

Галанов Евгений Константинович

ОПТИЧЕСКИЕ ФОНОНЫ МОДЕЛЬНОЙ МЕМБРАНЫ НЕЙРОНА

Рассмотрена динамика модельной мембраны нейрона, образованной из структурированного бислоя молекул липидов, которые могут находиться в двух конформационных состояниях. Представленные решёточные колебания определяются вращательным движением полярной части молекул. Показано, что из набора фононных состояний в сферической мембране существуют только моды с волновым вектором, равным нулю.

Адрес статьи: www.gramota.net/materials/1/2017/1/5.html

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.

Источник

Альманах современной науки и образования

Тамбов: Грамота, 2017. № 1 (115). С. 19-22. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: www.gramota.net/editions/1.html

Содержание данного номера журнала: www.gramota.net/materials/1/2017/1/

© Издательство "Грамота"

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: www.gramota.net

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: almanac@gramota.net

УДК 535.34

Биологические науки

Рассмотрена динамика модельной мембраны нейрона, образованной из структурированного бислоя молекул липидов, которые могут находиться в двух конформационных состояниях. Представленные решёточные колебания определяются вращательным движением полярной части молекул. Показано, что из набора фоновых состояний в сферической мембране существуют только моды с волновым вектором, равным нулю.

Ключевые слова и фразы: нейрон; решёточные колебания; мембрана; конформационные состояния; колебательные моды.

Галанов Евгений Константинович, д.т.н., профессор

Петербургский государственный университет путей сообщения Императора Александра I
galanov-evgenijj@rambler.ru

ОПТИЧЕСКИЕ ФОНОНЫ МОДЕЛЬНОЙ МЕМБРАНЫ НЕЙРОНА

Биологические мембраны живого организма представляют собой структурированный бислой органических молекул. Липидные молекулы, входящие в состав биологических мембран, могут находиться в различных конформационных состояниях [2]. Химический состав и структура липидов, образующих биологические мембраны, разнообразны. Общей особенностью этих молекул является наличие в их структуре полярных «головок» и гидрофобных «хвостов». Содержание липидов в биологических мембранах достигает 60-90%; образуя регулярную структуру мембран, липидные молекулы определяют фазовое состояние этих структур и их физические свойства.

Важнейшим физическим свойством биологических мембран является наличие мембранного потенциала, который играет особую важную роль в работе нервных клеток. Этот потенциал присущ мембране тела нейрона и глионов, а также мембране аксона нейронов. Мембранный потенциал определяется разной проницаемостью мембраны для тех или иных ионов (прежде всего, транспорта ионов через каналы). Важно, что липиды мембраны, обладая дипольным моментом и структурированные в мембране (лиотропный жидкий кристалл), создают собственную разность потенциалов, которая может меняться при фазовом переходе.

В связи с мезоморфизмом липидных мембран целесообразно рассмотреть динамику молекул в свободном и связанном (мембрана) состоянии.

Рассмотрим некоторые динамические свойства модельной мембраны, составленной из липидных молекул, образующих сферу (Рис. 1). Геометрические параметры этой сферы возьмём близкими к геометрическим параметрам мембраны нервных клеток: $R_0 \approx 50$ мкм, $d \approx 10$ нм [1].

