

UNIVERSITET U NOVOM SADU

PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET

Природно-математички факултет  
Радна заједница заједничких послова  
НОВИ САД

При. №:	24. IV 1979		
Орг. јед.	Број	Сад	Бројдокумент
03	10/39		

DIPOLNI MODEL ZA OBJAŠNJENJE NEKIH FENOMENA  
U BIOLOŠKIM MEMBRANAMA

- diplomski rad -

Matić M. Dušan

Novi Sad 1979

Iskreno se zahvaljujem  
prof.Dr Bratislavu Tošiću  
koji mi je predložio temu  
za diplomski rad i svojim  
savetima pružio dragocenu  
pomoć pri njegovoј izradi.

*Zlatan*

# S A D R Ž A J

str.

## UVOD

I. SISTEM DIPOLA U STRUKTURI SA NARUŠENOM SIMETRIJOM	2
I.1. Dipol-dipolna interakcija u dielektričnoj sredini	2
I.2. Moguće orijentacije dipola u narušenoj kubnoj strukturi	4
I.3. Ponašanje izolovanog dipola u ravni	6
I.4. Ponašanje izolovanog dipola duž izabranog pravca	9
II. DIPOLI U MEMBRANI	12
II.1. Dipolni model za membranu (izolovani dipol)	12
II.2. Dipol-dipolna interakcija u membrani	17
II.3. Elementarno pobudjenje sistema	20
II.4. Procena energija i bioprocesi za koje bi dipolni mehanizam bio od značaja	23
ZAKLJUČAK	25
LITERATURA	

## U V O D

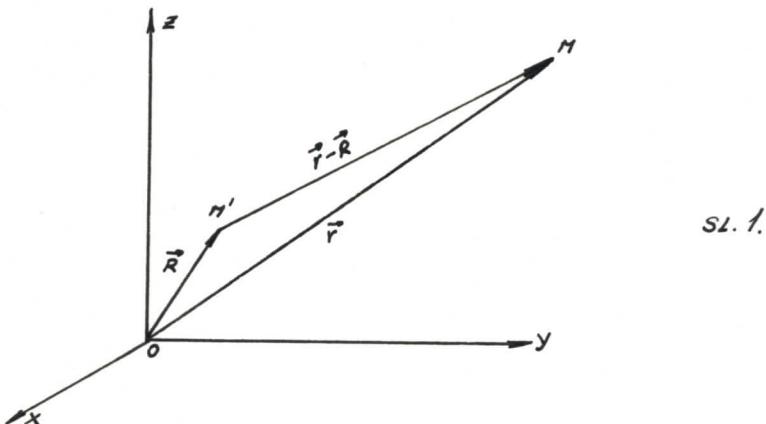
Cilj ovog diplomskog rada je pokušaj da se na bazi dipol-dipolnog mehanizma objasne neke pojave u biološkim membranama. Ideja da dipoli i dipol-dipolna interakcija igraju značajnu ulogu u biološkim procesima nije nova i potiče od takvih autoriteta kao što su A.Sent-Djerđji i H.Frelih, tako da je logično da se o dipolnom mehanizmu razmišlja u svim onim slučajevima kadas se radi o biološkim fenomenima.

Ovde je učinjen pokušaj da se procesi sinteze i razgradnje adenozin trifosforne kiseline objasne kretanjem elektrona u dipolnom polju. Pokušaj je iniciran činjenicama da prisustvo vode pozitivno utiče na sintezu i razgradnju ATP pa je u tom smislu napravljen model koji bazira na dinamici sistema dipola koji obrazuju molekuli vode.

## I SISTEM DIPOLA U STRUKTURI SA NARUŠENOM SIMETRIJOM

### I.1. Dipol-dipolna interakcija u dielektričnoj sredini

S obzirom da će u daljim analizama biti ispitivani efekti dipol-dipolne interakcije u medijumu sa dielektričnom konstantom ovde će biti analiziran operator dipol-dipolne interakcije u sredini čija je dielektrična konstanta različita od jedan. (Sl.1)



Na slici 1 R je skup unutrašnjih koordinata dipola. Ispitacemo kakvo je električno polje u tačci M koje stvara dipol  $\vec{D}_1 = Ne\vec{R}$ . Ovde je Ne efektivno nanelektrisanje dipola. Skalarni potencijal  $\varphi$  u tačci M koji nastaje usled prisustva dipola  $\vec{D}_1$  dat je sa:

$$\varphi = \frac{Ne}{\epsilon} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} ; \quad |\vec{r}| \gg |\vec{R}| \quad (\text{I.1.1.})$$

Pošto je  $|\vec{r}| \gg |\vec{R}|$  potencijal  $\varphi$  se može razviti u red.

$$\varphi \approx \frac{Ne}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{|\vec{r}|} - \frac{1}{|\vec{r}|^2} \vec{R} \operatorname{grad} |\vec{r}| \right\} = \frac{Ne}{\epsilon} \left\{ \frac{1}{r} - \frac{\vec{R} \cdot \vec{r}}{r^3} \right\} ; \quad r = |\vec{r}| \quad (\text{I.1.2.})$$

Dopunski član u poslednjem izrazu

$$\phi = - \frac{Ne}{\epsilon} \frac{\vec{R} \cdot \vec{r}}{r^3} \quad (\text{I.1.3.})$$

javlja se usled činjenice da je skalarni potencijal prouzrokovani dipolom a ne tačkastim nanelektrisanjem.

Električno polje koje nastaje usled prisustva dipola predstav-

lja negativni gradijent veličine  $\gamma$

$$\vec{E} = -\text{grad } \phi = \frac{Ne}{\epsilon} \nabla \left( \vec{R} \cdot \frac{\vec{r}}{r^3} \right) \quad (\text{I.1.4.})$$

koristeći formulu (I.1.5.) i činjenicu da je  $\vec{R} = \text{const.}$  i  $\text{rot } \vec{r} = 0$  do-lazimo do zaklučka da je:

$$\text{grad}(\vec{A}\vec{B}) = \vec{A} \times \text{rot } \vec{B} + \vec{B} \times \text{rot } \vec{A} + (\vec{A} \nabla) \vec{B} + (\vec{B} \nabla) \vec{A}; \quad \vec{R} = \vec{A}; \quad \frac{\vec{r}}{r^3} = \vec{B} \quad (\text{I.1.5.})$$

$$\vec{E} = \left[ \frac{\vec{R}}{r^3} - \frac{\vec{r}(\vec{r}\vec{R})}{r^5} \right] \frac{Ne}{\epsilon} \quad (\text{I.1.6.})$$

$$\vec{E} = \left[ \frac{\vec{D}_a}{r^3} - \frac{\vec{r}(\vec{r}\vec{D}_a)}{r^5} \right] \frac{1}{\epsilon} \quad (\text{I.1.7.})$$

Pošto je energija u prisustvu dipola  $\vec{D}_a$  data poznatom formulom

$$W = \vec{E} \vec{D}_a \quad (\text{I.1.8.})$$

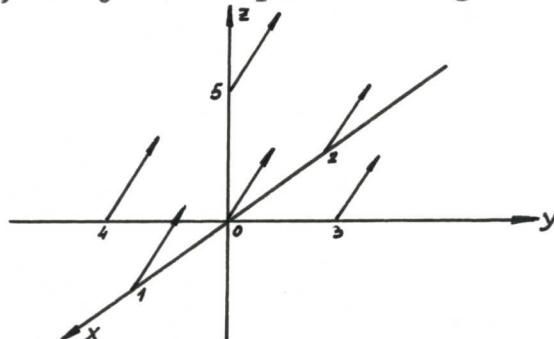
Konačan izraz za energiju dipol-dipolne interakcije u sredini sa dielektričnom konstantom  $\epsilon$  dat je sa:

$$W = \vec{E} \vec{D}_a = \left[ \frac{\vec{D}_a \vec{D}_a}{r^3} - \frac{(\vec{r} \vec{D}_a)(\vec{r} \vec{D}_a)}{r^5} \right] \frac{1}{\epsilon} \quad (\text{I.1.9.})$$

## I.2. Moguće orijentacije dipola u narušenoj kubnoj strukturi

Ovde ćemo analizirati moguće orijentacije dipola u kubnim strukturama sa narušenom simetrijom. Razlog za ispitivanje ove vrste leži u činjenici da će se u daljem analizirati membrane koje imaju nenarušenu translacionu simetriju u XOY-ravni, dok duž z-ose one imaju ograničenu debljinu pa samim tim i narušenu simetriju duž ovog pravca.

