Физика волновых процессов и радиотехнические системы

ЭЛЕКТРОДИФФУЗИЯ ИОНОВ ЧЕРЕЗ КЛЕТОЧНУЮ МЕМБРАНУ

А.Н. Волобуев

ELECTRODIFFUSION OF IONS THROUGH A CELLULAR MEMBRANE

A.N. Volobuyev

Рассмотрено решение электродиффузионного уравнения Нернста - Планка в различных случаях: стационарного потока ионов натрия через клеточную мембрану; в самосогласованной задаче, когда перенос ионов через мембрану определяет изменение электрического поля на мембране; в несамосогласованной задаче, когда на мембране поддерживается постоянное электрическое поле. Показано, что в самосогласованной задаче возникает диффузионная концентрационная волна, движущаяся через мембрану.

1. Электродиффузионное уравнение Нернста-Планка

Через мембраны клеток движутся как нейтральные молекулы, так и ионы. Рассмотрим пассивное (без затрат энергии АТФ) движение через мембрану положительных ионов с зарядом q_0, рис. 1.

Плотность потока заряженных частиц через мембрану Ф складывается из двух составляющих: плотности потока за счет градиента концентрации Φ_0 и за счет градиента электрического потенциала $\Phi_э$:

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_э. \qquad (1.1)$$

Плотность потока за счет градиента концентрации по закону Фика равна:

$$\Phi_O = -D^* \frac{dC}{dX}, \qquad (1.2)$$

А.Н. Волобуев, д.т.н.

г. Самара, Самарский государственный медицинский университет

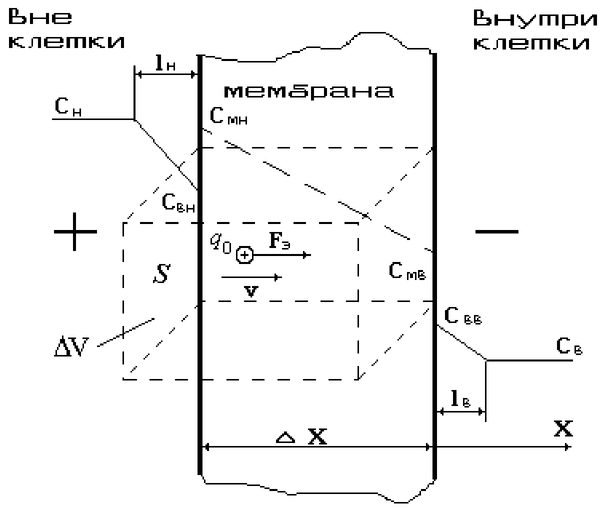

Рис. 1. Расчетная схема клеточной мембраны. Показаны движущейся через мембрану ион и примерное распределение концентрации в мембране и у ее границ в несамосогласованной задаче

где D^* — молярный коэффициент диффузии, dC/dX — градиент молярной концентрации ионов на мембране.

На заряженную частицу в мембране, на которой существует разность потенциалов, действует электрическая сила $F_э = q_0 E$, где q_0 — заряд частицы, E — напряженность электрического поля в мембране.

По определению, плотность потока частиц $\Phi = N/(S\Delta t)$, где N — количество ионов, переносимых через поверхность S мембраны за время Δt. Если n — числовая концентрация ионов в мембране (число ионов в единице объема ΔV мембраны), то $N = n\Delta V = nS\Delta X$.

Следовательно:

© А.Н. Волобуев, 2008

$$\Phi_Э = \frac{nS\Delta X}{S\Delta t} = n\mathrm{v}, \qquad (1.3)$$

где v — скорость движения иона в мембране.

Скорость движения иона в мембране пропорциональна электрической силе, действующей на него:

$$\mathrm{v} = bF_Э = q_0 bE, \qquad (1.4)$$

где b — подвижность иона.