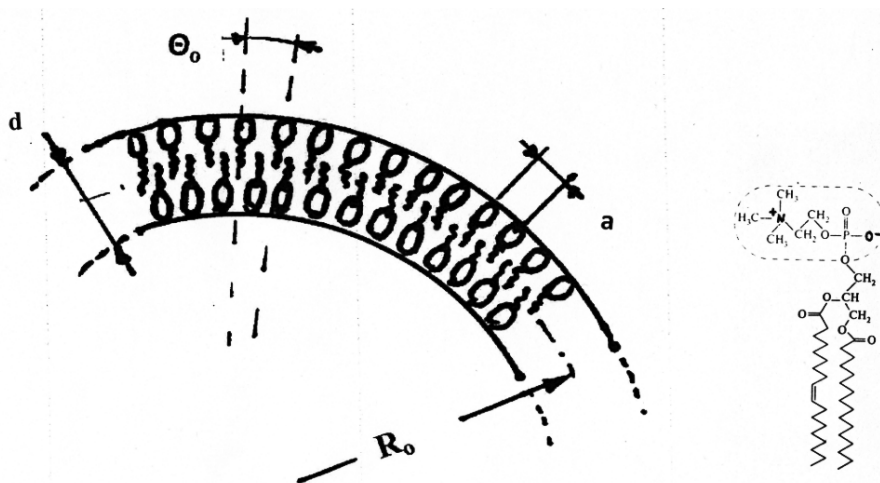


Рис. 1. Схема сферической мембраны, состоящей из липидных молекул (полярные группы молекул изображены в виде эллипсоидов)

1. Липидные молекулы могут находиться в двух конформационных состояниях, соответствующих двум основным электронным состояниям молекулы. Считаем, что: 1) энергии основных электронных состояний молекул конформаций 1 и 2 отличаются на величину $\Delta E(0)_{1,2} = E(0)_1 - E(0)_2 = 1-10$ кДж/моль (т.е. $\Delta E(0)_{1,2} \approx 0,002-0,02$ эв/молекула = $20-200$ см⁻¹/молекула), что типично для органических молекул разных конформаций [9-10]; 2) первое возбуждённое электронное состояние молекул конформаций 1 и 2 отстоит от основного состояния на величину $\Delta E(0,1)_{1,2} = E(1)_{1,2} - E(0) \geq 5$ эв = 50000 см⁻¹ (типичное для органических молекул [8; 11; 12]). Таким образом, $\Delta E(0,1)_{1,2} \gg \Delta E(0)_{1,2}$.

Полагаем, что вероятность перехода $P_{12}(\tau) = |a_{12}(\tau)|^2$ между основными электронными состояниями молекул $E(0)_1$ и $E(0)_2$ (т.е. вероятность спонтанного и вынужденного переходов под действием электромагнитного излучения, а также вероятность переходов в результате релаксации поступательного, вращательного и колебательного движений) мала так, что время жизни в любом из состояний $E(0)_1$ и $E(0)_2$ велико: $\tau \geq 1$ с.

Считаем, что молекулы находятся в термостате. Объём молекул значительно меньше объёма термостата, поэтому рассматриваемые молекулы не взаимодействуют друг с другом (молекулы находятся в нейтральном растворителе или газообразном состоянии). Считаем температуру термостата равной $T = 300 \text{ K}$ ($kT \approx 0,025 \text{ эв} = 250 \text{ см}^{-1}$).

Гамильтониан, определяющий состояние изолированной молекулы, в адиабатическом приближении имеет вид:

$$H(r,R) = H_0(r,R) + T(R), \quad (1)$$

$$H_0(r,R) = V(r,R) + T(r), \quad (2)$$

где r и R – совокупность координат электронов и ядер, соответственно, $V(r,R)$ – оператор потенциальной энергии взаимодействия между всеми частицами, $T(r)$ и $T(R)$ – операторы кинетической энергии электронов и ядер, соответственно.

Волновые функции стационарных состояний оператора Гамильтона (1) определяются из решения уравнения:

$$(H-E)\Phi(r,R) = 0, \quad (3)$$

где $\Phi(r,R) = \sum_i \varphi_i(r,R)\Psi_i(R)$ – собственные функции оператора (2) в адиабатическом приближении (учитываются электронные состояния двух конфигураций $i = 1, 2$).

