi^{-1/2} [D_{-1/2}(\lambda)]^{-1} \exp(-\lambda^2/4), \quad (57)$$

$$\langle S^2 \rangle = (2\gamma)^{-1/2} [D_{-3/2}(\lambda)/2D_{-1/2}(\lambda)], \quad (58)$$

$$\langle S^4 \rangle = (8\gamma)^{-1} [3D_{-5/2}(\lambda)/D_{-1/2}(\lambda)]. \quad (59)$$

Получив выражения, связывающие N , $\langle S^2 \rangle$, $\langle S^4 \rangle$ только с управляющими параметрами α , γ , подставим их просто в формулы для I_f , K_f , W .

При этом информация, содержащаяся в системе с функцией распределения $f(S)$, равна

$$\begin{aligned} I_f &= 0.3991 - (1/4) \ln[\gamma] + (1/4) \lambda^2 + \ln[D_{-1/2}(\lambda)] \\ &+ \{(\lambda/2)D_{-3/2}(\lambda) + (3/8)D_{-5/2}(\lambda)\} [D_{-1/2}(\lambda)]^{-1}. \end{aligned} \quad (60)$$

Приращение информации при изменении параметра α , от которого зависит $f(S)$, от α_0 до α , оказывается равным

$$\begin{aligned} K(f_\alpha, f_{\alpha_0}) &= [(\alpha_0^2 - \alpha^2)/8\gamma] + \ln[D_{-1/2}(\lambda_0)/D_{-1/2}(\lambda)] \\ &- (\lambda - \lambda_0) [D_{-3/2}(\lambda)/2D_{-1/2}(\lambda)]. \end{aligned} \quad (61)$$

Эффективность дипольной подсистемы равна

$$W = \{3D_{-5/2}(\lambda)D_{-1/2}(\lambda) - [D_{-3/2}(\lambda)]^2\} / (8\gamma [D_{-1/2}(\lambda)]). \quad (62)$$

Следует отметить, что в формулы (55)–(61) входят аналитические функции управляющих параметров α , γ , причем $\gamma \neq 0$, $\alpha < \infty$. Поскольку величины I_f , K_f , W зависят от λ весьма сложным образом, выражения (60)–(62) в общем случае не поддаются упрощению. Однако существует три случая, когда это возможно. Первый из них возникает, когда точка неустойчивости соответствует $\alpha = 0$, и, следовательно, $\lambda = 0$. Второй случай характеризуется тем, что в непосредственной окрестности точки неустойчивости параметр α и, следовательно λ , стремятся к нулю $\alpha \rightarrow 0$, $\lambda \rightarrow 0$. В третьем случае в области устойчивости выполняется неравенство $\alpha \gg 1$. Проанализируем каждый из этих особых случаев более подробно.

Точка неустойчивости

Функция параболического цилиндра связана с функцией Вебера соотношением

$$D_{-p-1/2}(\lambda) = U(p, \lambda). \quad (63)$$

В точке неустойчивости $\alpha = 0$ используется свойство функции Вебера

$$U(p, 0) = \sqrt{\pi} [2^{p/2+1/4}]^{-1} \Gamma^{-1}(p/2 + 3/4). \quad (64)$$

Тогда нормировочная константа N достигает максимума, а второй и четвертый моменты соответственно равны

$$N_c = 0.5516\gamma^{1/4}, \quad (65)$$

$$\langle S^2 \rangle_c = 0.3380\gamma^{-1/2}, \quad (66)$$

$$\langle S^4 \rangle_c = 0.2550\gamma^{-1}. \quad (67)$$

Таким образом, информация в точке неустойчивости определяется выражением

$$I_c = 0.8449 - (1/4) \ln \gamma. \quad (68)$$

Приращение информации при переходе от распределения f_c ($\alpha = 0$) к распределению f составляет

$$K_{ffc} = 0.5949 - (1/4) \ln \gamma + \ln N + \alpha \langle S^2 \rangle_\alpha. \quad (69)$$

Эффективность в точке неустойчивости равна

$$W_c = 0.1358\gamma^{-1}. \quad (70)$$

Все полученные выражения (кроме выражения, определяющего приращение информации) зависят только от γ и представляют собой максимумы своих функций по α . Исследуем приближение к этим максимумам при $\alpha \rightarrow 0$.