Analiziraćemo blok dipola u prostoj kubnoj celiji sa paralelnom orijentacijom, ali jedan dipol iz ovog bloka nedostaje (viđi sl.2)



Ukupna dipol-dipolna interakcija za ovaj blok data je sa:

$$W = \frac{1}{\epsilon} \left\{ \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_1}{d_{01}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{01})(\vec{D}_1 \vec{d}_{01})}{d_{01}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_2}{d_{02}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{02})(\vec{D}_2 \vec{d}_{02})}{d_{02}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_3}{d_{03}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{03})(\vec{D}_3 \vec{d}_{03})}{d_{03}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_4}{d_{04}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{04})(\vec{D}_4 \vec{d}_{04})}{d_{04}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_5}{d_{05}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{05})(\vec{D}_5 \vec{d}_{05})}{d_{05}^5} \right\} \quad (I.2.1.)$$

Očigledne su takođe i sledeće relacije:

$$\vec{D}_0 = \vec{D}_1 = \vec{D}_2 = \vec{D}_3 = \vec{D}_4 = \vec{D}_5 = \vec{D} (\hat{i} \cos \varphi \sin \theta + \hat{j} \sin \varphi \sin \theta + \hat{k} \cos \theta) \\ d_{01} = \hat{i} d; d_{02} = \hat{j} d; d_{03} = \hat{k} d; d_{04} = -\hat{j} d; d_{05} = -\hat{k} d \quad (I.2.2.)$$

Na osnovu (I.2.1.) i (I.2.2.) sledi:

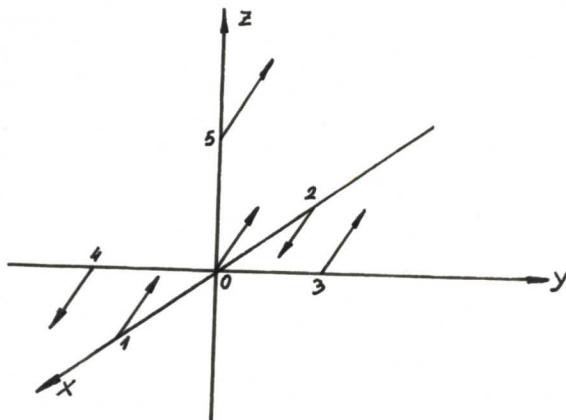
$$W = \frac{\vec{D}^2}{\epsilon d^3} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (I.2.3.)$$

Odavde je očigledno da minimum potencijalne energije imamo za  $\theta = \frac{\pi}{2}$  i ovaj minimum je:

$$W = -\frac{\vec{D}^2}{\epsilon d^3} \quad (I.2.4.)$$

Drugim rečima, pri paralelnoj orijentaciji dipola minimum potencijalne energije odgovara sistemu dipola koji leži u XOY-ravni.

Do sada je razmatran sistem dipola sa paralelnom orijentacijom. Sada ćemo analizirati slučaj kada su dipoli paralelno orijentisani kao na slici 3.



sl. 3.

Sada je lako konstatovati da je potencijalna energija bloka sa sl.3. data sa

$$W = \frac{1}{\epsilon} \left\{ \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_1}{d_{01}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{01})(\vec{D}_1 \vec{d}_{01})}{d_{01}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_2}{d_{02}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{02})(\vec{D}_2 \vec{d}_{02})}{d_{02}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_3}{d_{03}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{03})(\vec{D}_3 \vec{d}_{03})}{d_{03}^5} + \right. \\ \left. + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_4}{d_{04}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{04})(\vec{D}_4 \vec{d}_{04})}{d_{04}^5} + \frac{\vec{D}_0 \vec{D}_5}{d_{05}^3} - 3 \frac{(\vec{D}_0 \vec{d}_{05})(\vec{D}_5 \vec{d}_{05})}{d_{05}^5} \right\} \quad (I.2.5.)$$

pri čemu važi:

$$\vec{D}_0 = \vec{D}_1 = \vec{D}_3 = \vec{D}_5 = \mathcal{D} (\hat{i} \cos \varphi \sin \theta + \hat{j} \sin \varphi \sin \theta + \hat{k} \cos \theta) \\ \vec{D}_2 = \vec{D}_4 = -\mathcal{D} (\hat{i} \cos \varphi \sin \theta + \hat{j} \sin \varphi \sin \theta + \hat{k} \cos \theta) \quad (I.2.6.)$$

Iz formule (I.2.5.) i (I.2.6.) sledi:

$$W = \frac{\mathcal{D}^2}{\epsilon d^3} (1 - 3 \cos^2 \theta) \quad (I.2.7.)$$

Dobijeni izraz (I.2.7.) ima minimalnu vrednost za  $\theta = 0$  i ova minimalna vrednost iznosi:

$$W = -\frac{2\mathcal{D}^2}{\epsilon d^3} \quad (I.2.8.)$$

Konačni zaključak koji sledi iz izvršenih analiza je sledeći:  
Ako su dipoli paralelni u nepotpunom bloku pre ste kubne strukture onda je minimalna energija ovakvog sistema dva puta veća, nego ako su u istom bloku dipoli antiparalelno arijentisani. Otuda je realno očekivati da je najprirodniji raspored dipola u strukturi sa narušenom translacionom simetrijom antiparalelan i da tada dipoli "gledaju" duž pravca narušenja simetrije tj. duž pravca z-ose.

### I.3. Ponašanje izolovanog dipola u ravni

U skladu sa predhodnim analizama ovde ćemo ispitati ponašanje izolovanog dipola koji leži u XOY-ravni. Prilikom analize najpogodnije je preći na koordinate  $\rho$  i  $\varphi$  koje su sa dekartovim koordinatama  $x, y$  povezane relacijama:

$$x = \rho \cos \varphi; \quad y = \rho \sin \varphi; \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2}; \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x} \quad (I.3.1.)$$

Pošto je:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (I.3.2.)$$

lako se dolazi do zaključka da je:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \varphi}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (I.3.3.)$$

odakle sledi:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \quad (I.3.4.)$$

Hamiltonian elektrona koji se kreće u polju dipola pod uticajem Kulonove interakcije je:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ne^2}{\epsilon \rho} \quad (I.3.5.)$$

gde je  $Ne$  efektivno nanelektrisanje dipola,  $\epsilon$  dielektrična konstanta,  $a\mu$  redukovana masa elektrona koja je bliska njegovoj stvarnoj masi i iznosi približno  $10^{-27}$  gr.