Подставляя (4) в (3), умножая на $\varphi^*(r,R)$ и интегрируя, в адиабатическом приближении получим:

$$[T(R) + U_i(R)]\Psi_i(R) = \varepsilon_i \Psi_i(R). \quad (4)$$

Заменяем R на обобщённые координаты Q_j :

$$[T(Q_j) + U_{ij}(Q_j)]\Psi_{ij}(Q_j) = \varepsilon_{ij} \Psi_{ij}(Q_j). \quad (5)$$

В адиабатическом приближении волновая функция молекулы в состоянии (i, j) определяется соотношением:

$$\Phi_{ij} = \varphi_i(Q_0, r)\Psi_{ij}(Q_j, r). \quad (6)$$

Энергия этих состояний равна:

$$E_{ij} = E_i(Q_0) + \varepsilon_{ij}, \quad (7)$$

где $|E_i(Q_0)| \gg |\varepsilon_{ij}|$, Q_0 – равновесная конфигурация ядер.

Динамика изолированной молекулы определяется набором колебаний $N = (3n-6)$, где n – число атомов, входящих в состав молекулы. Энергии колебательных квантов валентных и деформационных колебаний молекул имеют значения $3500-400 \text{ см}^{-1}$ [5]. К особому виду деформационных колебаний относятся колебания фрагментов вокруг одиночных связей (горсионные, веерные). Энергии квантов этих колебаний равны $20-400 \text{ см}^{-1}$ [4; 5; 8].

Из набора N колебаний молекул липидов (определяемых обобщёнными координатами Q_i) будем рассматривать одно колебание, определяемое вращательным движением полярной «головы» молекулы вокруг длинной оси молекулы и характеризующее обобщённую координату $Q = x$. При таком колебательном движении меняется ориентация электрического диполя полярной «головки» и, следовательно, изменяется проекция вектора дипольного момента молекулы на плоскость, перпендикулярную длинной оси молекулы (а в случае мембраны – на плоскость мембраны).

Возьмём потенциалы этого осциллятора в состояниях $i = 1, 2$ в форме [3]:

$$U_1(x) = kx^4, \quad (8a)$$

$$U_2(x) = kx^4 + U_0 \exp[-2(x+1)^2]. \quad (8b)$$

Гамильтониан рассматриваемых ангармонических осцилляторов имеет вид:

$$H_1(x) = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2) + kx^4, \quad (9a)$$

$$H_2(x) = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2) + kx^4 + U_0 \exp[-2(x+1)^2], \quad (9b)$$

где m – приведенная масса осциллятора, x – обобщённая координата, k – приведенная силовая координата.

Собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона (9) найдены вариационным методом (U_0 принято равным 20 см^{-1}). Волновые функции основного и первых возбуждённых колебательных состояний, определённые из условия нормируемости и ортогональности волновых функций, имеют вид:

$$\begin{aligned} \Psi_{1,0} &= (\alpha/\pi)^{1/4} \exp(-0,5\alpha x^2), \quad \alpha = (6 \text{ км/л}^2)^{1/3} \\ \Psi_{1,1} &= (\beta^3/\pi)^{1/4} x \exp(-0,5\beta x^2), \quad \beta = (10 \text{ км/л}^2)^{1/3}, \\ \Psi_{1,2} &= (\gamma^3/\pi)^{1/4} [x^2(\alpha+\gamma)-1] \exp(-0,5\gamma x^2)/(0,75\alpha^2+0,5\alpha\gamma+0,75\gamma^2), \quad \gamma = (6,86 \text{ км/л}^2)^{1/3}, \\ \Psi_{2,0} &= 0,85 \exp[-0,815(x+0,466)^2], \\ \Psi_{2,1} &= 1,37(x+0,21) \exp[-0,8(x-0,03)^2], \\ \Psi_{2,2} &= 1,77(x^2-0,4) \exp[-0,8(x+0,1)^2]. \end{aligned}$$

Энергетическое расстояние между уровнями $\varepsilon_{1,1}$ и $\varepsilon_{1,0}$ принято равным $\Delta\varepsilon_{1,1;1,0} = 100 \text{ см}^{-1}$.

