arXiv:2602.02868v1 [quant-ph] 2 Feb 2026

微管色氨酸网络中的量子信息流

Lea Gassab,[1], * Onur Pusuluk,[2] 和 Travis J.A. Craddock[3], †[1]滑铁卢大学生物学、化学、物理与天文学系，滑铁卢纳米技术研究所，加拿大安大略省滑铁卢[2]卡迪尔·哈斯大学工程与自然科学学院，土耳其伊斯坦布尔法提赫，邮编*34083*[3]滑铁卢大学生物学、物理与天文学系，滑铁卢纳米技术研究所，加拿大安大略省滑铁卢

微管内的芳香族氨基酸残基网络，尤其是由色氨酸形成的网络，可能充当光学信息流的通路。这些网络中的紫外激发动力学通常采用有效非厄米哈密顿量建模。我们将这一方法扩展至纳入明确位点几何结构和偶极取向的林德布拉德主方程，追踪关联如何产生、路由和耗散，同时捕捉耦合发色团之间的能量耗散和信息传播。我们比较了局域注入、完全离域制备以及基于本征模的初态。为量化涌现的量子信息结构，我们评估选定发色团子网络内部及彼此之间的 L_1 相干性范数、关联相干性和对数负性。结果表明，信息流的方向和持续性都强烈依赖于初始制备的类型。超辐射分量推动关联迅速输出至环境，而亚辐射分量则留存关联并减缓其泄漏。将单个微管蛋白单元嵌入更大的二聚体和螺旋结构中，会重塑成对关联图，并实现位点选择性路由。扩展至更大的有序晶格会增强输出和留存通道，而静态能量与结构无序则会抑制长程传输并降低整体关联传递。这些发现为细胞骨架发色团网络中的信息流提供了林德布拉德图景，并揭示了能够在微管中暂时维持非经典关联的结构和动力学条件。

I. 引言

神经系统表现出节律同步和结构化关联，这些现象常被视为定向信息流的标志 [1–4]。神经元微管细胞骨架是一种由蛋白质聚合物构成的细胞内网络；有观点认为，除了提供结构支撑和参与轴突运输之外，它还发挥着重要作用，可作为在神经元内部传播和处理信息的潜在基质。与许多分裂细胞中观察到的快速周转不同，神经元微管含有相当大的稳定组分，以及长寿命聚合物区域。实验表明，神经元中的稳定微管群体可持续数小时，并与重塑时间尺度短得多的易变群体共存 [5, 6]。这种相对稳定性对于维持神经元形态和支持长距离运输至关重要，也促使人们探索微管内嵌的分子网络能否支持结构化关联路由。基于对关联与信息路由的一般性认识，我们转而研究微管中的分子网络，其中的光学相互作用可以在微观层面进行定量分析。

微管含有密集排列的芳香族氨基酸，其中色氨酸具有强紫外吸收能力和较大的跃迁偶极矩，能够支持集体光学效应。近期利用色氨酸自发荧光寿命开展的实验，已证明电子能量可沿微管迁移数纳米 [7]。互补的实验与理论研究报告了含有延展色氨酸网络的生物组装体中的紫外超辐射，这表明有序的细胞骨架结构能够产生协同发射 [8–11]。针对微管的研究中，基于有效非厄米哈密顿量的分析预测，辐射耦合至电磁场会产生超辐射与亚辐射激子本征态 [12–17]。这些观察结果引出了具有生物学意义的时间分辨问题：在皮秒至纳秒时间尺度上，发色团之间的关联如何产生并再分布？这些关联以多快的速度通过辐射输出？结构、尺寸和无序又如何影响内部再分布与发射之间的平衡？

除了这些辐射和光学方面的考量外，已有多项研究将微管视为量子信息通道。Shirmovsky 及其合作者对微管色氨酸链上的单激发迁移进行了建模，并指出激发态的传播速度及相关的纠缠传输可处于轴突传导速度的范围内，这表明色氨酸网络可能介导量子辅助信号传递 [18–20]。关于微管蛋白偶极网络量子弛豫的相关研究，量化了耗散动力学条件下的退相干时间，并探讨了微管中的马尔可夫区间与非马尔可夫区间 [21–23]。其他方法包括波导量子电动力学模型，其中色氨酸和周围水分子充当与微管导模耦合的量子比特 [24], , 以及采用纠错表面

* lgassab@uwaterloo.ca
† travis.craddock@uwaterloo.ca

码或有丝分裂纺锤体纠缠，将微管与客观塌缩型机制联系起来 [25, 26]。与这些隧穿和自旋方案不同，本研究聚焦于与电磁场的辐射耦合、规模更大的有序色氨酸组装体，以及对不同初始态的系统比较，以评估微管几何结构和无序如何影响相关性的生成、再分布与损失。

更符合物理实际的开放系统方法，或可为探讨这些问题提供一个自然的框架。因此，我们不采用非厄米有效哈密顿量，而是用马尔可夫林德布拉德主方程描述辐射损失，使动力学在保留通常衰减通道 [27–36]的同时保持完全正性。在这一框架下，我们使用位点特定的位置和偶极取向对色氨酸发色团网络建模，并通过追踪布居再分布以及关联度量指标来考察信息流。具体而言，我们通过监测相干性 L_1 范数 [37, 38]来量化相干激发离域所携带的信息。我们还评估一种基无关相干性度量 [39], , 称为关联相干性 [40], , 它刻画了微管亚结构之间共享了多少此类信息；此外，我们采用对数负性作为纠缠度量 [41, 42]。

关于色素—蛋白质复合物（尤其是芬纳–马修斯–奥尔森（FMO）复合物）的相关开放系统激子输运分析，为我们的色氨酸网络研究结果提供了有益的比较参照：在这两种情况下，相干耦合、耗散和无序之间的相互作用都会影响激发如何离域、相干性衰减得多快，以及环境辅助动力学是否会增强运输。有关FMO及相关光捕获网络中相干性和开放系统运输的代表性实验与理论研究，见文献 [33, 34, 43–45]。

我们的分析探究了代表关联传播不同路径的初始条件。我们考虑与有效生成元的超辐射和亚辐射子空间相对应的制备态、跨位点的完全相干均匀叠加态、完全混合的均匀分布，以及模拟单光子吸收的位点局域注入。随后，我们考察将单个微管蛋白嵌入二聚体和含有一个或多个螺旋的微管片段（在我们的构造中，一个螺旋指由 13 个微管蛋白二聚体组成的一个周向匝；见附录 A）如何改变关联路径，以及扩展至更大的有序组装体，或引入静态能量无序（随机的对角位点能量涨落）和结构无序（分子动力学采样的几何变异），如何调节向外辐射与内部保留。我们采用由集体辐射衰减矩阵构造的时间无关速率，通过保迹林德布拉德主方程演化系统，并将这些动力学与有效非厄米生成元产生的动力学进行比较。我们还利用一种专门的信息回流度量，量化约化子系统的非马尔可夫性程度。这一方法将集体辐射物理与细胞骨架发色团网络中的信息流联系起来，揭示微管在何种结构和动力学条件下能够暂时保留非经典关联。

