

01

Микроскопическая модель информационной биомакромолекулы

© Е.Е. Слядников

Томский научный центр СО РАН
E-mail: ori@hq.tsc.ru

Поступило в Редакцию 16 сентября 2005 г.

Показано, что в информационной биомакромолекуле потенциальный рельеф электрона, ответственного за „переключение“ между конформациями биомолекулы, имеет двухъямный характер, поэтому систему конформационных возбуждений в информационной биомакромолекуле необходимо описывать как квантовую двухуровневую систему.

PACS: 87.15.-v

В последние годы наблюдается значительный интерес к гипотезе квантовой природы человеческого сознания [1]. Одним из возможных вариантов этой гипотезы является предположение, что сознание — это процесс, протекающий в квантово-полевой подсистеме мозга, которая благодаря своей квантовой природе способна чрезвычайно эффективно обрабатывать сенсорную и иную информацию, осуществлять сложные логические операции и т.п., т.е. выполнять те функции, которые обычно приписывают человеческому сознанию. Есть экспериментальные свидетельства, что в мозге подходящими субстратами для „квантовых вычислений“ являются информационные биомакромолекулы (микротрубочки цитоскелета, цепочки ДНК и другие периодические наноструктуры) [2]. Например, микротрубочки цитоскелета состоят из субъединиц, соединенных в линейном порядке, а каждая субъединица является димером, содержащим α - и β -молекулы тубулина. Тубулины — это молекулы-димеры, т.е. они могут существовать в двух пространственных конформациях. Для того чтобы произошло „переключение“ из одной конформации в другую, достаточно, чтобы один электрон „перескочил с места на место“. Недавно появились экспериментальные работы, в которых измерения диполя тубулина и проводимости микротрубочек показали, что микротрубочки являются сегнетоэлектриками при физиологической

температуре [3], оптически мерцают при метаболической активности [4]. Экспериментально определены приблизительные резонансные частоты структурных элементов биомолекулы, составляющие $10^{12} - 10^{15}$ Hz для механизма электронной поляризации. Обнаружены солитонные возбуждения в биомакромолекулах, вызванные когерентным электромагнитным излучением [5]. Для описания перечисленных явлений нужно формулировать новые микроскопические модели информационных биомакромолекул, учитывающие изменения поляризации биомолекул и возбуждение дополнительных степеней свободы [6].

Рассмотрим информационную биомакромолекулу, в которой происходит сегнетоэлектрический структурный переход, параэлектрик-сегнетоэлектрик. Для такого превращения элементарная ячейка биомакромолекулы содержит только одну биомолекулу тубулина, поэтому дипольные моменты молекул тубулина образуют только одну подрешетку. Пусть значение внешнего воздействия (температуры, внешнего поля) меньше критического, т.е. биомакромолекула находится в сегнетоэлектрической фазе. Поскольку тубулина — это молекулы-димеры, существующие в двух пространственных конформациях, то электрон молекулы тубулина, ответственный за „переключение“ между конформациями, находится в асимметричном потенциале, который имеет два различных по глубине локальных минимума. Левая глубокая яма соответствует исходной структуре биомакромолекулы (α -состоянию тубулина), а правая мелкая яма — конечной структуре биомакромолекулы (β -состоянию тубулина). Для простоты вычислений будем считать, что минимумы исходной и конечной структур биомакромолекулы лежат на одной оси, например x . Когда ширина локальных ям много меньше расстояния между ними для потенциала $U_a(x)$, в котором находится электрон, можно использовать следующее представление:

$$U_a(x) = -V_1 d\delta(x + b/2) - V_2 d\delta(x - b/2). \quad (1)$$

Здесь $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, ось x совпадает с осью, вдоль которой идет структурный переход в биомакромолекуле, b — расстояние между левым и правым минимумом потенциала, V_1, V_2 — глубина левой, правой ямы соответственно, d — ширина левой и правой локальной ямы. Интегралы $\int_{-\infty}^{\infty} V_1 d\delta(x + b/2) = V_1 d$, $\int_{-\infty}^{\infty} V_2 d\delta(x - b/2) = V_2 d$ дают нам площадь (мощность) локальной ямы в точке $-b/2$ и $b/2$ соответственно. Мы считаем, что левая локальная яма больше правой

($V_1 > V_2$), а расстояние между локальными ямами значительно больше ширины локальной ямы ($b \gg d$). Удобно разделить асимметричный потенциал $U_a(x)$ (1) на симметричную часть $U_s(x)$ с локальными ямами одинаковой глубины и поправку $\Delta U_a(x)$, связанную с разной глубиной (асимметрией) локальный ям

