

ЗНОВУ ПРО КОГЕРЕНТНІСТЬ У ЖИВОМУ СВІТІ

(для підготовлених читачів)

“Сложно ли? Спорно ли?

Просто, как в формуле”

С.Кірсанов, радянський поет

У №4 «Країни знань» за 2008 рік ми ознайомились із концепцією біологічної когерентності видатного фізика ХХ ст. Герберта Фрьоліха. Відзначимо, що ця концепція спирається не лише на умоглядні міркування, а й на конкретну модель, яку можна дослідити кількісно. У цій статті ми детальніше прослідкуємо за ходом думок англійського теоретика, проаналізуємо рівняння, що описують поведінку модельної біологічної системи, а також спробуємо сформулювати задачі для самостійних досліджень. Хоча цей шлях не буде простим і вимагатиме певних зусиль, отриманий результат дасть чудову можливість проводити оригінальні дослідження на високому науковому рівні.



Фаншон Фрьоліх
«Мій чоловік Герберт».

Г.Фрьоліх – всесвітньо визнаний фахівець з квантової теорії твердого тіла, тому не дивно, що його підхід до розгляду Живих систем базується на положеннях, запозичених саме з цього розділу фізики. Таке запозичення не можна вважати формальним. Давно помічено, що у біології існує своєрідна ніша, яка розташовується між молекулярною та клітинною біофізикою. Цю нішу мав би заповнити розділ з умовною назвою «над-молекулярна біологія», де біологічні системи вивчалися б саме з позиції фізики твердого тіла. У свій час лауреат Нобелівської премії, один із засновників квантової механіки, Е.Шредінгер здивував науковий світ парадоксальним визначенням: «Білок – це аперіодичний кристал». Насправді, ніяких парадоксів цей вислів не містить, а лише узагальнює той незаперечний факт, що біологічна система є структурно упорядкованим середовищем. Властивості такого середовища, аналогічно до

кристалічного твердого тіла, можна описати за допомогою *квазічастинок* (від. лат. *quasi* – нібито) – одного з фундаментальних понять квантової теорії конденсованого стану речовини. Квазічастинки дуже схожі на звичайні мікročастинки наявністю маси, імпульсу, кінетичної енергії. Однак, якщо звичайні частинки існують самі по собі, зокрема і в вакуумі, квазічастинки не можуть існувати поза конденсованим середовищем.

Г.Фрьоліх зробив припущення, що для функціонування біосистеми ключову роль відіграють *фонони*. З’ясуємо, що це за об’єкти.

Рух атомів твердого тіла за кімнатної температури зводиться до малих коливань відносно положення рівноваги. Коливальний рух складної системи із багатьма ступенями свободи може бути представлено як накладання окремих «нормальних» коливань (їх ще називають *модами*), кожне з яких має свою власну часто-

ту. Загальна енергія коливального руху системи виявляється рівною сумі енергій окремих нормальних коливань. У кристалі нормальні коливання формують пружні хвилі, що розповсюджуються через усю кристалічну ґратку. Якщо розглядати коливальний рух з позиції квантової механіки, виявиться, що енергія та імпульс, пов'язані з кожним нормальним коливанням (кожною хвилею), квантуються, тобто можуть набувати лише певних значень, кратних деяким величинам, які мають фізичний зміст енергії та імпульсу «елементарних збуджень» коливального руху. Кожне таке елементарне збудження можна розглядати як квазічастинку, яку називали *фонон*, від грецького слова «*φωνη*» (*фоне*) – «голос», оскільки, одним з різновидів пружних хвиль у кристалічній ґратці є звук.

Положення, які Г.Фрьоліх поклав в основу своєї моделі, цілком очевидні. По-перше, жива система є термодинамічно нерівноважною, вона постійно підживлюється зовні енергією *метаболізму*. По-друге, біологічна система на клітинному рівні містить сильно поляризовані ділянки. Наприклад, дуже висока напруженість внутрішнього електричного поля (10^5 В/см) поляризує мембрану, що оточує клітину, і може призвести до електричних коливань ділянок мембрани. По-третє: між елементами біосистеми існує *нелінійна* взаємодія.

Модель Фрьоліха містить три складових – коливальну систему полярних диполів (заряджених осциляторів), які входять у склад мембрани або макромолекули, джерело енергії (хімічні реакції, що супроводжують процес метаболізму) та тепловий резервуар. Г.Фрьоліх висловив припущення, що осцилятори в результаті взаємодії між собою формують спектр нормальних коливань з частотами: $n_1 < n_2 < \dots < n_i < \dots$. Коливання збуджуються завдяки енергії, що поступає зовні.