Учитывая связь напряженности электрического поля и градиента потенциала $E = -d\varphi / dX$, получаем:

$$\Phi_Э = n\mathrm{v} = -q_0 nb\frac{d\varphi}{dX}. \qquad (1.5)$$

Используя связь числовой и молярной концентраций $n = CN_A$, где $N_A = 6{,}02 \cdot 10^{23}\,моль^{-1}$ – число Авогадро, находим:

$$\Phi_Э = n\mathrm{v} = -q_0 N_A bC\frac{d\varphi}{dX}. \qquad (1.6)$$

Величина $q_0 N_A$ представляет собой заряд одного моля переносимых через полупроницаемую мембрану ионов. Учитывая определение постоянной Фарадея F (заряд одного моля одновалентных ионов), имеем $q_0 N_A = zF$, где z – валентность иона, движущегося через мембрану. Окончательно плотность потока частиц через мембрану за счет градиента потенциала записывается в виде:

$$\Phi_Э = -zFbC\frac{d\varphi}{dX}. \qquad (1.7)$$

Общая плотность потока ионов через мембрану, на которой имеется градиент концентрации и градиент потенциала, с учетом закона Фика, записывается в виде уравнения:

$$\Phi = \Phi_0 + \Phi_Э = -D^*\frac{dC}{dX} - zFbC\frac{d\varphi}{dX}. \qquad (1.8)$$

Это уравнение носит название электродиффузионного уравнения Нернста-Планка [1]. Оно показывает, что если имеется два потока частиц, за счет градиента концентрации и градиента потенциала, то общая плотность потока частиц пропорциональна обоим градиентам.

Уравнение (1.8) нелинейное, т.к. в него входит произведение неизвестных функций $Cd\varphi / dX$.

2. Решение уравнения Нернста-Планка в стационарном случае

Предположим, что через мембрану движется один сорт ионов. Так как потенциал внутри мембраны меняется линейно (в мембране отсутствуют ферромагнитные частицы), то

$$\frac{d\varphi}{dX} = \frac{\Delta\varphi}{\Delta X},$$

где $\Delta\varphi$ — потенциал (приращение потенциала) на мембране.

Введем безразмерный потенциал:

$$\psi = \frac{zFb\Delta\varphi}{D^*}. \qquad (2.1)$$

Подставляя (2.1) в уравнение Нернста-Планка (1.8), получаем:

$$\Phi = -D^*\frac{dC}{dX} - D^*\frac{C\psi}{\Delta X}. \qquad (2.2)$$

Введем новую переменную:

$$t = \frac{\Phi}{D^*} + \frac{C\psi}{\Delta X}. \qquad (2.3)$$

Подставляя (2.3) в (2.2), находим:

$$t = -\frac{dC}{dX}. \qquad (2.4)$$

Разделяя переменные в дифференциальном уравнении (2.4), и находя интегралы от левой и правой частей получаемого равенства, имеем:

$$\int_0^{\Delta X} dX = -\int_{C_{мн}}^{C_{мв}} \frac{dC}{t}, \qquad (2.5)$$

где $C_{мн}$ и $C_{мв}$ — концентрация частиц в мембране у ее границ снаружи и внутри клетки.

Связь дифференциалов dt и dC найдем, используя формулу (2.3). При этом будем считать, что плотность потока частиц через мембрану постоянна, $\Phi = const$, т. е. процесс установившийся.

$$dt = \frac{\psi}{\Delta X}dC. \qquad (2.6)$$

Кроме того, сделаем замену пределов интегрирования в (2.5) по формулам, следующим из (2.3):

$$t_в = \frac{\Phi}{D^*} + \frac{C_{мв}\psi}{\Delta X};\, t_н = \frac{\Phi}{D^*} + \frac{C_{мн}\psi}{\Delta X}. \qquad (2.7)$$

Вводя коэффициент распределения вещества $C_{мн} = KC_{вн}; C_{мв} = KC_{вв}$, где $C_{вн}$ и $C_{вв}$ — концентрация частиц в межклеточной жидкости и цитоплазме клетки у границ мембраны снаружи и внутри клетки, а также вводя коэффициент проницаемости $P_O = D^* K / \Delta X$, получим:

$$t_в = \frac{1}{D^*}\left(\Phi + P_O\psi C_в\right);\, t_н = \frac{1}{D^*}\left(\Phi + P_O\psi C_н\right). \qquad (2.8)$$

Так как коэффициент проницаемости взят общий, с учетом примембранных слоев, то в формулах (2.8) используются значения концентраций переносимых частиц вдали от мембраны.