在神经元中，微管构成长寿命的细胞骨架轨道和调控支架，其性质与相互作用受微管相关蛋白以及微管蛋白密码（同型异构体和翻译后修饰）的影响 [46, 47]。在这一细胞环境中，我们的模型并不假设紫外激发会直接实现神经元计算；相反，模型表明，若发生局域激发事件（例如光子吸收或芳香族残基上的氧化化学反应），由此产生的动力学就会强烈依赖于初态。这种初态依赖性可解释为在快速亮通道（快速输出）与较慢暗通道（瞬态滞留）之间进行状态选择性路由，从而为将位点特异性与可检验的下游微管依赖效应及其时间尺度联系起来提供了一种具体途径。

本文结构安排如下。第 II 节介绍模型与方法；第 III 节展示结果；第 IV节讨论研究发现并总结本研究的意义。

II. 模型与方法

为描述辐射耦合偶极子的动力学，我们首先采用非厄米有效哈密顿量形式作为出发点：

$$H_{\mathrm{eff}} = H_0 + \Delta - \frac{i}{2}G. \tag{1}$$

该方法近年来已被广泛采用 [11, 12] ，因为它同时涵盖相干相互作用和辐射衰减。这里， H_0 表示格点激发能，

$$H_0 = \sum_{n=0}^{N-1} \hbar\omega_0 |n\rangle\langle n|, \qquad \omega_0 = \frac{2\pi c}{\lambda_0}, \qquad \lambda_0 = 280\,\mathrm{nm}. \tag{2}$$

我们选择 $\lambda_0 = 280\,\mathrm{nm}$，以匹配富含色氨酸的蛋白质所用的主导近紫外吸收/激发带（A_{280}），从而使 $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ 对应于与色氨酸跃迁相关的辐射波长尺度。而 Δ 和 G 表示相干

偶极-偶极耦合和辐射衰减矩阵：

$$\Delta = \sum_{n \neq m} \Delta_{nm} |n\rangle\langle m|, \tag{3}$$

$$G = \sum_{n} \gamma |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq m} G_{nm} |n\rangle\langle m|. \tag{4}$$

对角化 H_{eff} 得到复本征值：

$$E_j = \mathcal{E}_j - \frac{i}{2}\Gamma_j, \tag{5}$$

其中$\mathcal{E}j$ 为模式能量， Γ_j 为其辐射衰减率。超辐射态和亚辐射态分别对应于 Γ_j较高和较低的模式。

尽管该方法颇具启发性，但它无法保持密度算符的迹，即一旦纳入向基态的辐射衰减，便不能保证Tr $\rho(t) = 1$，因此不足以在存在退相干的情况下对开放量子动力学给出自洽描述。因此，我们从上述框架中提取 Δ_{nm} 和 G_{nm}，并改用林德布拉德主方程进行描述。

A. 哈密顿量与偶极耦合项

林德布拉德框架中所用的完整系统哈密顿量保留了相同的相干相互作用结构，并在位点基中用自旋1/2激发产生算符和激发湮灭算符表示：

$$H = H_0 + \Delta, \tag{6}$$

$$H_0 = \sum_{n=0}^{N-1} \hbar\omega_0 \, \sigma_n^+ \sigma_n^-, \tag{7}$$

$$\Delta = \sum_{n \neq m} \Delta_{nm} \left(\sigma_n^+ \sigma_m^- + \sigma_m^+ \sigma_n^- \right). \tag{8}$$

此处， σ_n^+和 σ_n^-是位点 n 在二能级（单激发）表象中的激发产生算符和湮灭算符。偶极子 n 与 m 之间的相互作用强度 Δ_{nm} 由下式给出：

$$\begin{aligned} \Delta_{nm} = \frac{3\gamma}{4} \Bigg[& \left(-\frac{\cos\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}} + \frac{\sin\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^2} + \frac{\cos\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^3} \right) \hat{\mu}_n \cdot \hat{\mu}_m \\ & - \left(-\frac{\cos\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}} + \frac{3\sin\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^2} + \frac{3\cos\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^3} \right) (\hat{\mu}_n \cdot \hat{r}_{nm})(\hat{\mu}_m \cdot \hat{r}_{nm}) \Bigg], \end{aligned} \tag{9}$$

其中， $\hat{}\mu_n$ 是位点 n 的跃迁偶极矩， $\hat{}r_{nm}$ 是从 n 指向 m 的单位向量， $r_{nm} = |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|$ 是偶极子之间的中心间距，且 $\alpha_{nm} = k_0 r_{nm}$ 满足 $k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}$。

B. 衰减矩阵与林德布拉德形式

集体辐射衰减矩阵 G的计算方法类似：

$$\begin{aligned} G_{nm} = \frac{3\gamma}{2} \Bigg[& \left(\frac{\sin\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}} + \frac{\cos\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^2} - \frac{\sin\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^3} \right) \hat{\mu}_n \cdot \hat{\mu}_m \\ & - \left(\frac{\sin\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}} + \frac{3\cos\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^2} - \frac{3\sin\alpha_{nm}}{\alpha_{nm}^3} \right) (\hat{\mu}_n \cdot \hat{r}_{nm})(\hat{\mu}_m \cdot \hat{r}_{nm}) \Bigg]. \end{aligned} \tag{10}$$

随后使用林德布拉德主方程描述开放量子系统动力学：

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[H, \rho(t)] + \sum_j \left(L_j \rho(t) L_j^\dagger - \frac{1}{2}\{L_j^\dagger L_j, \rho(t)\} \right), \tag{11}$$

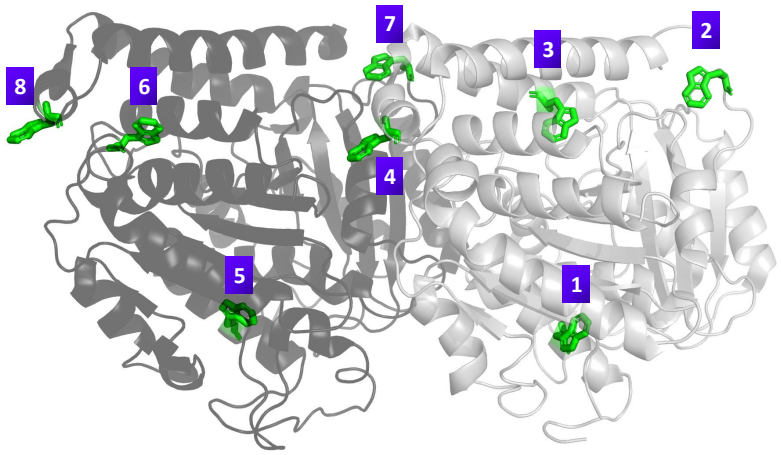

图1. 蛋白质数据库 (PDB) 条目 1JFF 中微管蛋白二聚体的结构，使用 PyMOL（分子可视化软件）渲染[49]，，并突出显示八个色氨酸残基的位置。图中 α-微管蛋白链以浅灰色显示，β-微管蛋白链以深灰色显示，色氨酸残基则以绿色显示。紫色标注的数字对应研究中分析的特定色氨酸残基：Trp1 (21)、Trp2 (α 346)、Trp3 (α 388)、Trp4 (α 407)、Trp5 ()、Trp6 ()、Trp7 ()、Trp8 ()、Trp (β 21)、Trp (β 103)、Trp (β 346) 和 Trp (β 407)。