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

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

Предполагая асимметричную поправку малой $(V_1 - V_2)/V_1 \ll 1$, сначала исследуем движение электрона молекулы тубулина в симметричном потенциале, а асимметрию потенциала затем учтем по теории возмущений. Хорошо известно, что движение электрона в потенциальной яме $U_s(x)$ (2) подчиняется уравнению Шредингера [7]

$$[-(\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2 + U_s(x)]\Psi(x) = -\varepsilon\Psi(x), \quad (3)$$

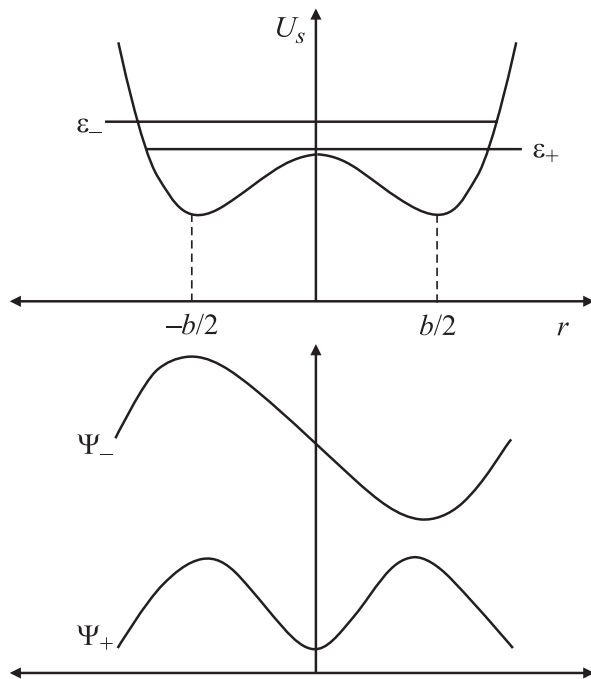
где $\Psi(x)$ — волновая функция электрона, $-\varepsilon$ — собственное значение энергии электрона, которое выбрано явно отрицательным ($\varepsilon > 0$), так как ищем только локализованные в потенциальной яме решения уравнения Шредингера. Симметричный потенциал $U_s(x)$ задает два равновесных положения электрона, причем при классическом движении электрона его основное состояние в каждой локальной яме дважды вырождено, т.е. $\varepsilon_+ = \varepsilon_-$ для четной $\Psi_+(x)$ и нечетной $\Psi_-(x)$ собственной волновой функции (см. рисунок). Учет квантового туннелирования электрона через потенциальный барьер между левой и правой локальной ямой снимает это вырождение ($\varepsilon_+ > \varepsilon_-$) и существенно влияет на динамику такой двухуровневой системы. Чтобы найти собственные энергии $\varepsilon_+, \varepsilon_-$ и собственные функции Ψ_+, Ψ_- из уравнения (3), запишем волновые функции Ψ_+, Ψ_- в виде

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

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

$$\Psi_{\pm} = A_{\pm} \{ \exp[-\kappa_{\pm}(x - b/2)] \pm \exp[-\kappa_{\pm}(x + b/2)] \} \text{ для } x > b/2. \quad (4)$$

Здесь κ_{\pm}^{-1} — характерный радиус локализации четной (+) и нечетной (-) волновой функции, A_{\pm} — нормировочная константа. Волновые



Основное состояние и собственные функции для симметричного двухъямного потенциала.

функции (4) должны удовлетворять граничным условиям и условиям нормировки, которые позволяют определить величины κ_{\pm} и A_{\pm} :

$$\Psi_{\pm}(-b/2 - 0) = \Psi_{\pm}(-b/2 + 0), \quad \Psi_{\pm}(b/2 - 0) = \Psi_{\pm}(b/2 + 0), \quad (5)$$

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

$$-(\hbar^2/2m)[\partial_x \Psi_{\pm}(b/2 + 0) - \partial_x \Psi_{\pm}(b/2 - 0)]\Psi(x) = -V_2 d \Psi_{\pm}(b/2), \quad (6)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_{\pm}(x)|^2 dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_+(x) \Psi_-(x) dx = 0. \quad (7)$$

Решая уравнение Шредингера (3) совместно с (5)–(7), получим

$$(\hbar^2/m)\kappa_{\pm} = V_2 d [1 \pm \exp(-\kappa_{\pm} b)], \quad \varepsilon_{\pm} = (\hbar^2/2m)\kappa_{\pm}^2. \quad (8)$$