Собственные значения гамильтониана $H_1(x)$ и $H_2(x)$ равны $\varepsilon_{1,0} = 39 \text{ см}^{-1}$, $\varepsilon_{1,1} = 139 \text{ см}^{-1}$, $\varepsilon_{1,2} = 274,8 \text{ см}^{-1}$ и $\varepsilon_{2,0} = 22 \text{ см}^{-1}$, $\varepsilon_{2,1} = 132 \text{ см}^{-1}$, $\varepsilon_{2,2} = 291,7 \text{ см}^{-1}$, соответственно.

В случае равновесного распределения молекул по состояниям $\Phi_{1,j}$, $\Phi_{2,j}$ (1 и 2 – основное электронное состояние молекул конформаций **a** и **б**, j – колебательные уровни) функция распределения имеет известный [10] вид:

$$f_n = 1/Z_n \exp(g_n E_n/kT); \quad Z_n = \sum_n E_n \exp(g_n E_n/kT). \quad (10)$$

При температуре $T \approx 300$ К и разности энергий основных электронных состояний $\Delta E(0)_{1,2} = E(0)_2 - E(0)_1 = 0,002$ эв (20 см^{-1}) вероятности нахождения молекул в разных конформационных состояниях отличаются не более, чем на 5%.

2. Рассмотрим систему взаимодействующих молекул липидов, образующих сферическую мембрану. На Рис. 1 полярные группы («головки») молекул липидов изображены в виде эллипсоидов. Полагаем, что основное взаимодействие молекул липидов в мембране осуществляется благодаря полярным группам (учитывается взаимодействие ближайших соседей). Оператор диполь-дипольного взаимодействия имеет вид:

$$W(\hat{p}_n, \hat{p}_m) = \frac{(\hat{p}_n \hat{p}_m)(\hat{r}_{nm})^2 - 3(\hat{p}_n \hat{r}_n)(\hat{p}_m \hat{r}_m)}{(r_{nm})^5}, \quad (11)$$

где \hat{p}_n, \hat{p}_m – операторы дипольных моментов молекул n и m ($m = n \pm 1$), $\hat{r}_{nm} = \hat{r}_{nm}(\theta, \phi)$ – радиус-вектор, θ и ϕ – сферические углы, задающие положение диполей в мембране.

Гамильтониан системы N осцилляторов мембраны с учётом диполь-дипольного взаимодействия ближайших соседей можно записать в виде:

$$H_i(x, \theta, \varphi) = \sum_{n=1}^N H_i + \sum_{n=1}^N W_{n, n \pm 1}, \quad (12)$$

где H_i – гамильтониан изолированной молекулы, находящейся в состоянии i ($i = 1, 2$).

Учитывая трансляционную симметрию мембранной структуры, волновую функцию, соответствующую оператору Гамильтона (12), можно представить (в нулевом приближении) в виде:

$$\Psi_{ijq}(\theta, \varphi) = N^{-1/2} \sum_n \Psi_{ij}(\theta + n\theta_0, \varphi + n\varphi_0) \exp(iqn), \quad (13)$$

где Ψ_{ij} – волновые функции изолированных молекул, $q = (2\pi n_1/N_1\theta_0 + 2\pi n_2/N_2\varphi_0)$ – волновой вектор, $N_1 N_2 = N$; $\theta_0 = 2\pi/N_1$, $\varphi_0 = 2\pi/N_2$ ($\theta_0 = \varphi_0 = 2\pi a/2\pi R_0 \approx 2 \cdot 10^{-5}$ рад, где $a \approx 1$ нм – расстояние между соседними молекулами).

При малом перекрытии волновых функций соседних молекул получим выражение для собственных значений гамильтониана:

$$\varepsilon_{ijq} = \varepsilon_{ij} + 2 \cdot J \cdot \cos(q(\theta, \varphi)), \quad (14)$$

$$J = \int \Psi_{ij}^*(\theta, \varphi) \cdot W_{n, n \pm 1} \cdot \Psi_{ij}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi,$$

где ε_{ij} – собственные значения гамильтониана (9а, 9б) изолированных молекул липидов.