Окрестность точки неустойчивости

При исследовании ближайшей окрестности точки неустойчивости воспользуемся следующим асимптотическим представлением функции Вебера:

$$U(p, \mp|\lambda|) \approx \sqrt{\pi} [2^{p/2+1/4}]^{-1} \Gamma^{-1}(p/2 + 3/4) \exp[\mp\sqrt{p}\lambda], \quad (71)$$

где $\lambda \approx 0$, и в разложении экспоненты высшими степенями параметра λ можно пренебречь. Пользуясь асимптотическим представлением (71), получим главные члены, описывающие поведение величин N , $\langle S^2 \rangle$, $\langle S^4 \rangle$ вблизи $\lambda = 0$

$$N \approx N_c \exp\{-\lambda^2/4\}, \quad (72)$$

$$\langle S^2 \rangle = \langle S^2 \rangle_c \exp\{\mp\lambda\}, \quad (73)$$

$$\langle S^4 \rangle = \langle S^4 \rangle_c \exp\{\mp\sqrt{2}\lambda\}, \quad (74)$$

где N_c , $\langle S^2 \rangle_c$, $\langle S^4 \rangle_c$ определяются выражениями (65)–(67). В формулах (72)–(74) знак минус соответствует $\lambda > 0$ ($\alpha < 0$), а знак плюс — обратному неравенству $\lambda < 0$ ($\alpha > 0$). Таким образом, при приближении

к точке $\alpha = 0$ значения N , $\langle S^2 \rangle$, $\langle S^4 \rangle$ экспоненциально возрастают и стремятся к своим критическим значениям N_c , $\langle S^2 \rangle_c$, $\langle S^4 \rangle_c$.

Применив эти результаты к I_f , получим

$$I_f = I_c + \lambda^2/4 + 0.478\lambda \exp(\mp\lambda) + 0.250[\exp(\mp\sqrt{2}\lambda) - 1]. \quad (75)$$

Таким образом, I_f стремится к своему критическому значению I_c и комбинации экспонент от λ .

Приращение информации, обусловленное изменением функции распределения от f_0 до f_c (и начальная и конечная функции распределения близки к f_c) равно

$$K_{ff0} = K_{ffc} + (\alpha_0^2/8\gamma) - \alpha_0 \langle S^2 \rangle_\alpha. \quad (76)$$

Таким образом, K_{ff0} стремится к K_{ffc} через комбинации членов, один из которых линеен, а другой квадратичен по α_0 . Ясно, что $\alpha_0 \rightarrow 0$. Полагая $\lambda \approx 0$, упростим выражение (76)

$$K_{ff0} = \lambda_0^2 - \lambda^2 + 0.478(\lambda - \lambda_0) \exp(\mp\lambda). \quad (77)$$

Вычислив эффективность вблизи точки неустойчивости, получим

$$W \approx W_c \exp[-\sqrt{2}\lambda]. \quad (78)$$

Отметим, что все интересующие нас величины, кроме K_f , стремятся к своим критическим значениям через экспоненты или комбинации экспонент. В этом их поведение резко отличается от поведения в области устойчивости.

Область устойчивости

Другого асимптотического предела, а именно $\lambda \rightarrow \infty$, можно достичь, либо увеличивая параметр α , либо фиксируя параметр γ , либо устремляя одновременно к бесконечности с одинаковой скоростью параметры α и γ , т.е. увеличивая объем системы. Следовательно, асимптотически будем отходить от точки неустойчивости. Соответствующее разложение для функции Вебера имеет вид

$$U(p, \lambda) \approx \lambda^{-p-1/2} \exp[-\lambda^2/4], \quad (79)$$

где старшие степени параметра ($1/\lambda$) отброшены. Применяв асимптотическое представление (79), получим для N , $\langle S^2 \rangle$, $\langle S^4 \rangle$

$$N \approx (2\gamma)^{1/4} (\lambda/\pi)^{1/2}, \quad (80)$$

$$\langle S^2 \rangle \approx (1/2)[2\lambda]^{-1/2} \lambda^{-1}, \quad (81)$$

$$\langle S^4 \rangle \approx (3/8)\gamma^{-1} \lambda^{-2}. \quad (82)$$

Подставив эти выражения в формулы (60), (61), находим асимптотическое выражение для информации

$$I_f = 0.5724 - (1/2) \ln \lambda - (1/4) \ln(2\gamma) + (1/2) + (3/8)\lambda^{-2}. \quad (83)$$

Формула для I_f применима при условии, что $\alpha < 0$ и содержит главные члены разложения, описывающего убывание информации I_f до нуля при $\lambda \rightarrow \infty$. Разумеется, существует максимальное значение параметра λ , выше которого формула (83) становится неприменимой, так как в противном случае она давала бы отрицательную информацию. Кроме того, в этом случае необходимо также учитывать эффекты, связанные с устойчивыми модами, поскольку эти эффекты становятся существенными.