Интегрируя (2.5), с учетом (2.6) и (2.8) найдем:

$$\Delta X = -\frac{\Delta X}{\psi}\int_{t_н}^{t_в}\frac{dt}{t} = -\frac{\Delta X}{\psi}\ln\frac{t_в}{t_н}. \qquad (2.9)$$

Потенцируя (2.9), находим:

$$t_в = t_н e^{-\psi}. \qquad (2.10)$$

Подставляя формулы (2.8) в (2.10) и, находя из этого уравнения плотность потока частиц Φ, получаем:

$$\Phi = -P_O\psi\frac{C_в - C_н e^{-\psi}}{1-e^{-\psi}}. \qquad (2.11)$$

Формула (2.11) устанавливает в стационарном случае количественную связь между плотностью потока ионов одного сорта через мембрану, проницаемостью мембраны для этих ионов, концентрацией их по обе стороны мембраны и мембранным потенциалом.

Если безразмерный потенциал $\psi = 0$, то формула (2.11) переходит в закон Фика для незаряженных частиц. Учитывая, что:

$$\lim\frac{\psi}{1-e^{-\psi}} = 1 \text{ при } \psi \to 0,$$

получим:

$$\Phi = P_o\left(C_н - C_в\right).$$

3. Нестационарное электродиффузионное уравнение Нернста-Планка

Найдем уравнение электродиффузии ионов в мембране в нестационарном случае. Запишем уравнение Нернста-Планка (1.8) в векторной форме:

$$\begin{aligned}\vec{\Phi} &= -D^*\operatorname{grad}C - zFbC\operatorname{grad}\varphi = \\ &= -D^*\operatorname{grad}C + zFbC\vec{E},\end{aligned} \qquad (3.1)$$

где учтено, что напряженность электрического поля в мембране $\vec{E} = -\operatorname{grad}\varphi$.

Уравнение неразрывности для потока движущихся зарядов имеет вид [2]:

$$N_A\frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div}\vec{\Phi} = 0. \qquad (3.2)$$

Используем также уравнение Максвелла [3]:

$$\operatorname{div}\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_a} = \frac{zFC}{\varepsilon_a}, \qquad (3.3)$$

где ε_a - абсолютная диэлектрическая проницаемость вещества мембраны, $\rho = dq/dV = q_0 N_A C = zFC$ - объемная плотность заряда в мембране.

Система уравнений (3.1) - (3.3) представляет собой самосогласованную систему, т.к. электрическое поле в мембране определяется переносимыми через нее ионами.

Найдем дивергенцию от уравнения (3.1):

$$\begin{aligned}\operatorname{div}\vec{\Phi} &= -D^*\operatorname{div}\operatorname{grad}C + zFb\operatorname{div}\left(C\vec{E}\right) = \\ &= -D^*\Delta C + zFb\vec{E}\operatorname{grad}C + zFbC\operatorname{div}\vec{E}\end{aligned}, \qquad (3.4)$$

где ΔC - лапласиан молярной концентрации.

Исключая из уравнений (3.2) и (3.4) плотность потока частиц $\vec{\Phi}$, получим:

$$N_A\frac{\partial C}{\partial t} = D^*\Delta C - zFb\vec{E}\operatorname{grad}C - zFbC\operatorname{div}\vec{E}. \qquad (3.5)$$

Учитывая $D = D^*/N_A$ - коэффициент диффузии ионов в мембране, а также уравнение (3.3), найдем:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\Delta C - \frac{zFb}{N_A}\vec{E}\operatorname{grad}C - \frac{(zFC)^2}{\varepsilon_a N_A}b. \qquad (3.6)$$

С учетом $q_0 N_A = zF$ и (1.4) преобразуем

$$\frac{zFb}{N_A}\vec{E} = \frac{q_0 N_A b\vec{E}}{N_A} = \vec{v}$$

- скорость движения ионов и обозначим

$$\alpha = \frac{(zF)^2}{\varepsilon_a N_A}b.$$

В результате уравнение (3.6) примет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{v}\operatorname{grad}C + \alpha C^2 = D\Delta C. \qquad (3.7)$$

Получено нестационарное, нелинейное уравнение электродиффузии.

В проекции на координату X уравнение (3.7) преобразуется:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v\frac{\partial C}{\partial X} + \alpha C^2 = D\frac{\partial^2 C}{\partial X^2}. \qquad (3.8)$$

4. Решение нестационарного уравнения Нернста-Планка, в самосогласованной задаче диффузии ионов через мембрану

Вид уравнения (3.8) показывает, что оно имеет волновой характер.