Якщо n_i осциляторів коливаються з частотою ν_i , то кажуть, що у системі збуджено i -у моду, а n_i називають її заселеністю (за аналогією з терміном «заселеність рівнів енергії атомів»). Для збудження моди з частотою ν_i необхідно, щоб система поглинула квант енергії $e_i = h\nu_i$. Заселеність коливальних мод $n(n)$ буде розподілена за таким самим законом, що і спектр квантів електромагнітної енергії $e(n)$. За умови термодинамічної рівноваги функція $e(n)$ описується формулою Планка. Схожий вираз буде і для рівноважної заселеності коливальних мод:

$$n_{i0} = n_0(n_i) : \frac{1}{e^{h\nu_i/kT} - 1},$$

де h – стала Планка, k – стала Больцмана, T – температура.

За умови притоку енергії зовні, заселеність мод буде розподілена нерівноважно: $n_i > n_{i0}$, де n_{i0} – рівноважна заселеність i -ї моди.

Енергія, що поступає в систему зовні, розподіляється між коливаннями осциляторів та тепловим резервуаром. Г.Фрьоліх запропонував цей перерозподіл енергії описувати кінетичним рівнянням:

$$n'_i = \frac{dn_i}{dt} = s_i - f_i \frac{n_i - n_{i0}}{n_{i0}},$$

де n'_i - відносна швидкість зміни нерівноважної заселеності i -ї моди, s_i - число квантів енергії метаболізму, що поступає в i -у моду за одиницю часу, f_i - деякий коефіцієнт, пропорційний до ймовірності відповідного процесу.

Підставимо у цей вираз розподіл для n_{i0} , та дещо перетворимо формулу:

$$n'_i = s_i - f_i \left[n_i e^{m_i/kT} - (n_i + 1) \right].$$

Це кінетичне рівняння є *лінійним* відносно n_i , перший доданок у квадратних дужках показує зменшення коливальної енергії i -ї моди внаслідок взаємодії з тепловим резервуаром, а другий – її збільшення із тієї ж причини. В стаціонарному та термодинамічно рівноважному стані, коли $n'_i = 0$ та $s_i = 0$, заселеність мод буде також рівноважною, тобто $n_i = n_{i0}$.

Система зарядів, що коливаються, може обмінюватись енергією з тепловим резервуаром не прямо, а опосередковано - внаслідок обміну квантами енергії, що випромінюються та поглинаються двома елементарними осциляторами. Нехай осцилятори коливаються з частотами n_1 та n_2 . Якщо $n_1 > n_2$, передача збудження від першого осцилятора до другого супроводжується віддачею надлишку енергії, що дорівнює $\Delta E = (n_1 - n_2) \cdot h$, тепловому резервуару. У протилежному випадку, тобто, коли $n_1 < n_2$, передача збудження можлива за умови «позичання» енергії, якої не вистачає, з резервуару.

Отже, такий тип взаємодії призводить до своєрідної «перекачки» енергії між нормальними модами з різними частотами. Г.Фрьоліх запропонував описувати цей процес *нелінійним* кінетичним рівнянням:

$$n'_i = - \sum_j \chi_{ij} \left[n_i (n_j + 1) \cdot e^{h\nu_i/kT} - (n_i + 1) n_j \cdot e^{h\nu_j/kT} \right],$$

де χ_{ij} - коефіцієнт, пропорційний до ймовірності відповідного процесу.

Остаточно, кінетичне рівняння для i -ї моди, у якому враховано як лінійну, так і нелінійну взаємодію, а також енергію метаболізму, що додається до теплової, матиме вигляд:

$$n'_i = s_i - \phi_i (n_i e^{h\nu_i/kT} - (n_i + 1)) - \sum_j \chi_{ij} \left[n_i (n_j + 1) \cdot e^{h\nu_i/kT} - (n_i + 1) n_j \cdot e^{h\nu_j/kT} \right].$$

Для обмеженої кількості мод N та за умови стаціонарності ($n'_i = 0$) маємо систему N нелінійних рівнянь з N невідомими $n_1, n_2, \dots, n_N$. Це і є система кінетичних рівнянь Фрьоліха для моделі біологічної клітини в стані активного метаболізму.

На перший погляд, ця система дуже складна для аналізу. Однак, закладений у ній глибокий фізичний зміст дає підстави для суттєвих спрощень (зокрема, мо-

жна вважати, що $f_i = f$, $c_{ij} = c$ та $s_i = s$), і це дозволило Г.Фрьоліху знайти аналітичний розв'язок у вигляді:

$$n_i = A \cdot \frac{1}{e^{\frac{h(n_i - m)/kT}{-1}}},$$

де A та m - деякі сталі, причому: $0 \leq m \leq n_1$.