其中，$\rho(t)$ 是系统密度矩阵，L_j 是描述辐射损耗的坍缩（跳跃）算符；“坍缩”一词反映了量子轨迹图像，在该图像中，应用 L_j 对应一个发射事件，并会有条件地更新系统状态。

为定义 L_j，我们对衰减矩阵进行对角化：

$$G = V\Lambda V^{\dagger}, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\gamma_1, \ldots, \gamma_N), \tag{12}$$

其中 V 包含 G的特征向量 $v^{(j)}$ 。随后构造坍缩算符：

$$L_j = \sqrt{\gamma_j} \sum_{n=0}^{N-1} v_n^{(j)} \sigma_n^{-}. \tag{13}$$

这种基于林德布拉德的处理方法在纳入与有效非厄米模型相同的偶极介导相互作用的同时，保证了迹保持和一致的热力学行为。实际操作中，我们通过加入一个显式的基态（汇） $|0\rangle$ 以及将布居从激子流形转移至 $|0\rangle$的辐射跃迁算符来确保迹保持；因此，发射会降低激发态布居，但不会使扩展态空间中的总概率减少。转向这种形式化方法后，便能更准确、全面地模拟辐射相互作用系统中的量子动力学。

III. 结果

本节报告嵌入微管蛋白环境中的八个色氨酸发色团网络的激发动力学（见图 1）。演化过程通过林德布拉德主方程建模，该方程由包含辐射损耗的有效非厄米生成元构建，并采用结构数据中的位点特异性位置和偶极取向（见附录 A）。模拟在 QuTiP [48]中进行。

我们考虑五种初始制备态，以探究信息流的不同路径：(i) H_{eff}的超辐射本征态；(ii) H_{eff}的亚辐射本征态；(iii) 在各位点间具有均匀相位的最大相干单激发；(iv) 各位点上的最大混合单激发；以及 (v) 局域于单个位点的激发。对于单二聚体八位点网络，本文报告的 Lindblad 模拟涵盖从皮秒到数十纳秒的时间范围（例如，图 2中的 0–5 ns、图 3中的 0–80 ns，以及图 4–5中的 0–15 ns），具体范围由各图的时间轴决定。我们报告各位点的布居，并同时给出量子关联度量，包括 L_1相干性范数、发色团之间的两两相干性，以及作为纠缠见证的对数负性。当我们

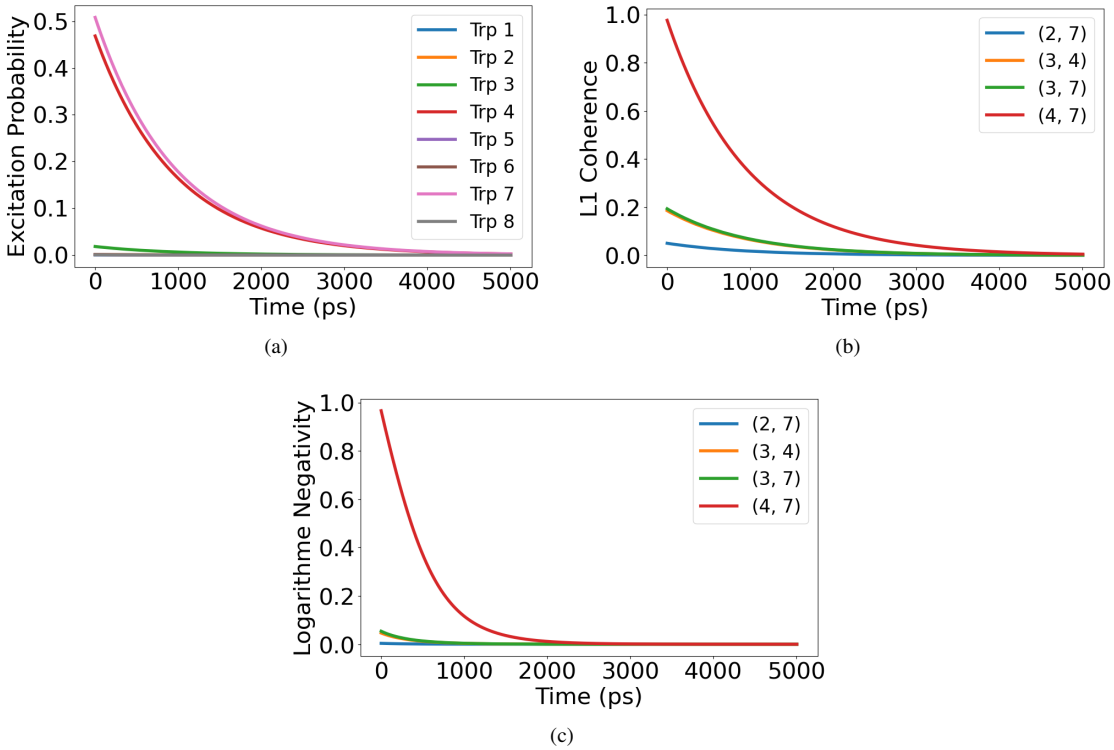

图 2. 对应于非厄米哈密顿量超辐射本征态的初始态的激发动力学。(a) 显示所有色氨酸位点上的激发布居迅速衰减，这是强辐射耦合的典型特征。(b) 展示了四对相干性最强的发色团对的 L_1 范数所反映的相干性迅速丧失。(c) 给出了对数负性；其短暂达到峰值后便消失，表明瞬态纠缠随激发一同耗散。发色团对 (i, j) 表示图 1中定义的色氨酸位点索引（标签）。

所有面板中的时间均以皮秒（ps）为单位 .