Покажем сначала, следуя [4], что уравнение (3.8) не имеет решений в виде стоячих волн.

Для этого введем обозначение:

$$\frac{\partial C}{\partial X} = f(X,t), \qquad (4.1)$$

где $f(X,t)$ - дифференцируемая функция.

Уравнение (3.8) преобразуется к виду:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + vf + \alpha C^2 = D\frac{\partial f}{\partial X}. \qquad (4.2)$$

Найдем производную по t от уравнения (4.1) и по X от уравнения (4.2). Затем исключим из (4.1) и (4.2) смешанную производную $\partial^2 C/(\partial t \partial X)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathrm{v}\frac{\partial f}{\partial X} + 2\alpha C f = D\frac{\partial^2 f}{\partial X^2}. \qquad (4.3)$$

Найдем из (4.3) молярную концентрацию C и подставим ее в уравнение (4.1):

$$\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{f_t + \mathrm{v} f_X - D f_{XX}}{2\alpha f}\right) = -f. \; (4.4)$$

Представим функцию f в виде произведения двух функций $f = \Phi(t)F(X)$, что эквивалентно стоячей волне.

Уравнение (4.4) преобразуется к виду:

$$\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{1}{2\alpha}\frac{\Phi_t}{\Phi} + \frac{\mathrm{v}}{2\alpha}\frac{F_X}{F} - \frac{D}{2\alpha}\frac{F_{XX}}{F}\right) = -\Phi F. \qquad (4.5)$$

Находя производную по X, получим:

$$\frac{1}{F}\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\mathrm{v}}{2\alpha}\frac{F_X}{F} - \frac{D}{2\alpha}\frac{F_{XX}}{F}\right) = -\Phi = \mathrm{const}, \qquad (4.6)$$

т.к. слева и справа в уравнении (4.6) стоят функции разных аргументов.

Таким образом, функция f, а, следовательно, и C не зависят от времени, что противоречит уравнению (4.1). Следовательно, функция f не может быть представлена в виде произведения двух функций $f = \Phi(t)F(X)$, т.е. уравнение (3.8) не имеет решений в виде стоячих волн.

В связи с тем, что уравнение (3.8) носит волновой характер, будем искать его решение в виде бегущей волны $C = C(\xi)$, где волновой аргумент $\xi = kX - \omega t$, где k - волновое число и ω - циклическая частота волны. При этом скорость концентрационной волны равна скорости движения ионов в мембране, так что $\mathrm{v} = \dfrac{\omega}{k}$.

В этом случае первые два слагаемых в сумме дают нуль и уравнение (3.8) приобретает вид:

$$\alpha C^2 = D k^2 \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2}. \qquad (4.7)$$

Введем обозначение

$$\delta = \frac{\alpha}{D k^2} = \left(\frac{zF}{k}\right)^2 \frac{1}{\varepsilon_a R T},$$

где использована формула Эйнштейна для коэффициента диффузии

$$D = b\frac{R}{N_A}T.$$

Перепишем уравнение (4.7):

$$\delta C^2 = \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2}. \qquad (4.8)$$

Преобразуем уравнение (4.8) к форме, рекомендуемой [5]. Для этого проведем замену

$$Z = \sqrt{\frac{\delta}{6}}\xi = \frac{zF}{k}\frac{\xi}{\sqrt{6\varepsilon_a RT}}.$$

Уравнение (4.8) запишется в виде:

$$6C^2 = \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2}. \qquad (4.9)$$

Решением этого уравнения является эллиптическая функция Вейерштрасса, являющаяся обращением эллиптического интеграла первого рода:

$$C = \gamma(Z + A_2) \qquad (4.10)$$

с инвариантами $g_2 = 0$ и $g_3 = A_1$, где A_i - постоянные интегрирования [6], так что

$$Z + A_2 = -\int_{\infty}^{C} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - g_2 u - g_3}}.$$

Перед корнем принимаем знак минус.