Svojstveni problem za dati Hamiltonian dat je sa

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi(\rho, \varphi) - \frac{Ne^2}{\epsilon \rho} \Psi(\rho, \varphi) = E \Psi(\rho, \varphi) \quad (I.3.6.)$$

funkciju  $\Psi$  predstavićemo u obliku:

$$\Psi(\rho, \varphi) = \alpha(\rho)\beta(\varphi) \quad (I.3.7.)$$

posle čega se (I.3.6.) raspada na sledeće dve jednačine:

$$\frac{d\beta}{d\rho^2} + \lambda \beta = 0 \quad (I.3.8.)$$

$$\frac{d^2\alpha}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\alpha}{d\rho} + \left( \frac{2\mu e^2}{\hbar^2 \rho} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{\ell^2}{\rho^2} \right) \alpha = 0 \quad (I.3.9.)$$

Jednoznačni rešenje jednačine (I.3.8.) dato je sa

$$\beta(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\ell\rho}, \quad \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (I.3.10.)$$

Posle smene:

$$\alpha(\rho) = \rho^{-\frac{1}{2}} z(\rho)$$

jednačina (I.3.9.) postaje:

$$\frac{d^2z}{d\rho^2} + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{\rho} + \frac{\frac{1}{4} - \ell^2}{\rho^2} \right) z = 0 \quad (I.3.11.)$$

Sada se uvodi nova smena  $z = ye^{\alpha\rho}$  i tako se dolazi do rezultata:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2y}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{dy}{d\rho} + \left( \frac{b}{\rho} + \frac{\frac{1}{4} - \ell^2}{\rho^2} \right) y = 0 \\ & a = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2\mu E}; \quad E < 0; \quad b = \frac{2\mu e^2}{\hbar^2}; \quad \alpha(\rho) = \rho^{-\frac{1}{2}} e^{-\alpha\rho} y(\rho) \end{aligned} \quad (I.3.12.)$$

Jednačina (I.3.12.) rešava se pomoću potencijalnog reda, ali red se mora "preseći" jer je asimptotsko rešenje (I.3.12.)  $y_\infty = e^{2\alpha\rho}$  pa divergira u beskonačnosti.

Posle zamene:

$$y = \sum_{v=0}^{\infty} C_v \rho^{v+k} \quad (I.3.13)$$

za koeficijente reda dobija se formula:

$$C_{s+1} = \frac{2\alpha(s+k) - b}{(s+k)(s+k+1) + \frac{1}{4} - r^2} C_s \quad (I.3.14.)$$

i lako je konstatovati da se red (I.3.13.) "preseca" na članu stepena  $n$  ako je:  $\frac{b}{2\alpha} = n+r+\frac{1}{2}$  što daje energije:

$$E_n = -\frac{e^4 \mu}{2\hbar^2} \frac{N^2}{\epsilon^2} \frac{1}{(n+|\ell|+\frac{1}{2})^2}; \quad n=0, 1, 2, \dots; |\ell|=0, 1, 2, \dots \quad (I.3.15.)$$

Rešenja jednačine (I.3.6.) data su sa:

$$\Psi_{n,\ell} = \frac{C_{n,\ell}}{2\pi} e^{il\varphi} e^{-\frac{1}{2}\xi} P_\ell(\xi); \quad \hat{J} = \int_0^\xi d\xi$$
$$P_\ell(\xi) = \xi^{-|\ell|} (1 - \hat{J})^{\ell} \xi^{2|\ell|} = \sum_{v=0}^n (-1)^v \binom{n}{v} \frac{(2r)!}{(2r+v)!} \xi^{r+v} \equiv P_{n,r}(\xi) \quad (\text{I.3.16.})$$

Lako je konstatovati da je spektar dipola (tačnije elektrona u polju dipola - adijabatska aproksimacija) degenerisan i da stepen degeneracije iznosi  $2D+1$  gde je  $D=n+|\ell|$ .

#### I.4. Ponašanje izolovanog dipola duž izabranog pravca

Ovde ćemo sada razmotriti sistem dipola koji su usmereni duž z-ose. Kao što se zna iz predhodnih analiza ovakvo usmeravanje nastaje pri antiparalelnoj orijentaciji dipola. Za sada biće analizirano ponašanje jednog dipola, a kasnije ćemo ispitati ponašanje celokupnog sistema. Koristiće se adijabatska aproksimacija, što znači da će biti ispitana stanja elektrona koji se kreću ~~od~~<sup>KA</sup> negativnog radijalnog ~~od~~<sup>GRUPE</sup> pozitivnog jona.

Hamiltonijan elektrona u okviru ovog modela može se napisati u obliku:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{Ne^2}{\epsilon|z|} \quad (\text{I.4.1.})$$

Kao i ranije Ne je efektivno nanelektrisanje dipola, a  $\epsilon$  dielektričnog konstanta sredine.

Svojstveni problem Hamiltonijana (I.4.1.) glasi:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{Ne^2}{\epsilon|z|} \psi = E \psi \quad (\text{I.4.2.})$$

Jednačina (I.4.2.) razbija se na sistem jednačina:

$$\frac{d^2\psi_+}{dz^2} + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu Ne^2}{\epsilon \hbar^2} \frac{1}{z} \right) \psi_+ = 0; \quad z > 0 \quad (\text{I.4.3.})$$

$$\frac{d^2\psi_-}{dz^2} + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{2\mu Ne^2}{\epsilon \hbar^2} \frac{1}{z} \right) \psi_- = 0; \quad z < 0 \quad (\text{I.4.4.})$$

Dalje ćemo analizirati jednačinu (I.4.3.). Njeno rešenje omogućava da se lako nadje i rešenje (I.4.4.).

Posle smene:

$$\psi_+ = \psi_+ e^{f_+} \quad (\text{I.4.5.})$$

dolazi se do jednačine:

$$\frac{d^2\psi_+}{dz^2} - 2\alpha \frac{d\psi_+}{dz} + \frac{b}{z} \psi_+ = 0; \quad \psi_+ = \psi_+ e^{-\alpha z}$$

$$E < 0; \quad \frac{2\mu E}{\hbar^2} = -\alpha^2; \quad \alpha = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2\mu E}; \quad \frac{2\mu Ne^2}{\epsilon \hbar^2} = b \quad (\text{I.4.6.})$$

Ovde je pogodno izvršiti smenu argumenta  $z = \frac{\xi}{2\alpha}$

posle čega dolazimo do:

$$\frac{d^2y_+}{d\xi^2} - \frac{dy_+}{d\xi} + \frac{\lambda}{\xi} y_+ = 0; \quad Y_+(\xi) = y_+(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi}; \quad \xi \in (0, \infty); \quad \lambda = \frac{\mu Ne^2}{\epsilon \xi \sqrt{-2ME}} \quad (\text{I.4.7.})$$

Jednačinu (I.4.7.) rešavamo pomoću potencijalnog reda

$$Y_+ = \sum_{v=0}^{\infty} C_v \xi^{v+k} \quad (\text{I.4.8.})$$

Konstanta  $k$  ima vrednosti  $k=0$  i  $k=1$ . Ispostavlja se da samo pri  $k=1$ ,  $y_+$  i  $Y_+$  mogu da se povežu standardnim uslovima nregoridnosti, pa se otuda uzima vrednost  $k=1$ . Osim toga jednačina (I.4.7.) ima asimptotsko rešenje:  $y_\infty = e^\xi$ , što vodi na  $Y_\infty \sim e^{\frac{1}{2}\xi}$ . Odavde sledi zaključak da  $Y_+$  konvergira samo ako je  $y_+$  polinom. Otuda se red (I.4.8.) mora "preseći".