指一对发色团 (i, j)，这些索引标记了图 i 和 j 中定义的色氨酸位点编号 Trp1。这些量的定义和计算细节见附录 C。

在整个结果部分，我们追踪关联如何在网络中生成、传递和耗散，以及制备方式和几何结构如何影响非经典信息流的方向性与持续性。

A. 超辐射本征态下的动力学

当系统初始化于非厄米哈密顿量的超辐射本征态（对应辐射衰减率最高的模式）时，激发会经历快速的集体耗散。如图2a所示，各位点布居几乎同步衰减，反映出系统与辐射场之间存在强集体耦合。在此机制下，信息流的主要方向是向外：能量和关联被高效地转移至环境，而非在网络内部重新分配。

关联的演化如图2b所示，其中 L_1 关联性最强的四对发色团的相干性范数在最初 $\sim 10^3$ ps（约 1 ns）内急剧下降，并在图示的 0–5 ns 时间范围（0–5000 ps）内基本消失。位点间关联所承载的相干性与激发一同辐射出去，这表明信息流主要由快速泄漏主导，而非内部交换。密度矩阵非对角项具有纳秒尺度的寿命，这说明发射的集体增强是以无法保留局域或成对关联为代价的。

图2c 显示了相应的对数负性。随着激发逐渐离域，纠缠在早期短暂出现，但随着系统通过辐射通道弛豫，纠缠很快消失。这种瞬态纠缠标志着关联交换短暂激增，随后信息便流失到环境中。总体而言，超辐射本征态表现为量子信息的快速输出通道，最大限度地增强集体发射，却将非经典关联的内部保留降至最低。

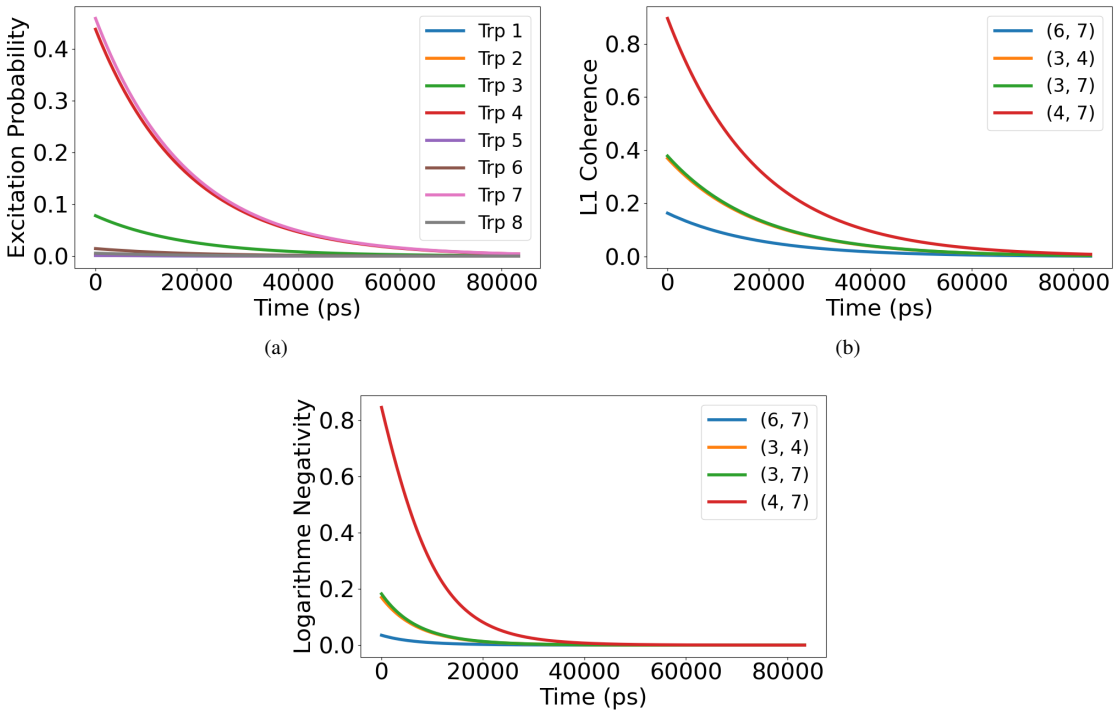

图3。对应于非厄米哈密顿量最亚辐射本征态的初始态的激发动力学。（a）显示位点分辨激发布居，其衰减非常缓慢，表明辐射损失受到抑制。（b）展示了四个相干性最高的发色团对的 L_1 相干性范数，在整个演化过程中始终保持较高水平。（c）给出了这些发色团对之间的对数负性，显示出随时间持续且稳健的双体纠缠。发色团对 （i, j）表示图1中定义的色氨酸位点索引（标签）。所有面板中的时间均以皮秒（ps）为单位。

B. 亚辐射本征态的动力学

与超辐射制备相比，将系统初始化为非厄米哈密顿量的最亚辐射本征态，会使激发释放得慢得多。如图3a所示，布居在网络中保留数十纳秒（0–80 ns，即图示窗口内为 0–8×10^4 ps），这表明辐射损失受到强烈抑制。在这种情况下，信息流的主要方向是向内而非向外，激发和关联会在发色团之间循环，之后才会有任何信息泄漏到环境中。

关联动力学遵循相同的模式。在图3b中， L_1 四个关联性最强的发色团对的范数在所示的完整0–80纳秒时间窗口内始终保持较高水平，表明即使在弱衰减条件下，密度矩阵中的非对角项仍然存在。这种持续性反映了网络中相位与振幅信息的持续内部交换。

图 3c 展示了相同配对的对数负性。纠缠保持稳定，仅逐渐减弱，并呈现清晰的振荡结构，这与受保护免遭辐射的子空间内关联反复再分布的情况一致。综合来看，这些趋势表明亚辐射本征态是量子信息的内部保留通道，其中的布居、相干性和纠缠得以保存，并在网络内循环流转，而非迅速传递到环境中。