Затем вычисляем приращение информации при переходе от f_{α_0} до f_{α} и получаем

$$K \approx (1/2) \ln(\alpha/\alpha_0) - (1/2)[1 - \alpha/\alpha_0]. \quad (84)$$

Наконец, эффективность системы равна

$$W \approx (1/4)\gamma^{-1}\lambda^{-2} \quad (85)$$

и монотонно убывает, когда $\lambda \rightarrow \infty$. Таким образом, видно, что при возрастании все интересующие нас значения убывают по различным степенным законам.

5. Обсуждение результатов и выводы

Обсудим характер изученного сегнетоэлектрического перехода в дипольной цепи микротрубочки цитоскелета.

1. Сегнетоэлектрические явления в микротрубочке цитоскелета можно объяснить взаимодействием связанных электрических зарядов (электрон-ионных пар) между собой и с электромагнитным полем. Эти связанные заряды содержатся во всех электрически нейтральных молекулах тубулина микротрубочки цитоскелета и осциллируют около определенных положений равновесия с малыми амплитудами. Иначе говоря, активная в смысле сегнетоэлектрического перехода электрон-ионная пара в молекуле тубулина ведет себя как простой осциллятор, взаимодействуя с электрон-ионной парой в другой молекуле тубулина посредством своего дипольного момента.

2. Причиной возникновения упорядоченного состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета, наряду с диполь-дипольным взаимодействием, является периодический двухъямный потенциал молекул тубулина.

3. Электрон в двухъямном потенциале молекулы тубулина с высотой барьера не менее $\varepsilon_a = 4.3 \cdot 10^{-21}$ J имеет, по крайней мере, одно связанное состояние — основное состояние с энергией $+E_0 = 0.044 \cdot \varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ J. Поэтому можно говорить о сегнетоэлектрическом фазовом переходе в дипольной системе микротрубочки, связанном со смещением равновесного положения электрона в двухъямном потенциале молекулы тубулина. Щель между уровнем энергии связанного состояния и началом отсчета энергий непрерывных состояний равна $\Delta = 0 - E_0 = 0.044 \cdot \varepsilon_a = 0.19 \cdot 10^{-21}$ J. Следовательно, частота и длина электромагнитной волны, способной

преодолеть эту щель, равна $\omega_{\Delta} = 1.9 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ и $\lambda_{\Delta} = 1.58 \cdot 10^{-4} \text{ m}$, т.е. лежит в миллиметровом диапазоне длин волн. Это, возможно, и объясняет чрезвычайную чувствительность человеческого организма к электромагнитному излучению миллиметрового диапазона [3].

4. Критическая температура сегнетоэлектрического перехода в дипольной системе микротрубочки цитоскелета для характерных значений физических величин молекулы тубулина равна $\beta_k^{-1} \equiv (k_B T_k) = 4.37 \cdot 10^{-21}$ J, $T_k = 317$ K. Зависимость удельной свободной энергии Δf дипольной системы от обратной температуры имеет квадратичный характер $(\beta - \beta_k)^2$, удельной средней энергии $\Delta \varepsilon$ — имеет линейный характер $-(\beta - \beta_k)$. Изменение удельной теплоемкости в точке фазового перехода равно $\Delta C = 2\beta_k \alpha^{-1} \varepsilon_a$, и сама теплоемкость возрастает при переходе из высокотемпературной в низкотемпературную фазу. Все это говорит о том, что сегнетоэлектрический переход в дипольной цепи микротрубочки цитоскелета является переходом второго рода.

Таким образом, рассматриваемая нами дипольная система микротрубочки цитоскелета может совершать фазовый сегнетоэлектрический переход, причем переход этот характеризуется особенностями термодинамических величин, заключающимися в появлении дальнего порядка.

Обсудим взаимосвязь термодинамических и информационных характеристик дипольной системы микротрубочки цитоскелета в окрестности точки сегнетоэлектрического перехода.

В окрестности точки неустойчивости (перехода) и информация, и эффективность дипольной системы микротрубочки цитоскелета возрастают экспоненциально как функции управляющего параметра α и, следовательно, с высокой вероятностью подавляют вклад устойчивых мод. С другой стороны, вдали от точки перехода информация и эффективность системы убывают как квадрат управляющего параметра α .