Відзначимо, що саме наявність параметра m , який залежить від інших параметрів моделі f , c та s , відрізняє нерівноважну заселеність n_i від рівноважної n_{i0} . Ця відмінність є принциповою. За певних умов, зокрема, при достатньо швидкому надходженні у систему енергії метаболізму, значення m наближається до n_1 , відповідно, заселеність n_1 стає дуже великою. Іншими словами, майже уся енергія «перекачується» в моду з найнижчою частотою n_1 . Фізично це означає, що система, яка складається з багатьох осциляторів, перетворюється на єдиний гігантський осцилятор.

Такого роду фізичні явища, коли величезна кількість мікрочастинок починають поводити себе узгоджено, як єдиний колектив – є прояв квантових властивостей матерії у макроскопічному масштабі. До *колективних явищ*, зокрема, належать надпровідність, надплинність, а також лазерна генерація¹.

Отже, за Фрьоліхом, ділянка біологічної мембрани або частина макромолекули за відповідних умов перетворюється на своєрідний «фононний» лазер, тобто, генерує когерентні електропружні хвилі.

Аналіз своєї моделі Г.Фрьоліх проводив у 70-х роках ХХ ст., коли потужності електронно-обчислювальної техніки були недостатніми для чисельного розв'язування системи багатьох рівнянь. Незрівнянно вищі можливості нинішніх персональних комп'ютерів дають чудову нагоду дослідити модель англійського вченого за допомогою стандартних програм чисельних обчислень.



Фаншон Фрьоліх
«Спіраль проти магнітного поля»

Вже найпростіша система, що містить лише два зв'язаних осцилятори, виявляє основні властивості моделі Фрьоліха. Нижче показано робочу область середовища MathCAD, де чисельно розв'язано систему двох рівнянь. Зверніть увагу на значення параметрів моделі f , c та s , а також частоти нормальних коливань ($n_1 = 100$ ГГц, $n_2 = 200$ ГГц) та температуру ($T = 300$ К), які «заховані» у виразі $e^{\frac{h n_i}{kT}}$. Результати обчислень вказують на те, що за даних умов заселеність першої моди суттєво більша, ніж за-

¹ Цікавий факт: дружина Герберта Фрьоліха – художниця-модерністка Фаншон Фрьоліх - назвала групу своїх односторонніх фізичних термінів «Collective phenomena» (колективне явище). Та й уся її творчість – це спроба художнього відображення абстрактних фізичних понять.

селеність другої ($n_1 \gg n_2$). Якщо у рівняння підставити значення $s = 0$ (що відповідає термодинамічній рівновазі) або $c = 0$ (немає взаємодії між осциляторами), отримаємо рівноважну заселеність: $n_1 \approx n_2$.

Given	
$0 = -1 + 0.01 \cdot [n1 \cdot 1.002 - (n2 - 1)] + 0.001 \cdot [n1 \cdot (n2 + 1) \cdot 1.002 - n2 \cdot (n1 + 1) \cdot 1.003]$	
$0 = -1 + 0.01 \cdot [n2 \cdot 1.003 - (n1 - 1)] + 0.001 \cdot [n2 \cdot (n1 + 1) \cdot 1.003 - n1 \cdot (n2 + 1) \cdot 1.002]$	
Find(n1,n2) →	
	$\begin{pmatrix} -12925.556699859067215 & 84389.556699859067215 \\ 74617.03779990604481 & 9740.2955334272885236 \end{pmatrix}$
Приклад чисельного розв'язання системи двох нелінійних рівнянь у середовищі MathCAD. Програма знайшла два рішення. Фізичний зміст має друге рішення (другий стовпчик), де корені додатні, і згідно з яким $n_1 \approx 8,4 \cdot 10^4$ та $n_2 \approx 9,7 \cdot 10^3$.	

Модель Фрьоліха є унікальною з огляду на закладені у ній можливості для самостійних досліджень. Сформулюємо кілька питань, пошук відповіді на які може скласти предмет серйозної наукової роботи:

1. Чим буде відрізнятися поведінка системи для більшої кількості осциляторів (наприклад, $N = 10$) ?
2. При яких значеннях енергетичного потоку зовні відбувається перехід системи у режим «гігантського диполя»?
3. За яких умов енергію накопичуватиме не перша, а якась інша мода?

Насамкінець варто відзначити, що у даному напрямку активно працює група науковців під керівництвом доктора І.Покорни з Празького Інституту Радіоелектроніки. Саме він люб'язно надіслав автору матеріали, які допомогли з'явитися на світ цій статті.