Граничные условия задачи:

$$C(0,t) = C_{мн} \text{ и } C(\Delta X, t) = C_{мв}. \qquad (4.11)$$

Рассмотрим электродиффузию через клеточную мембрану ионов Na^+. Пусть при $t = 0$ концентрация ионов Na^+ снаружи мембраны $C(0,0) = C_{мн} = 145$ моль/м^3 [7], внутри мембраны $C(\Delta X, 0) = C_{мв} = 0$, это удобно для вычислений. Таким образом, граничное условие на левой стороне мембраны $145 = \gamma(A_2; A_1)$. Принято, толщина мембраны $\Delta X = 8 \cdot 10^{-9}\,м$. Для нахождения величины $Z_{мв}$ (внутри мембраны) вычислим коэффициент

$$\sqrt{\frac{\delta}{6}} = \frac{zF}{k}\frac{1}{\sqrt{6\varepsilon_a RT}}.$$

Валентность Na^+ равна $z = 1$, постоянная Фарадея $F = 96500$ Кл/моль, абсолютная диэлектрическая проницаемость мембраны $\varepsilon_a = \varepsilon\varepsilon_0 = 5{,}31 \cdot 10^{-11}$ Ф/м, где $\varepsilon \approx 6$ - относительная диэлектрическая проницаемость вещества мембраны [8], $\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м - электрическая постоянная. Универсальная газовая постоянная $R = 8{,}31$ Дж/моль·К, температуру мембраны принимаем $T \approx 310K$. Следовательно,

$$k\sqrt{\frac{\delta}{6}} \approx 0{,}107 \cdot 10^9 \left(\frac{м}{моль}\right)^{\frac{1}{2}}$$

и величина

$$Z_{мв} = \sqrt{\frac{\delta}{6}} k \Delta X = 0{,}854 \left(\frac{м^3}{моль}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

На правой стороне мембраны граничное условие имеет вид

$$0 = \gamma(Z_{мв} + A_2; A_1) = \gamma(0{,}854 + A_2; A_1).$$

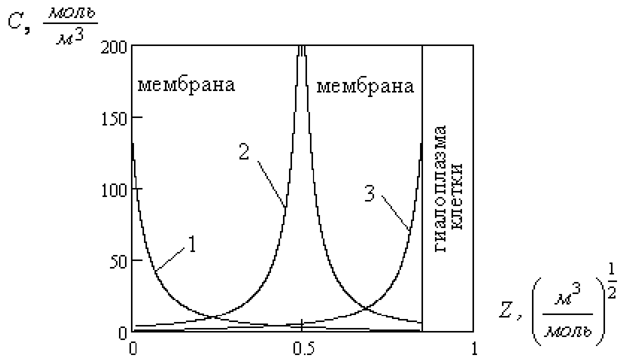

Рис. 2. Движение через мембрану диффузионной концентрационной волны в самосогласованной задаче. Кривые волнового процесса показаны для различных моментов времени: 1 - начальный момент времени $t = 0$; 2 - в момент времени, соответствующий волновому аргументу $X - \mathrm{v} \cdot t$ $= 0,467 \cdot 10^{-8}$м ; 3 - в момент времени $t = 6,1 \cdot 10^{-5}$с

Используя интегральное представление функции Вейерштрасса [6], граничные условия при $t = 0$ можно записать в виде:

На левой стороне мембраны:

$$A_2 = -\int_{\infty}^{145} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - A_1}}, \qquad (4.12)$$

На правой стороне мембраны:

$$0,854 + A_2 = -\int_{\infty}^{0} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - A_1}}. \qquad (4.13)$$

Подставляя (4.12) в (4.13), найдем:

$$0,854 - \int_{\infty}^{145} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - A_1}} = -\int_{\infty}^{0} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - A_1}}. \qquad (4.14)$$

Объединяя интегралы в (4.14), запишем:

$$0,854 = \int_{0}^{145} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - A_1}}. \qquad (4.15)$$

Из интегрального уравнения (4.15) имеем:

$A_1 = -45$ (моль / м^3)^3.

Величину $A_2 = 0,083 \left(\text{м}^3/\text{моль}\right)^{\frac{1}{2}}$ найдем, используя (4.12).

Таким образом, при $t = 0$ график зависимости

$C = \gamma\left(Z + A_2\right) = \gamma\left(Z + 0,083\right)$

имеет вид, рис. 2, кривая 1.