Za koeficijente  $C_s$  dobija se formula:

$$C_s = \frac{(\lambda-1)(\lambda-2)\cdots(\lambda-s)(-1)^s}{1^2 2^2 \cdots s^2 (s+1)} C_0 \quad (\text{I.4.9.})$$

i sada je jasno da će (I.4.8.) biti polinom  $n$ -tog stepena ukoliko je ispunjen uslov  $\lambda = n+1$  što daje sledeće vrednosti energije:

$$E_n = -\frac{\mu N^2 e^4}{2 \hbar^2 \epsilon^2} \frac{1}{(n+1)^2} \quad (\text{I.4.10.})$$

tada se dobija:

$$Y_+(\xi) = C_0 \sum_{s=0}^n (-1)^s \binom{n}{s} \frac{\xi^{s+1}}{(s+1)!} ; \quad \binom{n}{s} = \frac{n!}{(n-s)! s!} \quad (\text{I.4.11.})$$

Ako se uvede operator:

$$\hat{J}_\xi = \int_0^\xi d\xi' \quad ; \quad \hat{J}_\xi^n \equiv \hat{J}^n \quad (\text{I.4.12.})$$

onda se rešenje jednačine (I.4.3.) može pisati u obliku:

$$Y_n^{(n)}(\xi) = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi} (1 - \hat{J}_\xi)^n \xi \quad (\text{I.4.13.})$$

Jednačinu (I.4.4.) sličnim postupkom svodimo na:

$$\frac{d^2y_-}{d\xi^2} + \frac{dy_-}{d\xi} - \frac{\lambda}{\xi} y_- = 0; \quad Y_- = y_- e^{\frac{1}{2}\xi} \quad (\text{I.4.14.})$$

ona se rešava pomoću reda:

$$Y = \sum_{n=0}^{\infty} D_n \xi^{sn} \quad (I.4.15.)$$

kojim takodje mora biti "presečen", jer u protivnom  
 $\Psi_{\infty} \sim e^{-\frac{1}{2}\xi} \rightarrow \infty$  kada  $\xi \rightarrow -\infty$

Presecanje reda daje za energije izraz identičan sa izrazom (I.4.10.), a rešenje jednačine glasi:

$$\Psi_n^{(+)}(\xi) = D_0 e^{\frac{1}{2}\xi} (1 + \hat{j})^n \xi \quad (I.4.16.)$$

Uslovi neprekidnosti rešenja  $\Psi_+$ ,  $\Psi_-$

$$\Psi_n^{(+)}(0) = \Psi_n^{(-)}(0); \quad \left[ \frac{d\Psi_n^{(+)}}{d\xi} \right]_{\xi=0} = \left[ \frac{d\Psi_n^{(-)}}{d\xi} \right]_{\xi=0} \quad (I.4.17.)$$

ispunjeni su, ako je:

$$C_0 = D_0 \quad \text{odnosno} \quad C_n = D_n \quad (I.4.18.)$$

Funkcije se normiraju uslovno:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[ \Psi_n^{(+)}(\xi) \right]^2 + \int_{0}^{\infty} d\xi \left[ \Psi_n^{(-)}(\xi) \right]^2 = 1 \quad (I.4.19.)$$

Normirane funkcije osnovnog stanja ( $n=0$ ) su:

$$\Psi_0^{(+)}(\xi) = \frac{1}{2} \xi e^{-\frac{1}{2}\xi}; \quad \Psi_0^{(-)}(\xi) = \frac{1}{2} \xi e^{\frac{1}{2}\xi} \quad (I.4.20.)$$

a prvog pobudjenog stanja:

$$\Psi_1^{(+)}(\xi) = \frac{1}{2} \xi \left(1 - \frac{1}{2} \xi\right) e^{-\frac{1}{2}\xi}; \quad \Psi_1^{(-)}(\xi) = \frac{1}{2} \xi \left(1 + \frac{1}{2} \xi\right) e^{\frac{1}{2}\xi} \quad (I.4.21.)$$

Na kraju treba primetiti da stanja  $\Psi_0$  i  $\Psi_1$  nisu ortogonalna, jer je:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \Psi_0^{(+)}(\xi) \Psi_1^{(+)}(\xi) + \int_0^{\infty} d\xi \Psi_0^{(-)}(\xi) \Psi_1^{(-)}(\xi) \neq 0$$

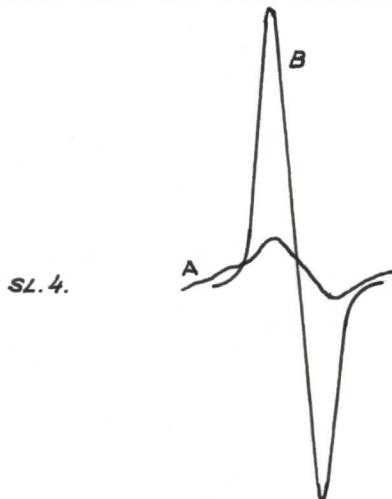
u šta se može ubediti neposrednim računom.

## II DIPOLI U MEMBRANI

### III.1. Dipolni model za membranu (izolovani dipol)

Eksperimentalna istraživanja bioloških membrana pokazala su da transfer elektrona kroz membranu igra bitnu ulogu u procesima aktivacije i sinteze. Radi se o tome da kretanje elektrona kroz membranu i elektrinski impulsi iniciraju različite hemijske transformacije molekula, a ove su opet bitne za život bioorganizama.

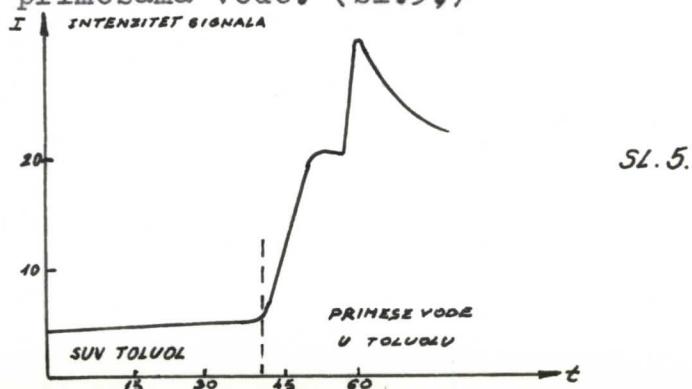
Ovde ćemo pokušati da transfer elektrona i elektronske impulse objasnimo mehanizmom dipol-dipolne interakcije i ponašanjem elektrona u polju dipola. Ovaj pokušaj iniciran je činjenicama koje su eksperimentalno konstatovane, a sastoje se u tome da elektronski "signali" u biološkim membranama postaju mnogo intenzivniji u liofilnim sredinama. Tako naprimjer u pacovskoj džigerici elektronski signali postaju mnogo jači ako se ova nalazi u kontaktu sa vlažnom sredinom. (sl.4.)