C. 均匀共享的初始激发

为了探究初始激发的空间分布如何影响关联动力学和信息流，我们比较两种极限情况：完全相干离域态和完全非相干混合态；两者都均匀涉及全部八个色氨酸发色团。

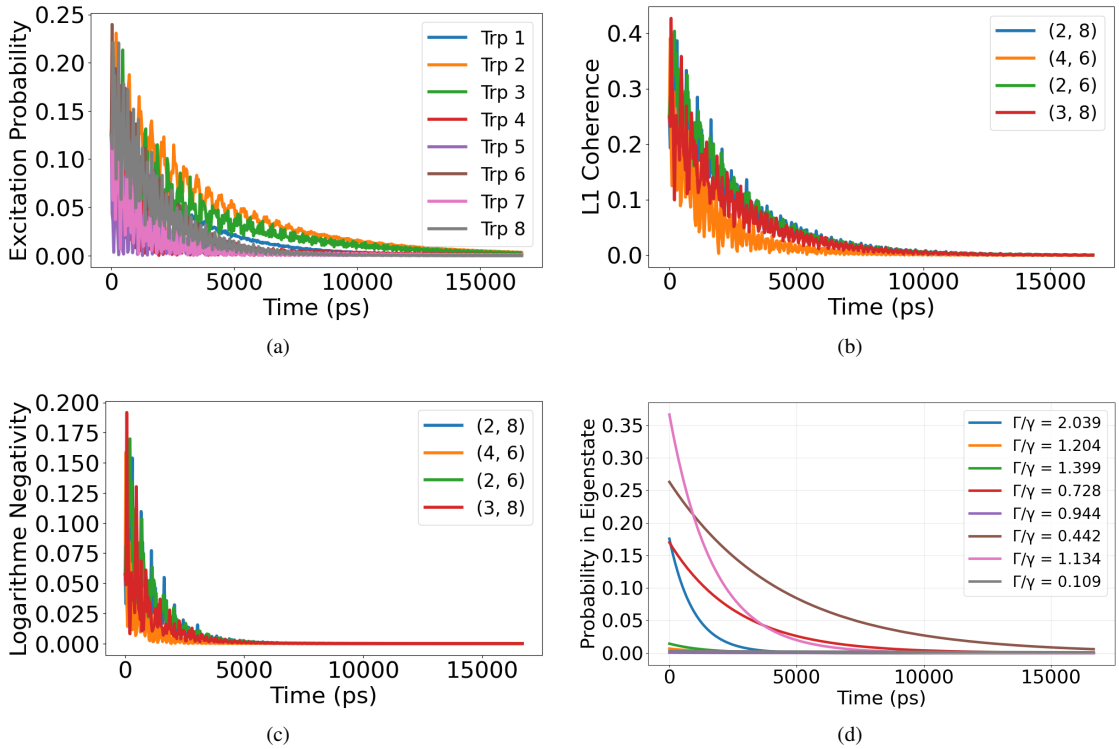

图4. 跨越全部八个色氨酸位点离域化的完全相干初态的激发动力学。(a) 位点分辨激发布居随时间的变化。(b) L_1 所选发色团对的相干性范数。(c) 显示纠缠动力学的对数负性。(d) 投影到有效非厄米哈密顿量 H_{eff}的本征模上，并按其集体辐射速率 Γ_j 相对于单个位点速率 γ 的大小进行分类（超辐射/亮态： $\Gamma_j/\gamma > 1$；亚辐射/暗态： $\Gamma_j/\gamma < 1$）。当集体辐射速率 $\Gamma_j/\gamma < 1$ 对应的模态总投影权重超过集体辐射速率 $\Gamma_j/\gamma > 1$对应的模态总投影权重时，即判定发生亮态到暗态交叉。对 (i, j) 表示图 1中定义的色氨酸位点索引（标签）。所有面板中的时间均以皮秒（ps）为单位。

1. 完全相干初态

我们首先考虑一种对称的完全相干初态，其中激发在所有位点上均匀离域化，

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{j=1}^{8} |j\rangle, \tag{14}$$

其中 $|j\rangle$ 表示局域在第 j个发色团上的激发。

图 4所示的动力学揭示，关联以位点间振荡的信息流形式在网络中传播。图 4a中，布居交换呈现出清晰的干涉图样，而非简单的指数衰减，这表明相干离域通过相消干涉使系统得以部分抵御辐射衰减。

图 4b中的关联度量表明， L_1 范数在所选发色团对中，在图示的整个 0–15 ns 时间窗口（0–15000 ps）内均保持较高水平，证实即使总激发量减少，内部信息交换仍在持续。图 4c 通过对数负性展示的纠缠在同一 0–15 ns 时间窗口内迅速上升，随后缓慢衰减，表明多个发色团对之间持续存在量子信息共享。

投影到非厄米哈密顿量本征态上的布居（图 4d）表明，尽管超辐射分量和亚辐射分量在初始时均有布居，但动力学会自然地将布居导向亚辐射子空间。这种逐渐的自我选择会将信息流重新分配至保留关联性的子空间，在那里，相干性和纠缠在辐射损失下仍受到保护。

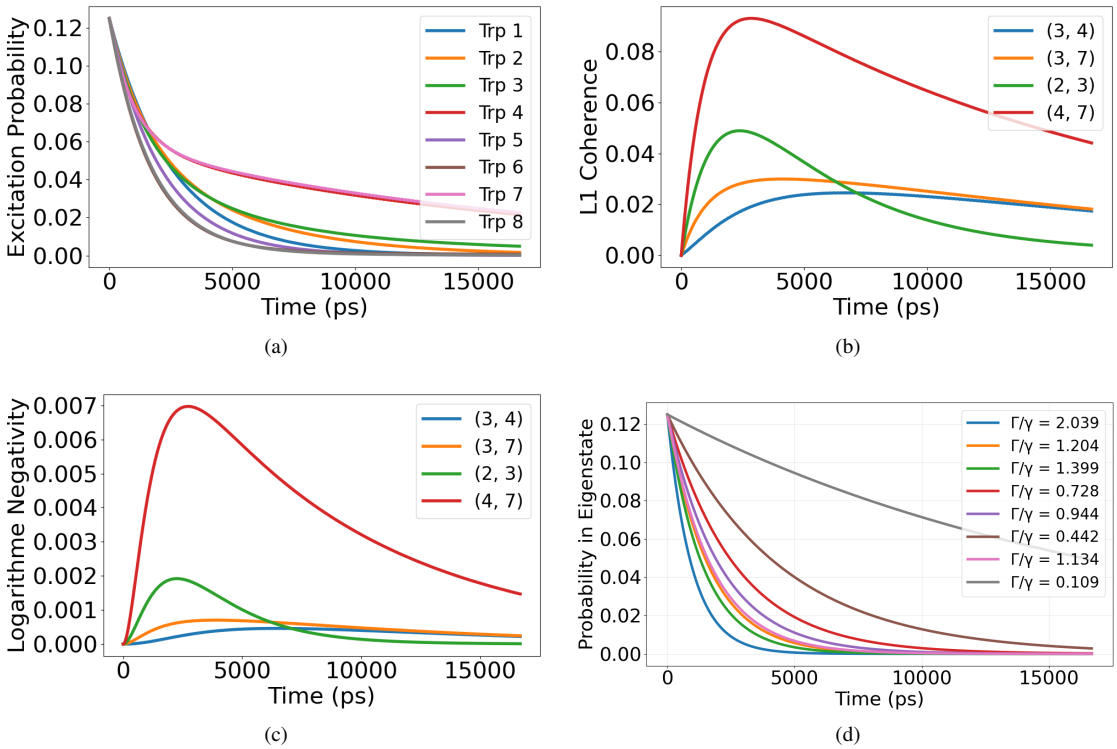

图5. 均匀分布于全部八个色氨酸位点的完全非相干混合态的激发动力学。(a) 位点分辨的激发态布居。(b) L_1 选定发色团对的相干性范数。(c) 反映纠缠缺失的对数负性。(d) 在非厄米哈密顿量本征态上的投影：绘制的权重表示布居与本征模的重叠程度 j，其 H_{eff}各自具有集体辐射速率 Γ_j；具有 $\Gamma_j/\gamma > 1$ 的模式为超辐射（亮态），具有 $\Gamma_j/\gamma < 1$ 的模式为亚辐射（暗态）。对于完全混合的初始条件，投影广泛分布，不会选择性地指向任一扇区，因此亮态和暗态通道的衰减实际上没有偏向。对(i, j) 表示图1中定义的色氨酸位点索引（标签）。所有面板中的时间均以皮秒（ps）为单位。

2. 完全非相干混合态

作为对照极限，我们考虑一个最大混合初态，其中激发在所有位点上均匀分布，但不具有初始相位关联，

$$\rho(0) = \frac{1}{8}\sum_{j=1}^{8} |j\rangle\langle j|. \tag{15}$$

图 5所示的相应动力学表明，初始相干性的缺失会阻止任何内部信息循环。图 5a显示，所有位点的布居均单调且几乎均匀地衰减，没有干涉介导再分布的迹象。图 L_1 中的范数 5b 接近于零，证实演化过程中没有产生新的相干关联。同样，图 5c中的对数负性也微乎其微，表明缺乏相干相位关系时不会自发产生纠缠。