Найдем изменение зависимости $C = \gamma\left(Z + 0,083\right)$ с течением времени. Величина

$$Z = \sqrt{\frac{\delta}{6}}\xi = \frac{zF}{k}\frac{kX - \omega t}{\sqrt{6\varepsilon_a RT}} = \frac{zF}{\sqrt{6\varepsilon_a RT}}\left(X - \mathrm{v}t\right).$$

Таким образом, график концентрации со временем смещается вправо со скоростью v и предыдущие граничные условия не сохраняются.

Скорость движения иона, а следовательно, и графика концентрации в мембране согласно (1.4) равна

$$\mathrm{v} = bF_э = q_0 bE = -q_0 b\frac{\Delta\varphi}{\Delta X} =$$

$$= -q_0\frac{DN_A}{RT}\frac{\Delta\varphi}{\Delta X} = 1,31 \cdot 10^{-4} \text{ м/с}.$$

В расчете принято $\Delta\varphi = -0,08\, B$ - потенциал на мембране, для иона Na^+ величина $q_0 = 1,602 \cdot 10^{-19}$ $Кл$, коэффициент диффузии иона в мембране $D = 3,5 \cdot 10^{-13}$ м^2/с [9]. Следовательно, величина $Z = 1,07 \cdot 10^8\left(X - \mathrm{v} \cdot t\right)$.

Функция Вейерштрасса периодическая. Учитывая, что дискриминант

$g_2^3 - 27g_3^3 = -27 \cdot A_1^2 = -54675 < 0$,

находим длину полуволны концентрации [6]:

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{1}{2}\int_0^{\infty} \frac{du}{\sqrt{4u^3 - A_1}} = 0,468\left(\text{м}^3/\text{моль}\right)^{\frac{1}{2}}. \qquad (4.16)$$

На рис. 2 показано движение волны концентрации ионов Na^+ через мембрану клетки. Кривая 1 соответствует начальному моменту времени $t = 0$. Кривая 2 - уединенная волна концентрации в мембране при $Z = 0,5$(м^3/моль)$^{\frac{1}{2}}$ на амплитуде волны или при $X - \mathrm{v} \cdot t = 0,467 \cdot 10^{-8}$м . Кривая 3 соответствует моменту времени $t = \Delta X / \mathrm{v}$ $= 6,1 \cdot 10^{-5} c$. Амплитуда волны концентрации равна бесконечности в связи с допущением об отсутствии размеров у ионов, т.е. представлении ионов в виде материальных точек.

Уравнение для распределения потенциала в мембране следует из (3.3) с учетом $\vec{E} = -\text{grad}\varphi$:

$$\Delta\varphi = -\frac{zFC}{\varepsilon_a}. \qquad (4.17)$$

Переходя к координате Z, в проекции на ось X находим:

$$\frac{\partial^2\varphi}{\partial Z^2} = -6\frac{RT}{zF}C = -6\frac{RT}{zF}\gamma\left(Z + 0,083\right). \qquad (4.18)$$

Однократное интегрирование уравнения (4.18) дает:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial Z} = 6\frac{RT}{zF}\varsigma\left(Z + 0,083\right) + A_3, \qquad (4.19)$$

где $\varsigma\left(Z\right)$ - дзета-функция Вейерштрасса, так что $d\varsigma\left(Z\right)/dZ = -\gamma\left(Z\right)$.

Последующее интегрирование позволяет получить распределение потенциала на мембране:

$$\varphi\left(Z\right) = 6\frac{RT}{zF}\ln\left[\sigma\left(Z + 0,083\right)\right] + A_4 Z + A_5, \qquad (4.20)$$

где $\sigma\left(Z\right)$ - сигма-функция Вейерштрасса, так что $d\ln\sigma\left(Z\right)/dZ = \varsigma\left(Z\right)$, постоянная $A_4 =$ $6(RT / zF)A_3$.