A - signal konstatovan paraelektronskom rezonancijom za suv preparat

B - isti signal za preparat koji je 24 sata bio u kontaktu sa vlažnim vazduhom

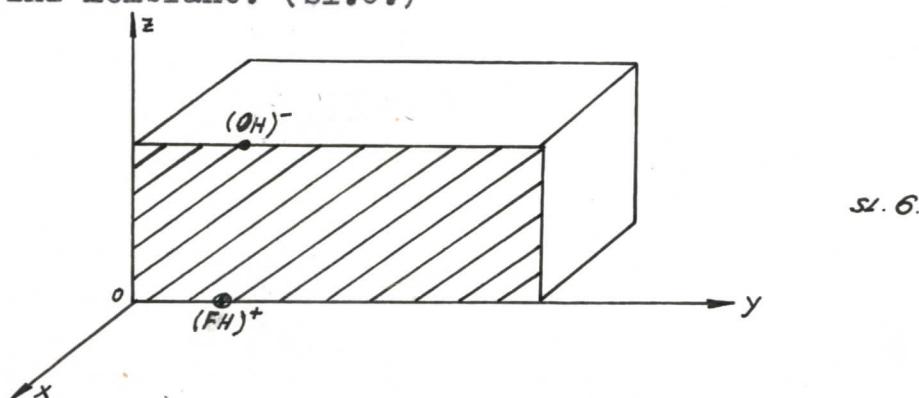
Takodje su vršena eksperimentalna ispitivanja elektronskih signala u istom preparatu, koji se jednom nalazi u suvom toluolu, a drugi put u toluolu sa primesama vode. (sl.5.)



Navedene činjenice, keo i činjenica da su molekuli vode izraziti dipoli navodi na ideju da bi dipolni model elektronskog kretanja moga oda posluži kao jedno od mogućih objašnjenja za bioprose u membranama koji su inicirani elektronskim impulsima. Pri tome se predpostavlja da se elektron kreće duž dipola koji obrazuju  $(OH)^-$  radikal i proton  $(FH)^+$ . Elektron je u prvom stadijumu lociran u blizini  $(FH)^+$  grupe, a pobudjenja se sastoje u tome što se elektron udaljava od  $(FH)^+$  grupe i približava jenu  $(OH)^-$ .

Na taj način dipol se "skraćuje" i ova skraćivanja bi bila osnovna pobudjenja sistema. Ova pobudjivanja, pošto su dipoli u membrani povezani silama dipol-dipolne interakcije nemaju karakter individualnih pobudjenja, već kolektivnih eksitacija cele membrane, koje se u vidu talasa prostiru kroz nju.

Ovde ćemo razmatrati ponašanje individualnog dipola. Smatra se da elektron ne može da izadje iz membrane i da je z-osa uperena po debljini membrane. (sl.6.)



Potencijalna energija elektrona u ovom slučaju može se napisati kao:

$$V(z) = \begin{cases} -\frac{Ne^2}{\epsilon z} & ; z > 0 \\ \infty & ; z < 0 \end{cases} \quad (\text{II.1.1.})$$

a kompletan Hamiltonijan je dat sa:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{Ne^2}{\epsilon z} \quad (\text{II.1.2.})$$

Svojstveni problem ovog Hamiltonijana svodi se na sledeću jednačinu:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu Ne^2}{\hbar^2 \epsilon} \frac{1}{z} \right) \psi = 0 \quad (\text{II.1.3.})$$

uz granični uslov:

$$\Psi(0)=0 \quad (\text{II.1.4.})$$

Jednačinu tipa (II.1.3.) rešavali smo u poslednjem paragrafu predhodne glave. Njeno rešenje je:

$$\Psi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{1}{2}\xi} (1 - \hat{J})^n \xi, \quad \hat{J} = \int_0^\xi d\xi \quad (\text{II.1.5.})$$

Ostale oznake su:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \sqrt{-2\mu E}, \quad E_n = -\frac{\mu N^2 e^4}{2\pi^2 \epsilon^2} \frac{1}{(n+1)^2}, \quad n=0, 1, 2, \dots; \quad z = \frac{\xi}{2a_n} \quad (\text{II.1.6.})$$

Dalje ćemo se interesovati samo osnovnim stanjem  $n=0$  i prvim pobudjenim stanjem  $n=1$ . Funkcije  $\Psi$  normiraju se usløvom:

$$\int_0^\infty d\xi \Psi_n^2(\xi) = 1 \quad (\text{II.1.7.})$$

S obzirom na (II.1.7.) i (II.1.5.) normirane funkcije osnovnog i prvog pobudjenog stanja su, respektivno:

$$\Psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \xi e^{-\frac{1}{2}\xi}; \quad \Psi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \xi (1 - \frac{1}{2}\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi} \quad (\text{II.1.8.})$$

Teškoću za dalji račun predstavlja činjenica da funkcije  $\Psi_0$  i  $\Psi_1$  nisu ortogonalne, jer je:

$$\int_0^\infty d\xi \Psi_0(\xi) \Psi_1(\xi) = -\frac{1}{2} \neq 0 \quad (\text{II.1.9.})$$

Ako bi smo radili sa ovim funkcijama matrica operatora  $\hat{H}$  imala bi razlike od nule i nedijagonalne elemente  $\hat{H}_{01}$  i  $\hat{H}_{10}$ . Zbog toga ćemo izvršiti ortogonalizaciju talasnih funkcija prelazeći na linearne kombinacije:

$$\phi_0(\xi) = \Psi_0(\xi); \quad \phi_1(\xi) = A \phi_0(\xi) + B \phi_1(\xi) \quad (\text{II.1.10.})$$

Konstante A i B odredićemo iz uslova:

$$\int_0^\infty d\xi \phi_0(\xi) \phi_1(\xi) = 0 \quad (\text{II.1.11.})$$

Odavde sledi  $A = \frac{B}{2}$  i  $\phi_1(\xi) = B\left(\frac{1}{2}\gamma_0 + \gamma_1\right)$ . Funkcija  $\phi_0$  je već normirana pošto je jednaka funkciji  $\gamma_0$  dok funkciju  $\phi_1$  treba normirati tj.  $\int_0^\infty \phi_1^2 d\xi = 1$ . Na taj način dolazimo do funkcija koje se i ortogonalne i normirane:

$$\phi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \xi e^{-\frac{1}{2}\xi}, \quad \phi_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{6}} \xi(3-\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi} \quad (\text{II.1.12.})$$

i sa njima ćemo vršiti dalju analizu.

Pošto su funkcije (II.1.12.) ortonormirane matrični elementi  $H_{00}$  i  $H_{10}$  su ravni nuli, kao što je već napred rečeno, dok je:

$$H_{00} = \int_0^\infty d\xi \phi_0(\xi) \hat{H} \phi_0(\xi) = -\frac{\mu N^2 e^4}{2\epsilon^2 \epsilon^2} \quad (\text{II.1.13.})$$

$$H_{11} = \int_0^\infty d\xi \phi_1(\xi) \hat{H} \phi_1(\xi) = -\frac{5}{12} \frac{\mu N^2 e^4}{2\epsilon^2 \epsilon^2} = \frac{5}{12} H_{00} \quad (\text{II.1.14.})$$

za dalji račun biće nam potrebne veličine:

$$\mathcal{D}_{00} = NeZ_{00} = Ne \int_0^\infty dz \phi_0^2(z) z; \quad \mathcal{D}_{11} = NeZ_{11} = Ne \int_0^\infty dz \phi_1^2(z) z; \quad \mathcal{D}_{01} = \mathcal{D}_{10} \quad (\text{II.1.15.})$$

$$\mathcal{D}_{01} = \mathcal{D}_{10} = \int_0^\infty dz \phi_0(z) \phi_1(z) z$$

Elementi  $\mathcal{D}_{00}$  i  $\mathcal{D}_{11}$  mogu se računati i sa funkcijama  $\phi_0(\xi)$  i  $\phi_1(\xi)$ , ali element  $\mathcal{D}_{01}$  zahteva prelaz sa promenljive  $\xi$  na promenljivu  $z$  po formuli:

$$\xi = 2\alpha_0 z \quad (\text{II.1.16.})$$

Zamenom (II.1.16.) u (II.1.12.) posle normiranja dobijamo funkcije koje zavise od  $z$  i one su date sa:

$$\phi_0(z) = 2^{\frac{3}{2}} \alpha_0 z e^{-\alpha_0 z}; \quad \phi_1(z) = \frac{2}{\sqrt{3}} \alpha_1 z (3-2\alpha_1 z) e^{-\alpha_1 z} \quad (\text{II.1.17.})$$

gde je  $\alpha_0 = \frac{a_0}{2}$ .