图 5d 中的本征态布居投影显示，超辐射分量和亚辐射分量初始时均有布居，但缺乏相位相干性意味着动力学不会优先将激发引导至亚辐射流形。因此，信息流主要向外传入环境，导致布居迅速流失，内部关联消失。这表明，相干性是持续关联传输并在微管网络内保留量子信息的先决条件。

D. 位点局域化初始激发

为反映生物学上合理的条件，我们考察系统分别以单激发初始态制备、且激发依次局域化于八个色氨酸位点之一时的动力学。这模拟了自然事件：光子被一个发色团吸收，

从而形成位点特异性的初始态；或者在氧化应激条件下，活性氧在芳香族残基上产生局域化的电子激发 [9]。

图 6（a 至 h）展示了全部八种制备态的布居数轨迹。（图 6 的时间轴涵盖与单二聚体模拟相同的 ps–ns 时间范围，可直接比较不同位点较快与较慢的泄漏。）时间演化行为强烈依赖于注入位点。在 Trp4 或 Trp7 制备会显著减缓布居数衰减，而在 Trp1 或 Trp5 制备则会更快弛豫。这种位点依赖性揭示了它们与辐射通道之间的耦合差异。在非厄米谱的亚辐射子空间中重叠较大的局域化态，能在内部更长时间地保留布居；而与超辐射子空间对齐的态则会迅速将激发输运出去。

就信息流而言，局域化注入设定了关联传播的初始方向。Trp4 和 Trp7 等位点不仅会减缓布居泄漏，还会在能量损失至环境之前，促进相位与振幅信息的内部再分布。相比之下，在 Trp1 或 Trp5 注入会促使信息向外流动，使关联几乎没有时间在网络内部传播。因此，将每种制备态分解为辐射组分与受保护组分，就相当于一个位点选择性路由器，能够引导能量和关联沿不同路径传输。

这些观察表明，空间位置决定了进入长寿命、保持关联的子空间的通路。因此，位点特异性激发能够选择量子寿命，并调节内部关联传输与外部发射之间的平衡；这一原理或许与自然光捕获以及生物启发型激子平台中的靶向控制策略相关。更具体地说，注入残基决定了其与亮态或暗态辐射扇区的重叠程度，从而使动力学偏向快速输出或瞬态滞留；在体内，这种偏向可能受到氧化热点、局部结合环境和微管蛋白状态调控的影响 [7, 47, 50–52]。

E. 从单个微管蛋白到螺旋的相干性传递

在上一小节中，我们分析了单个微管蛋白二聚体内的动力学。这里，我们保持焦点二聚体和初始制备态不变，但逐步改变其环境：先将其置于双微管蛋白系统中，再置于包含一个和两个螺旋的微管片段中。在我们的构造中，“螺旋”指微管晶格绕圆柱体的一周，即由 13 个二聚体构成的一个周向匝；通过沿纵轴堆叠连续的匝，形成包含更多螺旋的微管片段（见图 7）。对于螺旋计算（系统规模大于单个二聚体），时间演化是在加拿大数字研究联盟提供的国家级高性能计算系统上完成的。对于每种嵌入，我们追踪焦点微管蛋白内最大的四个成对 L_1 相干性，并以位点索引(i, j)标记，以解析嵌入如何重定向关联路径并改变信息流。

嵌入改变了关联内部循环与向外损失之间的平衡。如图 8所示，最大相干位点对的身份会随嵌入而变化，这表明，将系统向更大的环境开放会把关联重新分配到额外的通道中。随着环境扩大（单个 $\rightarrow$ 二聚体 $\rightarrow$ 螺旋），焦点微管蛋白内部的相干性振幅总体上会减小，并表现出更明显的振荡，这反映了其与周围自由度之间的交换。小型系统仍然强烈依赖初始制备，而较大的嵌入往往会压缩这些差异，使不同制备态之间产生更加相似的振荡模式。

使用互信息重复分析时，我们观察到相同的定性趋势（见附录 D，图13）。附录D中的图 14进一步展示了不同微管蛋白之间的关联共享证据，其中每个初始态都存在微管蛋白间相干性关联。

F. 两个微管蛋白子系统上的时间分辨非马尔可夫回流（单螺旋）

在第 IIIE节的基础上，我们在那里发现，将单个微管蛋白嵌入更大的结构会重新分配相干性路径；现在，我们考察周围的微管蛋白是否充当结构化储库，能够存储信息并随后将其返回局部子系统。此处，环境指最初制备的微管蛋白周围的其他微管蛋白：二聚体中的配对微管蛋白，以及在螺旋情况下其余的微管蛋白。在体内，微管蛋白嵌入水性溶剂和水合壳中；此类溶剂介导效应未在当前辐射损失模型中明确纳入，将留待未来扩展 [53, 54]。

我们考虑由13个微管蛋白组成的单个螺旋，每个微管蛋白含有八个色氨酸。对于初始制备的微管蛋白T_1的每个邻居 T_k，我们构造双微管蛋白子系统 $X_k = T_1 \cup T_k$，并在单激发流形内研究其动力学，同时对其余11个微管蛋白取迹。我们通过文献 [55]中的迹距离回流来量化记忆效应。令$\{|s\rangle\}$ 表示单个色氨酸上的单激发基态，其索引集合为 $T_1 = \{s_1, \ldots, s_8\}$ 和 $T_k = \{r_1, \ldots, r_8\}$。所有其他微管蛋白均处于全局基态 $|g\rangle$。我们采用覆盖整个微管蛋白的归一化均匀叠加，

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{s \in T_1} |s\rangle, \qquad |01\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_{r \in T_k} |r\rangle,$$