Сравнивая (4.20) с формулой Нернста для равновесного натриевого потенциала на мембране

$$\varphi = \frac{RT}{zF}\ln\frac{\left[Na^{+}\right]_{н}}{\left[Na^{+}\right]_{в}},$$

заключаем [1], что постоянные интегрирования A_4, A_5 равны нулю. Следовательно, потенциал на мембране:

$$\varphi(Z) = \frac{RT}{zF}\ln\left[\sigma(Z+0,083)\right]^{6}. \qquad (4.21)$$

5. Решение нестационарной, несамосогласованной задачи диффузии ионов через мембрану

Несамосогласованное решение задачи переноса иона через полупроницаемую мембрану определяется постоянством напряженности электрического поля в мембране, которое создается за счет внешних факторов. Поэтому уравнения для расчета процесса переноса в этом случае имеют вид (3.1) и (3.2) с добавлением условия $\vec{E} = const$. В этом случае в уравнении (3.5) нужно положить $\mathrm{div}\vec{E} = 0$:

$$N_A\frac{\partial C}{\partial t} = D^{*}\Delta C - zFb\vec{E}\,\mathrm{grad}\,C. \qquad (5.1)$$

В проекции на ось X уравнение (5.1) преобразуется к виду:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathrm{v}\frac{\partial C}{\partial X} = D\frac{\partial^2 C}{\partial X^2}. \qquad (5.2)$$

Уравнение (5.2) отличается от (3.8) только отсутствием нелинейного слагаемого.

Используя в (5.2) подстановку [10]:

$$C = \exp(kX-\omega t)\cdot u(X,t) + B, \qquad (5.3)$$

где $u(X,t)$ - функция координаты X и времени t, получим:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial X^2}. \qquad (5.4)$$

При этом соблюдаются условия: волновое число $k = \mathrm{v}/2D$, циклическая частота $\omega = \mathrm{v}^2/4D$.

Известно множество решений уравнения (5.4). Например, фундаментальное решение [10]:

$$u(X,t) = \frac{A}{2\sqrt{\pi Dt}}\exp\left(-\frac{X^2}{4Dt}\right). \qquad (5.5)$$

Подставляя (5.5) в (5.3), имеем:

$$C(X,t) = \frac{A}{2\sqrt{\pi Dt}}\exp\left(-\frac{(X-\mathrm{v}t)^2}{4Dt}\right) + B, \qquad (5.6)$$

где величины A и B определяются граничными условиями.

Решение (5.6) представляет собой движущийся со скоростью v через мембрану источник частиц, которые диффундируют от центра источника по мере его движения. Естественно, эта физическая картина не соответствует рассматриваемой задаче, и, следовательно, решение (5.6) является неприемлемым.

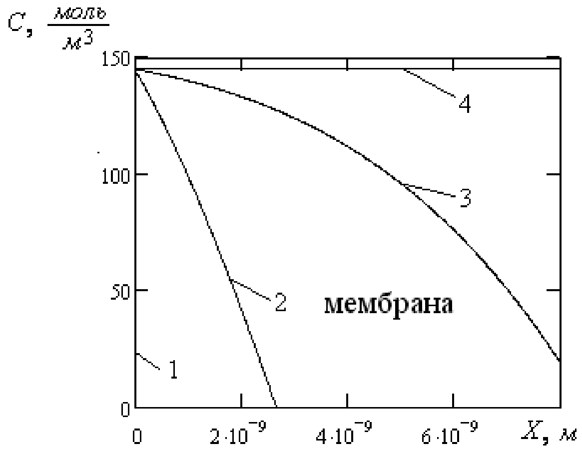

Рис. 3. Распределение концентрационного поля диффузии ионов в мембране в несамосогласованной задаче в различные моменты времени: $t = 0$ (прямая 1), $t = 10^{-5}$ с (кривая 2), $t = 10^{-4}$ с (кривая 3), $t = \infty$ (прямая 4)

Наиболее подходящим для нашей задачи является решение уравнения (5.2) в виде:

$$C(X,t) = A\,\mathrm{erf}\left(\frac{X}{2\sqrt{Dt}}\right)\times$$
$$\times\exp\left(\frac{\mathrm{v}}{4D}(2X-\mathrm{v}t)\right) + B, \qquad (5.7)$$

где

$$\mathrm{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z e^{-z^2}dz.$$

Граничные условия: при $t = 0$ на координате $X = \varepsilon$ концентрация $C(\varepsilon,0) = 0$, где ε - бесконечно малая величина, т.е. рассматриваем концентрацию внутри мембраны в непосредственной близости от границы. При $t = \infty$ на координате $X = 0$ (на границе мембраны) концентрация $C(0,\infty) = C_{мн}$.