Ako na osnovu (II.1.17) izračunamo dipolne matrične elemente (II.1.15.) dobijamo:

$$\mathcal{D}_{00} = \frac{3\epsilon h^2}{2\mu e}; \quad \mathcal{D}_{11} = \frac{5\epsilon h^2}{\mu e}; \quad \mathcal{D}_{10} = \mathcal{D}_{01} = \frac{64\epsilon h^2}{81\sqrt{6}\mu e} \quad (\text{II.1.18.})$$

Na kraju ovog paragrafa izvršićemo procenu dielektrične konstante  $\mathcal{E}$ . Za procenu ćemo koristiti predpostavku da je minimalno rastojanje elektrona od ( $FH$ ) grupe, a to je rastojanje u osnovnom stanju  $z_{00}$  jednako veličini  $d=5 \cdot 10^{-9}$  cm što odgovara prosečnoj veličini konstante rešetke za sistem dipola. Pošto je na osnovu (II.1.15.) i (II.1.18.)

$$Z_{00} = \frac{3\mathcal{E}\hbar^2}{2\mu Ne^2} \quad (\text{II.1.19.})$$

odavde sledi

$$\mathcal{E} = \frac{2\mu Ne^2}{3\hbar^2} d \quad (\text{II.1.20.})$$

pošto je  $\mu = 10^{-27}$  gr.,  $N=9$  (naelektrisanje OH grupe)  
 $e=4,8 \cdot 10^{-10}$  stat.C  $d=5 \cdot 10^{-9}$  cm.  $\hbar = 10^{-27}$  erg.s  
dolazimo do rezultata:

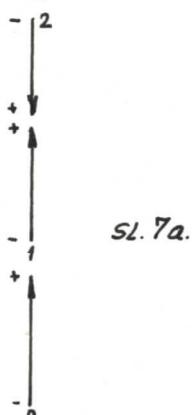
$$\mathcal{E} \approx 50 \quad (\text{II.1.21.})$$

Za ovako procenjeno  $\mathcal{E}$  je:

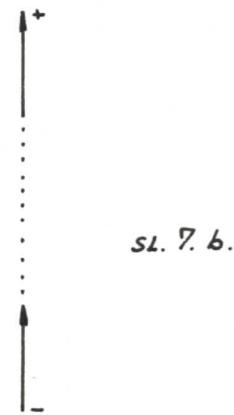
$$H_{00} \approx -540 \text{ meV}, \quad H_{11} \approx -240 \text{ meV}, \quad H_{11} - H_{00} = 300 \text{ meV} \quad (\text{II.1.22.})$$

### III.2. Dipol-dipolna interakcija u membrani

Membranu ćemo analizirati kao sistem dipola sa antiparalelnom orijentacijom koji su svi upereni duž ose z po kojoj se meri i debљina membrane (vidi sl.6.). Zbog antiparalelne orijentacije dipoli su duž ose z rasporedjeni kao na sl.7a



sl. 7a.



sl. 7b.

Kao što se vidi sa slike dolazi do kompenzacije + i - nanelektrisanja u unutrašnjosti membrane, pa tako duž z ose imamo jedan efektivni dipol čija je dužina jednak deblijini membrane (vidi sl.7b). Kao što se vidi ukupna interakcija dipola na mestu nula sa najbližim susedima je ravna nuli, a različita je od nule za sledeće susede i iznosi  $-\frac{d^2}{4\epsilon d^3}$  po x-osi i isto toliko po y-osi.

Otuda modelnu rešetku možemo konstruisati samo u XY-ravni i Hamiltonijan ovog sistema je dat sa:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int.} = \sum_{n_x n_y} H_{n_x n_y}^{(0)} - \frac{1}{8\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} D_{n_x n_y} (D_{n_x+2d, n_y} + D_{n_x-2d, n_y} + D_{n_x, n_y+2d} + D_{n_x, n_y-2d})$$

$$H_{n_x n_y}^{(0)} = -\frac{\pi^2}{24} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{Ne^2}{\epsilon z}; \quad z > 0 \quad (\text{III.2.1.})$$

Ako se predje na reprezentaciju druge kvantizacije, onda Hamiltonijan sistema, možemo pisati u obliku:

$$\hat{H} = \sum_{n_x n_y} \langle \mu | H_{n_x n_y}^{(0)} | \mu \rangle a_{n_x n_y}^\dagger (\mu) a_{n_x n_y} (\mu) - \frac{1}{8\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} \langle \mu_1 | D_{n_x n_y} | \mu_2 \rangle a_{n_x n_y}^\dagger (\mu_1) a_{n_x n_y} (\mu_2) \cdot$$

$$\cdot [\langle \mu_3 | D_{n_x+2d, n_y} | \mu_4 \rangle a_{n_x+2d, n_y}^\dagger (\mu_3) a_{n_x+2d, n_y} (\mu_4) + \langle \mu_3 | D_{n_x-2d, n_y} | \mu_4 \rangle a_{n_x-2d, n_y}^\dagger (\mu_3) a_{n_x-2d, n_y} (\mu_4) + \langle \mu_3 | D_{n_x, n_y+2d} | \mu_4 \rangle a_{n_x, n_y+2d}^\dagger (\mu_3) a_{n_x, n_y+2d} (\mu_4) + \langle \mu_3 | D_{n_x, n_y-2d} | \mu_4 \rangle a_{n_x, n_y-2d}^\dagger (\mu_3) a_{n_x, n_y-2d} (\mu_4)] \quad (\text{III.2.2.})$$

U poslednjoj formuli  $a^\dagger$  i  $a$  su elektronski operatori, pa prema tome zadovoljavaju fermionske komutacione relacije. Predpostavlja se da se elektronske talasne funkcije susednih čvorova slabo prekrivaju i da su aktuelna samo dva stanja elektrona, tj.:

$$\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4 = 0, 1 \quad (\text{II.2.3.)}$$

u tom slučaju za svaki čvor važi uslov:

$$a_o^+ a_o + a_u^+ a_u = 1 \quad (\text{II.2.4.)}$$

i tada se od fermioperatora  $a^+$  i  $a$  može preći poznatim postupkom na Pauli operatore:

$$P = a_0^+ a_1, \quad P^+ = a_1^+ a_0, \quad a_1^+ a_1 = P^+ P, \quad a_0^+ a_0 = 1 - P^+ P \quad (\text{II.2.5.)} a.$$

Ako iskoristimo formule (II.2.4.) i drugi član u (II.2.2.) razbijemo po šemi:

$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$
0	0	0	0
1	1	0	0
0	0	1	1
1	0	1	0
1	0	0	1
0	1	1	0
0	1	0	1

(II.2.5.) b.