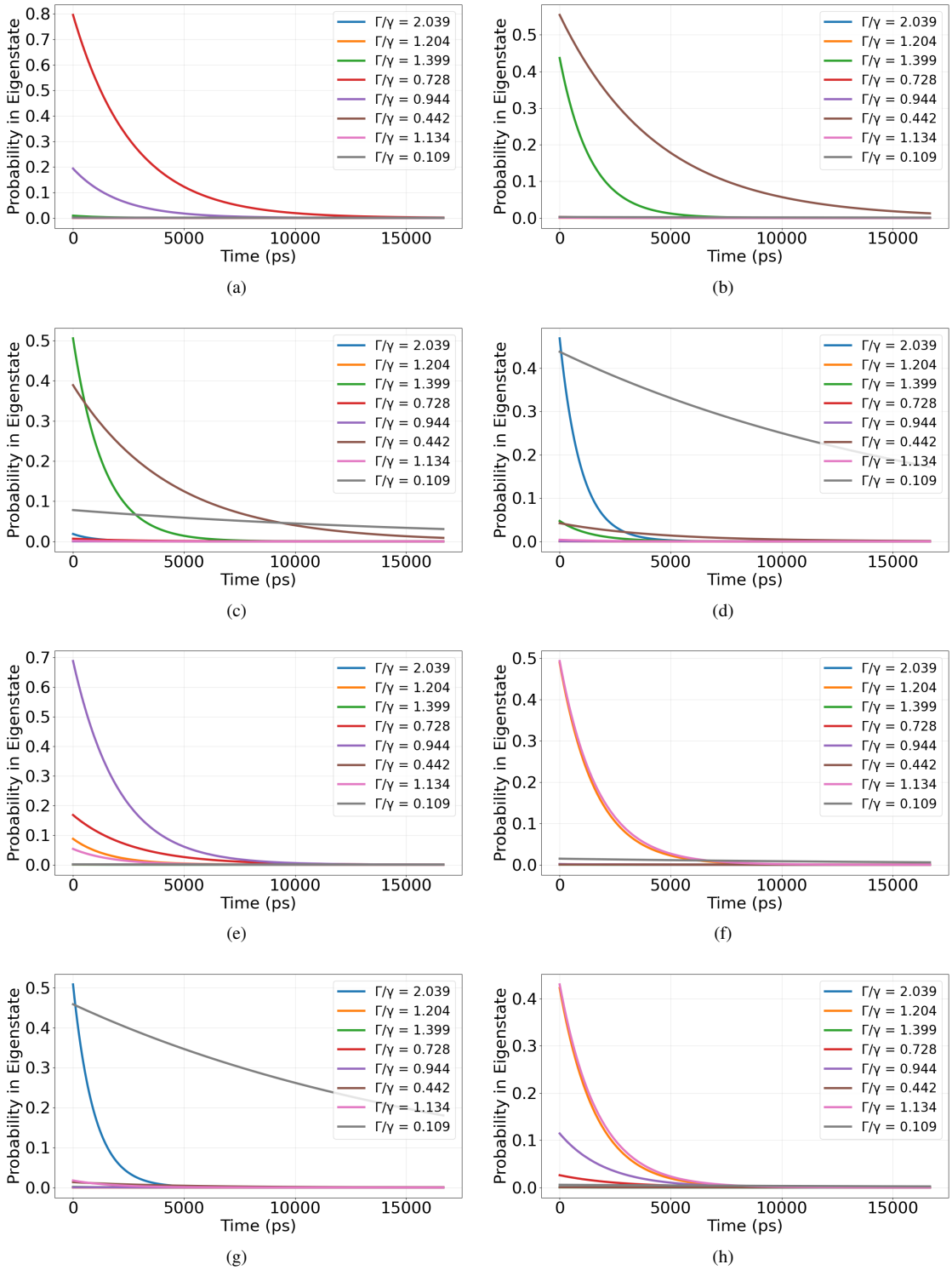

图6. 位点局域初始激发的布居动力学。每个面板显示初始激发局域于特定色氨酸发色团时，激发布居随时间的位点分辨变化：(a) Trp1，(b) Trp2，(c) Trp3，(d) Trp4，(e) Trp5，(f) Trp6，(g) Trp7，(h) Trp8。为理解不同初始位点下衰减/包络的差异，我们还分析了对有效非厄米哈密顿量 H_{eff} 本征模的投影，并根据其集体辐射速率 Γ_j 相对于单位点速率 γ 的大小对其分类（超辐射/亮态： $\Gamma_j/\gamma > 1$；亚辐射/暗态： $\Gamma_j/\gamma < 1$）；当辐射速率为 $\Gamma_j/\gamma < 1$ 的模态中的总投影权重超过辐射速率为 $\Gamma_j/\gamma > 1$ 的模态中的总投影权重时，可识别出亮态到暗态交叉。所有面板中的时间单位均为皮秒（ps）。

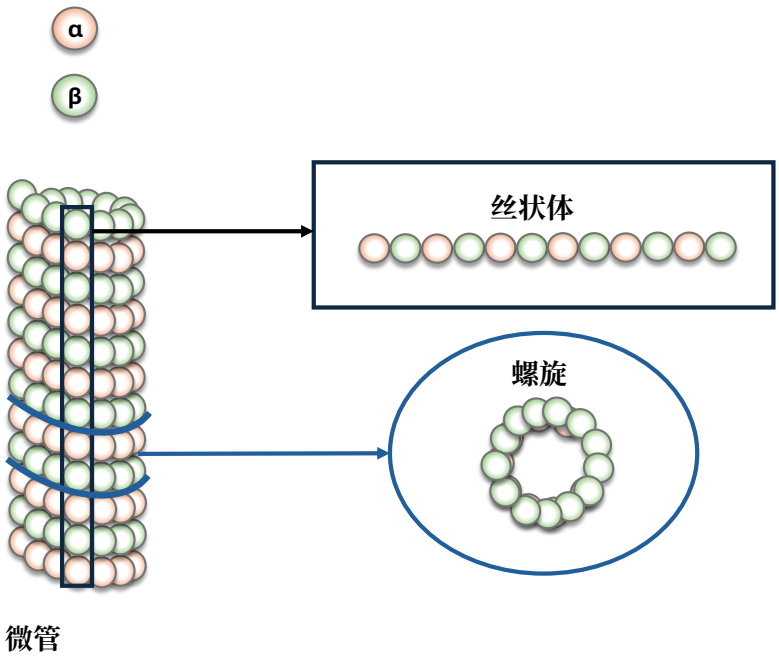

图7. 示意图定义了本研究所用的子系统划分。丝状体表示沿微管纵轴排列、与原丝对齐的链，由 $\alpha\beta$ 个微管蛋白二聚体组成（黑色矩形）。螺旋表示一个周向匝（顶部／横截面视图），由环绕微管圆柱体的 13 $\alpha\beta$ 个二聚体组成（蓝色圆环）。具有 S 个螺旋的微管片段对应于沿纵轴堆叠 S 个这样的周向匝。橙色和绿色分别表示 α 型和 β 型微管蛋白（非按比例绘制）。

它们表示离域化在 T_1 或 T_k 的八个色氨酸上的单激发，并且在单激发空间中彼此正交。两个正交对均局限于 $\mathrm{span}(\{|g\rangle\}\cup T_1\cup T_k)$，并在相同的李维尔算符作用下传播：一个布居对比对 $|10\rangle$ 与 $|01\rangle$，以及一个相位对比对 $(|10\rangle \pm |01\rangle)/\sqrt{2}$。演化过程中，离开 X_k 并进入螺旋其余部分的激发会被迹掉。非马尔可夫信息回流由迹距离的复现表明

$$D_k(t) = \tfrac{1}{2}\left\|\rho^{(1)}_{X_k}(t) - \rho^{(2)}_{X_k}(t)\right\|_1,$$