Первое граничное условие, учитывая $\mathrm{erf}(\infty) = 1$, дает $0 = A + B$, т.е $A = -B$.

Второе граничное условие, учитывая $\mathrm{erf}(0) = 0$, дает $C(0,\infty) = B = C_{мн} = 145$ моль/м^3.

Таким образом, частное решение уравнения (5.2) имеет вид:

$$C(X,t) = C_{мн}\times$$
$$\times\left[1-\mathrm{erf}\left(\frac{X}{2\sqrt{Dt}}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{v}}{4D}(2X-\mathrm{v}t)\right)\right]. \qquad (5.8)$$

Графики этого решения показаны на рис. 3 для моментов времени $t = 0$ (прямая 1), $t = 10^{-5}$ с (кривая 2), $t = 10^{-4}$ с (кривая 3), $t = \infty$ (прямая 4).

В начальный момент времени рассматриваемые ионы в мембране отсутствуют. С увеличением времени появляется распределение концентрации ионов в мембране. У наружной стенки мембраны сохраняется постоянная концентрация $C_{мн} = 145$ моль/м^3. При большом времени наблюдения процесса диффузии, практически при $t = 10^{-2}$ с, концентрация ионов по всей мембране выравнивается и становиться равной 145 моль/м^3.

6. Заключение

При деполяризации клеточной мембраны в процессе возникновения потенциала действия наблюдается интенсивный ток ионов натрия через открывшиеся натриевые ионные каналы. Этот ток приводит к смене знака потенциала на внутренней стороне мембраны нейрона примерно с –80 мВ до +40 мВ, что указывает на самосогласованность процесса диффузии ионов. С другой стороны самосогласованность задачи требует изменения направления градиента концентрации ионов на мембране, которые и являются носителями зарядов, рис. 2.

Однако результаты экспериментов свидетельствуют о том, что градиент концентрации ионов натрия на мембране не только не меняет своего направления, но и изменяется незначительно. На это указывает тот факт, что даже при отсутствии подвода энергии АТФ к изолированному нервному волокну, т.е. при отсутствии работы активного транспорта, восстанавливающего градиент концентрации ионов на мембране, оно может довольно долго генерировать потенциалы действия. Таким образом, с точки зрения постоянства концентрационного градиента на мембране диффузионная задача может рассматриваться как несамосогласованная, рис. 3.

Возможно, что наблюдаемое противоречие объясняется затрудненностью диффузионных процессов около мембраны внутри и вне клетки. Внутри клетки гиалоплазма находится в гелеобразном состоянии, что значительно снижает скорость диффузии ионов внутрь клетки. Вне клетки процессу диффузии ионов мешает примембранный слой, насыщенный периферическими белками. Поэтому, возможно, при диффузии ионов через мембрану знаки потенциала меняются только в узких примембранных слоях. Общее же направление электрического поля на мембране, возможно, сохраняется. С этой точки зрения задача диффузии ионов в мембране является полусамосогласованной.

Литература

1. *Ю.А. Владимиров, Д.И. Рощупкин, А.Я. Потапенко, А.И. Деев.* Биофизика. М.: Медицина, 1983. С. 15, 126.

2. *А.Б. Рубин.* Биофизика. Т. 2. М.: Высшая школа, 1987. С. 50.

3. *Б.М. Яворский, А.А. Детлаф.* Справочник по физике. М.: Наука, 1990. С. 295.

4. *А.Д. Полянин, В.Ф. Зайцев, А.И. Журов.* Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2005. С. 144.

5. *Э.Камке.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. Пер. с нем. М.: Наука, 1976. С. 485.

6. *Д.С. Кузнецов.* Специальные функции. М.: Высшая школа, 1965. С. 344.

7. *Дж. Б. Мэрион.* Общая физика с биологическими примерами. М.: Высшая школа, 1986. С. 270.

8. *В.А. Березовский, Н.Н. Колотилов.* Биофизические характеристики тканей человека. Киев: Наукова думка, 1990. С. 16.

9. *М.В. Волькенштейн.* Биофизика. М.: Наука, 1981. С. 325.

10. *В.Ф. Зайцев, А.Д. Полянин.* Справочник. Дифференциальные уравнения с частными производными. Точные решения. М.: МПО, 1996. С. 253, 240.