Поправку к собственной энергии электрона $\hbar\Delta$, связанную с влиянием асимметрии потенциала $\Delta U_a(x)$, вычислим в первом порядке теории возмущений по волновым функциям четного и нечетного состояний (4)

$$\begin{aligned} \hbar\Delta = \langle \Psi_- | \Delta U_a | \Psi_+ \rangle &= (V_2 - V_1) d A_+ A_- [1 + \exp(-\kappa_+ b) \\ &\quad - \exp(-\kappa_- b) - \exp(-\kappa_+ b - \kappa_- b)]. \end{aligned} \quad (9)$$

В пределе „слабого“ туннелирования $\kappa_{\pm} b \gg 1$, что соответствует случаю классической двухуровневой системы, выражения (8), (9) принимают вид

$$\begin{aligned} (\hbar^2/m)\kappa_{\pm} &= V_2 d [1 \pm \exp(-K_q^{-1})], \quad k_0 = V_2 d / (\hbar^2/m), \\ K_q &= (\hbar^2/m) / (V_2 d b), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \hbar\omega = \varepsilon_+ - \varepsilon_- &= (\hbar^2/2m)[\kappa_+^2 - \kappa_-^2] = 2V_2 d k_0 \exp(-K_q^{-1}) \rightarrow 0, \\ \hbar\Delta &= (V_2 - V_1) d \kappa_+ / 4. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $\hbar\omega$ — расщепление энергий четного и нечетного состояний электрона, K_q — коэффициент квантовости двухуровневой системы, который мал, когда туннелирование мало, и стремится к единице, когда туннелирование велико. Из (10), (11) 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 состоянием электрона отсутствует и мы имеем дело с локализованным электроном в левой потенциальной яме. Проведем оценку величин (10), (11) для молекулы тубулина. Для значений $1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $\hbar = 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $V_2 = 6.4 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, $d = 10^{-10} \text{ m}$, $b = 10^{-8} \text{ m}$, $m_e = 10^{-30} \text{ kg}$, $V_1 - V_2 = 1.6 \cdot 10^{-23} \text{ J}$ получим $K_q^{-1} = 64$, $\kappa_0 = 6.4 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$, $\kappa_+ \cong \kappa_- = 6.4 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$, $\hbar\omega = 10^{-30} \text{ J} \approx 10^{-11} \text{ eV} \rightarrow 0$, $\hbar\Delta = 0.16 \cdot (V_2 - V_1) = -0.29 \cdot 10^{-23} \text{ J}$. Это означает, что для горба, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала, с высотой, равной $V_2 = 6.4 \cdot 10^{-19} \text{ J} \approx 4 \text{ eV}$, расщепление энергий $\hbar\omega$ стремится к нулю и квантовое туннелирование электрона в правую яму практически отсутствует, а асимметрия потенциала велика.

В пределе „сильного“ туннелирования $\kappa_{\pm}b \approx 1$, что соответствует случаю квантовой двухуровневой системы, выражения (8), (9) принимают вид

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

$$\begin{aligned} \hbar\Delta &= (V_2 - V_1)dA_+A_- \\ &\times [1 + \exp(-\kappa_+ b) - \exp(-\kappa_- b) - \exp(-\kappa_+ b - \kappa_- b)]. \quad (13) \end{aligned}$$

Из (12), (13) видно, что в пределе $\kappa_{\pm}b \approx 1$ расщепление энергий $\hbar\omega$ отлично от нуля, а туннельный эффект велик. Следовательно, когерентная связь между четным и нечетным состоянием электрона существует и мы имеем дело с квантовым движением электрона в двухъямном потенциале. Проводя оценку величин (12), (13) для значений $V_2 = 0.3 \cdot 10^{-19}$ J, $d = 10^{-10}$ m, $b = 10^{-8}$ m, $m_e = 10^{-30}$ kg, $V_1 - V_2 = 1.6 \cdot 10^{-23}$ J, получим $K_q^{-1} = 3$, $\kappa_0 = 3 \cdot 10^8$ m⁻¹, $\kappa_+ = 3.3 \cdot 10^8$ m⁻¹, $\kappa_- = 2.7 \cdot 10^8$ m⁻¹, $\hbar\omega = 2 \cdot 10^{-22}$ J ≈ 0.01 eV, $\hbar\Delta = 0.01 \cdot (V_2 - V_1) = -1.6 \cdot 10^{-25}$ J. Это означает, что для горба, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала, с высотой, равной $V_2 = 0.3 \cdot 10^{-19}$ J ≈ 0.2 eV, расщепление энергий $\hbar\omega$ отлично от нуля и квантовое туннелирование электрона велико, и необходимо учитывать квантовые свойства двухуровневой системы, а асимметрия потенциала значительно уменьшилась.