Hamiltonian se može napisati u obliku:

$$\begin{aligned}
 H = & c \mathcal{N} \left[ H_{00} - \frac{\mathcal{D}_{00}}{2\epsilon d^3} \right] + \sum_{n_x n_y} (H_{11} - H_{00}) P_{n_x n_y}^+ P_{n_x n_y} - \frac{\mathcal{D}_{10} \mathcal{D}_{00}}{2\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} P_{n_x n_y}^+ P_{n_x n_y} - \frac{\mathcal{D}_{00} \mathcal{D}_{11}}{8\epsilon d^3} \\
 & \cdot \sum_{n_x n_y} [P_{n_x+2d, n_y}^+ P_{n_x+2d, n_y} + P_{n_x-2d, n_y}^+ P_{n_x-2d, n_y} + P_{n_x, n_y+2d}^+ P_{n_x, n_y+2d} + P_{n_x, n_y-2d}^+ P_{n_x, n_y-2d}] - \\
 & - \frac{\mathcal{D}_{10} \mathcal{D}_{10}}{8\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} P_{n_x n_y}^+ [P_{n_x+2d, n_y}^+ + P_{n_x-2d, n_y}^+ + P_{n_x, n_y+2d}^+ + P_{n_x, n_y-2d}^+] - \frac{\mathcal{D}_{01} \mathcal{D}_{01}}{8\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} P_{n_x n_y} \\
 & \cdot (P_{n_x+2d, n_y} + P_{n_x-2d, n_y} + P_{n_x, n_y+2d} + P_{n_x, n_y-2d}) - \frac{\mathcal{D}_{10} \mathcal{D}_{01}}{8\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} P_{n_x n_y}^+ (P_{n_x+2d, n_y} + P_{n_x-2d, n_y} + \\
 & + P_{n_x, n_y+2d} + P_{n_x, n_y-2d}) - \frac{\mathcal{D}_{01} \mathcal{D}_{10}}{8\epsilon d^3} \sum_{n_x n_y} P_{n_x n_y} (P_{n_x+2d, n_y}^+ + P_{n_x-2d, n_y}^+ + P_{n_x, n_y+2d}^+ + P_{n_x, n_y-2d}^+)
 \end{aligned} \quad (\text{II.2.6.)})$$

gde je:  $\mathcal{N}$  - broj dipola u kristalu.

Dalju račun izvršićemo u harmonijskoj aproksimaciji, a to znači da ćemo Pauli operatore  $P^+$  i  $P$  preći na Boze operatore  $B^+$  i  $B$  po približnim formulama:

$$P \approx B \quad \text{i} \quad P^+ \approx B^+ \quad (\text{II.2.7.)}$$

Posle Furije transformacije:

$$B_{n_x n_y} = \frac{1}{\sqrt{v \epsilon d^3}} \sum_{k_x k_y} B_{k_x k_y} e^{i(n_x k_x + n_y k_y)} ; B_{n_x n_y}^+ = \frac{1}{\sqrt{v \epsilon d^3}} \sum_{k_x k_y} B_{k_x k_y}^+ e^{-i(n_x k_x + n_y k_y)} \quad (\text{II.2.8.)})$$

$$\mathcal{N} = c \mathcal{N}_x \mathcal{N}_y$$

Hamiltonian se može napisati u obliku:

$$\hat{H} = \mathcal{N} \left( H_{00} - \frac{\mathcal{D}_{00}^2}{2\epsilon d^3} \right) + \sum_{K_x K_y} X(K_x K_y) B_{K_x K_y}^+ B_{K_x K_y} + \frac{1}{2} \sum_{K_x K_y} Y(K_x K_y) (B_{K_x K_y}^+ B_{-K_x -K_y} + B_{K_x -K_y} B_{-K_x K_y}) \quad (\text{II.2.9.})$$

gde su upotrebljene oznake:

$$X(K_x, K_y) = H_{11} - H_{00} - \frac{\mathcal{D}_{110}\mathcal{D}_{00}}{2\epsilon d^3} - \frac{\mathcal{D}_{110}\mathcal{D}_{00} + 2\mathcal{D}_{10}^2}{4\epsilon d^3} (\cos 2dK_x + \cos 2dK_y)$$
$$Y(K_x, K_y) = -\frac{\mathcal{D}_{10}^2}{2\epsilon d^3} (\cos 2dK_x + \cos 2dK_y) \quad (\text{II.2.10.})$$

### II.3. Elementarno pribudjenje sistema

Da bi smo našli energije elementarnih eksitacija potrebno je dijagonalizovati Hamiltonijan (II.2.9.). Ova dijagonalizacija biće izvršena poznatim uv transformacijama Bogoliubova. Kod ove vrste transformacije dovoljno je da se dijagonalizuje unutrašnja forma izraza (II.2.9.) koja se može napisati u obliku:

$$\mathcal{H} = X \hat{B}^{\dagger} B + \frac{1}{2} Y (\hat{B}^{\dagger} \hat{B} + B^{\dagger} B); X \equiv X(K_x, K_y); Y \equiv Y(K_x, K_y); B \equiv B_{K_x, K_y} \quad (\text{II.3.1.})$$

Jednačina kretanja glasi:

$$i\dot{B} = [B, \mathcal{H}] \quad (\text{II.3.2.})$$

Pošto je:

$$[B, \mathcal{H}] = XB + YB \quad (\text{II.3.3.})$$

možemo pisati:

$$i\dot{B} = XB + YB^+ \quad (\text{II.3.4.})$$

Od Boze operatora  $B^+$  i  $B$  prećićemo na nove Boze operatorе  $C^+$  i  $C$  pomoću transformacije:

$$B = UC^+ + VC; \quad B^+ = UC^+ + VC \quad (\text{II.3.5})$$

Funkcije  $u$  i  $v$  zadovoljavaju uslov kanoničnosti:

$$U^2 - V^2 = I \quad (\text{II.3.6.})$$

Isti ovaj uslov obezbeđuje egzistenciju inverzne transformacije

$$C = UB - VB^+; \quad C^+ = UB^+ - V B \quad (\text{II.3.7.})$$

Pošto je:

$$C(t) = C(0) e^{-iEt}; \quad C^+(t) = C^+(0) e^{iEt} \quad (\text{II.3.8.})$$

na osnovu ovih formula i formula (II.3.5.) dolazimo do zaključka da je:

$$i\dot{B} = E (uC - vC^+) \quad (\text{II.3.9.})$$

ako (II.3.9.) uvrstimo u (II.3.4.) za određivanje funkcija  $u$  i  $v$  kao i energija  $E$  dobija se sledeći sistem homogenih jednačina:

$$(E-X)u - Yv = 0; \quad Yu + (E-X)v = 0 \quad (\text{II.3.10.})$$

Izjednačujući sekularnu jednačinu sistema (II.3.10.) sa nulom dobijamo:

$$E = \sqrt{X^2 - Y^2} \quad (\text{II.3.11.})$$

Hamiltonian (II.2.9.) dobija dijagonalni oblik:

$$\hat{H} = \delta P \left( H_{00} - \frac{\partial_{00}^2}{2Ed^3} \right) + \delta H_0 + \sum_{K_x K_y} \sqrt{X^2(K_x, K_y) - Y^2(K_x, K_y)} C_{K_x K_y}^+ C_{K_x K_y} \quad (\text{II.3.12.})$$