Величина матричного элемента J зависит в основном от величины дипольного момента полярной «головы» липидной молекулы и расстояния (a) между соседними молекулами.

На основании данных величины дипольного момента структур, подобных полярной группе молекулы липида [6; 7], а также расстояния $a \approx 1$ нм между соседними молекулами в мембране [Там же] можно оценить значение J в пределах 10 - 20 см^{-1} .

На Рис. 2 представлена схема зон, образованных из колебательных уровней $j = 0, 1$ молекул, находящихся в состояниях $i = 1, 2$. Подобные схемы можно представить для колебательных состояний $j = 2, 3 \dots$. Энергия колебательных состояний $i = 1$ и $i = 2$ отсчитывается от основного электронного состояния молекулы, величина которого принята равной (-5 эв = -50000 см^{-1}) – типичная для органических молекул типа липидов [11; 13].

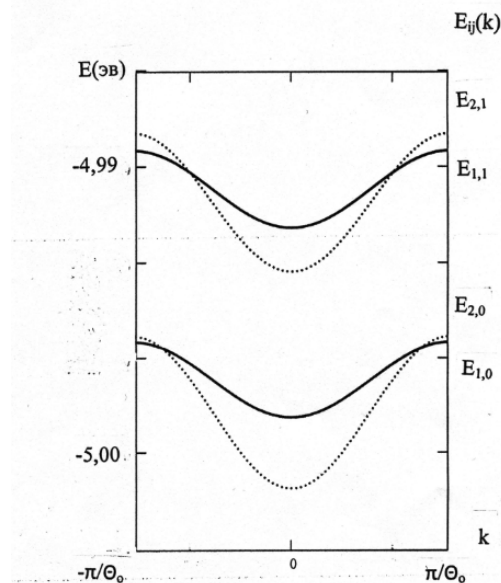


Рис. 2. Зонная структура фоновых состояний $i = 1, j = 0, 1$ (···) и $i = 2, j = 0, 1$ (—) мембраны, образованной молекулами липидов. Энергия колебательных состояний отсчитывается от основного электронного состояния, величина которого принята равной (-5 эв = 5000 см^{-1})

Разрешённые моды колебательных ветвей определяются симметрией мембраны. Симметрия сферической мембраны относится к трёхмерной группе вращений $O(3)$. Базисными функциями представлений этих групп являются полиномы степени l [12]:

$$P = \sum_{a,b} C_{ab} (x+ly)^a (x-ly)^b z^{l-a-b}, \quad (15)$$

где разность $(a-b)$ может принимать значения от $-l$ до $+l$.

В сферических координатах R, θ, φ полиномы степени l записываются в виде произведений:

$$\Psi_{ijq}(R, \theta, \varphi) = R^l Y_m(\theta, \varphi), \quad m = -l, \dots, +l, \quad (16)$$

$$Y_m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_m^l \exp(im\varphi).$$

В случае тонкой мембраны ($R_0 \gg d$) имеем $l = 0$; R^l представляет собой нормированную константу (радиус мембраны). Из всех сферических функций разрешены лишь функции (моды) с $l = 0, m = 0$. Ограничение по $l = 0$ и $m = 0$ означает, что из всех состояний $\Psi_{ijq}(R, \theta, \varphi)$ возможно лишь состояние с волновым вектором $q = 0$.

В реальных клеточных мембранах это ограничение снимается, так как:

1. мембраны не являются идеальными сферами;
2. трансляционная симметрия мембраны (составленной из молекул липидов) нейронов нарушается белковыми структурами, служащими каналами проводимости ионов K^+, Na^+, \dots ;
3. рассмотренные колебательные фононы взаимодействуют с другими фононами мембраны.