Таким образом, в двухъямном потенциале появляются дополнительные квантовые смещения электронов (туннелирование) в определенном направлении и на определенное расстояние — дискретные конформационные степени свободы. Следовательно, волновая функция электрона 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 \mathbf{z} . Для нашего случая двухуровневой системы волновая функция электрона будет иметь вид спинора $\Psi(x, S^z)$, который представляет собой совокупность двух различных функций координат четной $\Psi(x, +1/2) = \Psi_+(x)$ и нечетной $\Psi(x, -1/2) = \Psi_-(x)$, отвечающих различным значениям z -компоненты псевдоспина. Оператор псевдоспина при применении его к волновой функции $\Psi(x, S^z)$ действует только на переменную S^z . Для операторов

псевдоспина выполняются обычные коммутационные соотношения

$$[S_{ai}^\alpha, S_{bj}^\beta] = i\delta_{ab}\delta_{ij}S_{ai}^\gamma, \quad (14)$$

где $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ в пространстве псевдоспина, a, b нумеруют ячейки биомакромолекулы. Для каждой двухуровневой системы любой оператор частиц (эрмитова матрица второго порядка) может быть выражен через операторы псевдоспина $1/2$ (S^x, S^y, S^z и единичную матрицу).

В представлении четкой и нечетной волновых функций Ψ_+, Ψ_- , одночастичная потенциальная энергия электрона в ячейке a , в симметричном двухъямном потенциале будет иметь вид

$$H_0 = \hbar\omega S_a^z. \quad (15)$$

Потенциальную энергию взаимодействия электронов в различных ячейках, в простейшем случае, можно записать в виде суммы двухчастичных взаимодействий псевдоспинов:

$$H_1 = -(1/2) \sum_{a,b} J_{ab} S_a^x S_b^x. \quad (16)$$

Предложенная модель позволяет заключить, что в информационной биомакромолекуле, испытывающей сегнетоэлектрический структурный переход, одночастичный потенциальный рельеф электрона, ответственного за „переключение“ между конформациями биомолекулы, имеет двухъямный характер. Поэтому систему конформационных возбуждений в информационной биомакромолекуле необходимо описывать как квантовую двухуровневую систему (14)–(16). Эффект квантового поведения информационной биомакромолекулы становится существенным, когда высота горба, разделяющего левый и правый минимумы двухъямного потенциала в биомолекуле, становится менее $V_2 = 0.3 \cdot 10^{-19} \text{ J} \approx 0.2 \text{ eV}$, а площадь этого горба — $V_2b = 0.3 \cdot 10^{-27} \text{ J} \cdot \text{m}$. В рамках предложенной модели характерное расщепление энергий четного и нечетного состояний электрона (величина, характеризующая туннельный эффект) равно $\hbar\omega = 2 \cdot 10^{-22} \text{ J} \approx 0.01 \text{ eV}$, соответствующая частота туннелирования составляет $\omega = 2 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$, длина электромагнитной волны $\lambda = (3/2) \cdot 10^{-4} \text{ m}$, что согласуется с экспериментально определенными резонансными частотами и длинами волн структурных элементов биомакромолекулы.

Управляя внешним воздействием, можно изменять площадь горба, разделяющего минимумы двухъямного потенциала атома, квантовые свойства системы. Поэтому информационная биомакромолекула является естественной квантовой оптико-акустической системой, способной считывать, записывать, обрабатывать, генерировать и передавать информацию, т.е. выполнять те элементарные функции, которые обычно приписывают человеческому сознанию.

Список литературы

- [1] Пенроуз Р. Тени разума: в поисках науки о сознании. Ижевск: ИКИ, 2005. 690 с.
- [2] Hameroff S. // Journal of Consciousness Studies. 1994. J. 1. P. 91–118.
- [3] Tuszynski J.A., Hameroff S.H., Sataric M.V., Trpisova B.T., Nip M.L. // J. Theor. Biol. 1995. V. 174. P. 371–380.
- [4] Hunt C., Stebbings H. // Cell Motility and the Cytoskeleton. 1994. V. 27. P. 6978–6985.
- [5] Благодатских В.И., Горяев П.П. // Laser Physics. V. 6. N 4. P. 621–628.
- [6] Слядников Е.Е. // ФТТ. 2004. Т. 46. В. 6. С. 1065–1071.
- [7] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 521 с.