На рис. 9 изображен общий ход зависимости информации от управляющего параметра α . Видно, что информация переходит от отрицательных значений параметра α к

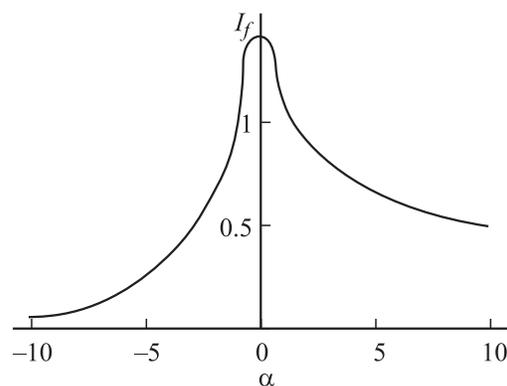


Рис. 9. Зависимость информации от управляющего параметра α при $\gamma = 1$.

положительным с образованием максимума. Такую зависимость I_f от α нетрудно понять исходя из физических соображений. Вблизи точки $\alpha = 0$ возникают критические флуктуации, хорошо известные из теории фазовых переходов. Именно они обуславливают расплывание f_α и, следовательно, увеличение I_f . Когда параметр α переходит в область отрицательных значений, функция f_α оказывается сосредоточенной вокруг одного максимума (рис. 8), и I_f падает. В то же время при возрастающих положительных значениях α у функции f_α появляются два различных максимума (рис. 8) и информация I_f снова падает, хотя и до более высокого уровня, чем при эквивалентных отрицательных α .

Таким образом, изменение информации в дипольной системе микротрубочки цитоскелета, описываемой одним параметром порядка и претерпевающей фазовый переход второго рода мал, но полностью соответствует тому, что ожидается исходя из физических и теоретико-информационных соображений. Дипольная система микротрубочки в сегнетоэлектрическом состоянии, в отличие от состояния дипольного стекла [11], обретает возможность хранить один бит информации, если с помощью нарушения симметрии можно создавать любое из двух возможных состояний. С другой стороны, поведение изменения информации в близкой окрестности точки перехода показывает, что информация здесь может сильно возрастать из-за критических флуктуаций.

Принимая во внимание, что микротрубочка цитоскелета является основной структурной составляющей нейрона, получим следующие принципы функционирования нейрона.

1. Дипольная система микротрубочки цитоскелета функционирует вблизи критического, неустойчивого состояния, в окрестности точки структурного перехода. При сегнетоэлектрическом переходе удельная свободная энергия Ландау такой системы имеет один минимум при $\alpha < 0$ и два минимума при $\alpha \geq 0$. В точке фазового перехода второго рода управляющий параметр α равен нулю. При изменении управляющего параметра α около нуля имеет место промежуточная ситуация, когда дно потенциала удельной свободной энергии Ландау широкое и плоское. Такое состояние системы и есть критическое. В таких условиях система очень чувствительна к любым воздействиям и характеризуется резким ростом интенсивности флуктуаций, так называемыми критическими флуктуациями. Чрезвычайная чувствительность нейрона к малейшим изменениям как внешних, так и внутренних электрических полей подтверждает, что нейрон как сложная система функционирует в окрестности неустойчивого состояния [1,2].

2. Поведение дипольной системы микротрубочки цитоскелета, состоящей из огромного числа дипольных моментов молекул тубулина (степенной свободы), вблизи точки перехода описывается лишь одной неустойчивой переменной, амплитуда которой является параметром порядка. Следовательно, при описании фазового перехода с помощью параметра порядка в дипольной

подсистеме микротрубочки цитоскелета имеет место колоссальное сжатие информации. Таким образом, нейрон является распределенной системой с параллельной обработкой информации, способной сжимать, а не только запоминать информацию и распознавать детали образцов [11].

В заключение автор выражает искреннюю благодарность проф. Г.В. Скорнякову за предоставление полезной литературы, проф. М.В. Астахову за обсуждение полученных результатов.

Список литературы

- [1] Пенроуз Р. Тени разума: в поисках науки о сознании. Ижевск: ИКИ, 2005. 690 с.
- [2] Hameroff S., Penrose R. // J. of Consciousness Studies. 1994. Vol. 1. P. 91–118.
- [3] Благодатских В.И., Гаряев П.П., Маслов М.Ю., Решетняк С.А., Щеглов В.А. // Laser Physics. 1996. Vol. 6. N 4. P. 621–653.
- [4] Sataric M.V., Tuszynski J.A., Zakula R.B. // Phys. Rev. E. 1993. Vol. 48. N 1. P. 589–597.
- [5] Brown 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] Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.И. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.
- [10] Сурис Р.А. // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1427–1436.
- [11] Слядников Е.Е. // ЖТФ. 2007. Т. 32. Вып. 8. С. 52–59.
- [12] Аллен Л., Эберли Дж. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. М.: Мир, 1978. 223 с.
- [13] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука. 1989. 521 с.
- [14] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория кинетических явлений. М.: Наука, 1989. 521 с.