Energija elementarnih pobudjenja  $E(K_x, K_y)$  može se napisati u obliku:

$$E(K_x, K_y) = \sqrt{[\Delta - \alpha(\cos 2dK_x + \cos 2dK_y)] [\Delta - \beta(\cos 2dK_x + \cos 2dK_y)]} \quad (\text{II.3.13.})$$

gde je:

$$\Delta = H_{11} - H_{00} \approx 300 \text{ meV}; \quad \alpha = \frac{\partial_{11} \partial_{00}}{4Ed^3} = 2000 \text{ meV}; \quad \beta = \frac{4\partial_{10}^2 + \partial_{00}\partial_{11}}{4Ed^3} = 2100 \text{ meV} \quad (\text{II.3.14.})$$

Iz poslednjih formula se vidi da je minimalna vrednost energije elementarnih pobudjenja:

$$E\left(\frac{\pi}{4d}, \frac{\pi}{4d}\right) = 300 \text{ meV} \quad (\text{II.3.15.})$$

dok je maksimalna energija pobudjenja:

$$E\left(\frac{\pi}{2d}, \frac{\pi}{2d}\right) = 4400 \text{ meV} \quad (\text{II.3.16.})$$

Energija sredine Briluenove zone  $E(0,0)$  i energija kraja Briluenove zone  $E\left(\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}\right)$  medjusobno su jednake i iznose:

$$E(0,0) = E\left(\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}\right) = 3800 \text{ meV} \quad (\text{II.3.17.})$$

Kao što se vidi energije elementarnih pobudjenja kreću se u širokom rasponu od 300 do 4400 meV. Takodje je očigledno da se talasi ovih pobudjenja kao kolektivni fenomen membrane prostiru u ravnima normalnim na osu z tj. u ravnima normalnim na pravac debeline membrane,

#### II.4. Procena energije i bio-procesi za koje bi dipolni mehanizam bio od značaja

Izvršeni računi mogli bi se iskoristiti za objašnjenje sinteze adenozintrifosforne kiseline (ATF) iz adenozindifosforne kiseline (ADF). Ovaj proces može se predstaviti hemiskom jednačinom:



Kao što se vidi u završnoj fazi obrazuje se molekul vode koji bi u skladu sa napred izloženom teorijom služio kao aktivator i katalizator povratne reakcije (II.4.1.) putem napred opisanog dipol-dipolnog mehanizma prenosa.

Kretanje elektrona duž dipola koje je napred opisano trebalo bi da daje napred pominjane elektronske impulse koji dovode do sinteze odnosno do razgradnje.

Treba napomenuti da se svi autori teorija koje pokušavaju da objasne procese (II.4.1.) i slične slažu u jednom, a to je da elektroni igraju fundamentalnu ulogu kao aktivatori ovih procesa. Razmimoilaženja nastaju po pitanju koji je to mehanizam koji pokreće elektrone i kakvo kretanje vrše elektroni kroz membranu.

Postoje teorije koje tvrde da su uzrok sinteze i razgradne makromolekula elektronske struje tj. kontinualni protok elektrona kroz membranu. Nedostatak ovih teorija je taj što se membrana ponaša kao dielektrik i u njoj nije konstatovana nikakva struja.

Drugi tip teorija zastupa ideju poluprovodničkog mehanizma u kome struja nastaje kad kvant svetlosti prebaci elektron iz popunjene u provodnu zonu. Ove teorije više odgovaraju eksperimentalnim činjenicama jer je konstatovano da kvanti svetlosti zaista iniciraju procese sinteze i razgradnje, ali pate od istog nedostatka kao i predhodne, jer struje u membranama nisu registrovane.

Takođe postoje ideje da elektron - fonon interakcija može da objasni procese sinteze i razgradnje, ali u teorijama ovoga tipa se ide na lokalizovane fenomene (proces sinteze i razgradnje bi trebalo da se vrši samo u pojedinačnim tačkama membrane, a ne u membrani kao celini) što očigledno nije u skladu sa onim što se zna o procesima u membranama.

U teoriji koja je ovde izložena nema struje elektrona (membrana se ponaša kao dielektrik), a elektronski impulsi se dobijaju kvantnim skokovima vezanih elektrona u dipolnom polju. Ovime je izbegnut osnovni nedostatak "strujnih" teorija tj. u okviru ove teorije membrana ostaje dielektrik, a elektronski impulsi ipak postoje. Osim toga iz izložene teorije se vidi da su pomenuti elektronski skokovi kolektivizovano pobudjene membrane kao celine i nisu ograničeni na pojedine tačke membrane. Mehanizam prenosa je dipol-dipolnog tipa, a kao što se zna sistemi dipola se najefikasnije pobudjuju kvantima svetlosti. Takođe se može smatrati da u prilog navedenoj teoriji ide i eksperimentalna činjenica da prisustvo vode ubrzava procese sinteze i razgradnje makromolekula u membranama.

Nedostatci izložene teorije sastoje se uglavnom u tome što red veličina energija pobudjenja ne odgovara eksperimentalno konstatovanoj (veći je za 10 do 100 puta). Ako se setimo da je red veličine energija dobijen uslovom normiranja  $z_{00} = 5 \cdot 10^{-8}$  cm onda nije isključeno da bi se bolja saglasnost postigla nekim drugim izborom normiranja. To bi se lako moglo izvršiti, ali bi onda dobili abnormalno male vrednosti dielektrične konstante medijuma membrane što opet nebi odgovaralo eksperimentalnim činjenicama.

Z A K L J U Č A K

Analize koje su izvršene u diplomskom radu ukazuju na to da se u slučaju obrazovanja ATF može razmišljati o dipolnom mehanizmu kao jednom od osnovnih izazivača ovih procesa. U modelu koji je napravljen, elektronski impulsi koji su izazivač sinteze i ~~z~~azgradnje ATF nisu rezultat kretanja slobodnih elektrona, već kvantnih skokova vezanih elektrona duž dipolnog polja. Dipol-dipolna interakcija kolektivizira ove kvantne skokove na celu membranu, tako da i u ovom smislu model odgovara trenutnim saznanjima o procesima u membranama.

Nedostatci navedenog modela su prevelike energije napred posmenutih pobudjenja. Osim toga kolektivizacija fenomena elektronskih skokova izvršena je korišćenjem modela proste kubne rešetke sa наруšenom simetrijom, što svakako predstavlja grubu aproksimaciju stvarnog rasporeda dipola u membranama. Za membranu se može smatrati da predstavlja amorfnu sredinu sa haotičnim rasporedom dipola. Zamenu haotičnog rasporeda kubnom strukturu može se opravdati jedino činjenicom da je dipol-dipolna interakcija pri haotičnom rasporedu dipola ravna nuli, kao i u bilo kakvoj kubnoj strukturi. Pojava dipol-dipolne interakcije razmatrana je kao posledica prostorne ograničenosti membrane duž jednog pravca.

L I T E R A T U R A

1. A. Szent Gyorgyi, Bioenergetics, Academic Press,  
New York, 1957
2. A. Szent Györgyi, Bioelectronics, Academic Press,  
New York, 1968
3. A. Szent Györgyi, Introd. to a Submolecular Biology  
Academic Press, New York, 1960
4. H. Fröhlich, Int. J. of Q. Chem. 2, 641 (1968)
5. L.A. Blumenfeld, "problemi biologičeskoj fiziki"  
Nauka, Moskva 1974
6. A.S. Davidov "Kvantovaja mehanika"  
GIFML, Moskva, 1963