В достаточном приближении можно считать, что волновые векторы q могут меняться в узком диапазоне $q = 0 - 2\pi/1000a_0$.

3. Равновесие двух фазовых состояний ($E_{i=1,j,q}(0)$ и $E_{i=2,j,q}(0)$) мембраны определяется равенством их свободных энергий:

$$F_{i=1,j}(q) = F_{i=2,j}(q), \quad (17)$$

$$F_{i,j}(q) = -kT \ln[\sum_{i,j,q} g_i \exp(-E_{ij}(q)/kT)]. \quad (18)$$

Полагая кратность вырождения электронных уровней i равной $g_i = 1$, имеем:

$$\ln[\sum_{j,q} \exp(-E_{1,j}(q)/kT_c)] = \ln[\sum_{j,q} \exp(-E_{2,j}(q)/kT_c)], \quad (19)$$

где T_c – температура фазового перехода.

При температурах, отличных от T_c , вероятность перехода $(1,j,q) \leftrightarrow (2,j,q)$ бесконечно мала, так как определяется произведением вероятностей $P_{12}(\tau)$, каждая из которых имеет малую величину.

При фазовом переходе происходит изменение заселённости зон $j(q)$. Низкотемпературная фаза отличается от высокотемпературной фазы повышенной заселённостью (как следует из Рис. 2) состояний с малым волновым вектором.

Список литературы

1. Абертс Б., Брей Д., Рэфф Дж., Льюис М., Робертс К. Молекулярная биология клетки. М.: Мир, 1994. 435 с.
2. Антонов В. Ф., Смирнов Е. Ю., Шевченко Е. В. Липидные мембраны при фазовых превращениях. М.: Наука, 1992. 350 с.
3. Галанов Е. К. Колебательные спектры ангармонических осцилляторов молекулярных кристаллов // Оптический журнал. 2010. Т. 77. № 9. С. 8-10.
4. Галанов Е. К., Бродский И. А. Длинноволновые ИК-спектры сегнетоэлектрических кристаллов группы триглицин-сульфата в различных фазовых состояниях // Физика твёрдого тела. 1969. Т. 11. С. 2485-2488.
5. Грибов Л. А. Колебания молекул. М.: ЛИБРОКОМ, 2008. 450 с.
6. Капустин А. П. Экспериментальные исследования жидких кристаллов. М.: Мир, 1994. 368 с.
7. Овчинников Ю. А. Био-органическая химия. М.: Лань, 1996. 430 с.
8. Панченко Ю. А., Абрамов А., Бок Ч. У. Структура и спектры аминокислот // Журнал структурной химии. 2011. Т. 52. С. 48-54.
9. Потапов В. М. Стереохимия. М., 1988. 535 с.
10. Сталл Д., Вестрам Э., Зинке Г. Химическая термодинамика органических соединений. М., 1971. 475 с.
11. Стокач Н. С., Шигорян Д. Н., Щеглова Н. А. Электронно-колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1982. 360 с.
12. Хамермеш М. Теория групп и её применение к физическим проблемам. М.: УРСС, 2002. 540 с.
13. Шигорян Д. Н., Валькова Г. А., Гастолович Е. А. Электронно-возбуждённые состояния многоатомных молекул. М.: Наука, 1982. 468 с.

OPTICAL PHONONS OF NEURON MODEL MEMBRANE

Galanov Evgenii Konstantinovich, Doctor in Technical Sciences, Professor
Emperor Alexander I St. Petersburg State Transport University
galanov-evgeniji@rambler.ru

The paper considers dynamics of the neuron model membrane formed of the structured bilayer of lipid molecules that can exist in two conformational states. The presented lattice oscillations are determined by rotational movement of the polar part of the molecules. It is shown that out of the set of the phonon states only modes with the wave vector equal to zero can exist in the spherical membrane.

Key words and phrases: neuron; lattice oscillations; membrane; conformational states; oscillatory modes.