它量化了以下两个约化态之间的操作可区分性 X_k （ D_k 越大，最优测量就越容易将二者区分开来）。对于完全正可分（马尔可夫）约化动力学， D_k（t）是收缩的，不会增加；因此，出现 D_k（t）>0的时间区间表明，信息从被迹掉的微管蛋白回流至子系统 [55, 56]。对于 X_k，相应的标量非马尔可夫性定义为正向总变差

$$\mathcal{N}(k) = \int_{\dot{D}_k(t)>0} \dot{D}_k(t)\,\mathrm{d}t,$$

两个初始态对的结果均已报告。

如图9所示， D_k（t）对所有测试过的邻居都呈现复苏，因此在$\mathcal{N}$（k）范围 $k=2$、.....、13内均非零。特定邻居（尤其是 X_2、 X_9、 X_{13}）的响应更强，这与螺旋中依赖几何结构的耦合相符。相位对比初态通常比布居对比对产生更强的信息回流，表明相干性和相位复苏起主导作用，而非单纯的布居交换。

信息回流与神经元微管相关，因为它表明关联并未不可逆地丢失到周围的微管蛋白中；二聚体或螺旋可以暂时储存布居和相干性，并将其返还给局部子系统。在神经元内部的有序束中，这种结构化储库效应可能产生介观时间关联（即由于周围微管网络暂时发生信息回流而在约化子系统动力学中产生的中间时间尺度记忆效应），原则上可通过缓冲和同步波动来影响细胞内信号传导和激子能量迁移。一个可检验的推论是，回流度量 $\mathcal{N}(k)$ 应随局部几何结构、能量失谐、温度或离子条件以及初始相位结构而系统性变化。

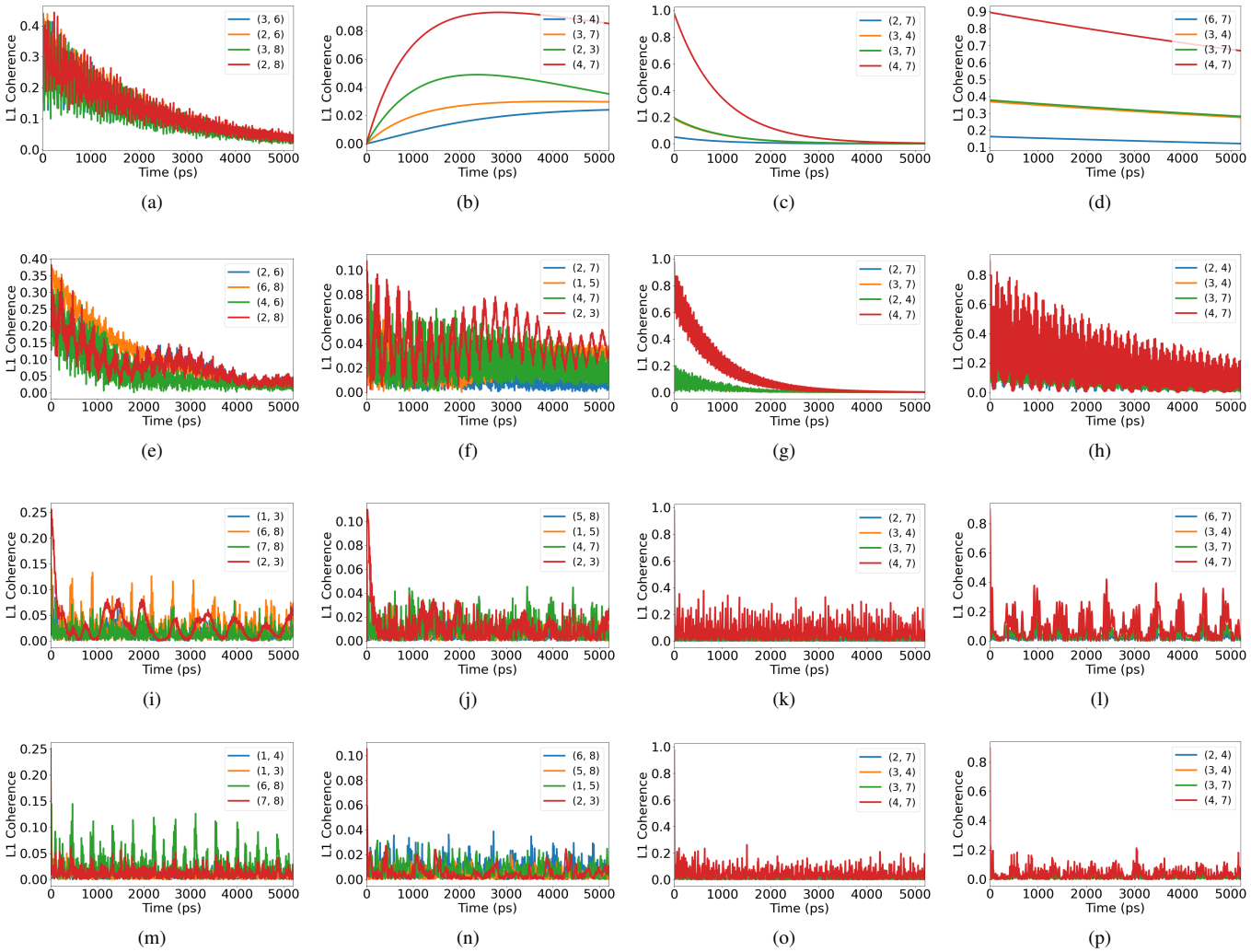

图8. 嵌入与初始态中最大的四个成对 L_1 相干性。各列（所有行）：从左至右依次为最大相干、最大混合、超辐射和亚辐射初始态。各行：(a–d) 单个微管蛋白；(e–h) 双微管蛋白系统；(i–l) 一个螺旋；(m–p) 两个螺旋。每个面板显示所跟踪微管蛋白中相干性最大的四个位点对。位点对(i, j) 表示图1中定义的色氨酸位点索引（标签）。所有面板的时间均以皮秒（ps）为单位。

G. 向更大组装体的过渡

前几节考察了将单个微管蛋白嵌入二聚体或螺旋后，相干性如何重新分布，以及如何产生信息回流。现在，我们将分析扩展到更大的微管组装体，包括排列成细丝的结构，以及最多包含 100 个螺旋的理想螺旋结构，以便将局部行为与系统层面的趋势联系起来。对于这些尺寸，直接使用林德布拉德主方程进行模拟并不可行，因此我们采用方程（1）中的有效非厄米哈密顿量来求得本征模及其辐射衰减率。本节分两步展开。首先，我们量化有序和无序结构中超辐射与亚辐射本征态的成对关联相干性。其次，我们提取辐射寿命，并分析超辐射加速和亚辐射保护如何随尺寸变化，以及它们如何受到无序的影响。

1. 微管结构中的关联相干性

我们计算了超辐射和亚辐射本征态中色氨酸位点之间的成对关联相干性（基于 L_1 范数）。我们针对 100 种螺旋微管构型对其进行评估，这些构型由重复的 1JFF 结构单元或从分子动力学模拟中随机选取的微管蛋白二聚体构建而成（见附录 A）。

对于较大的微管片段　　中，关联相干性是在两个复合子系统之间评估的（每个子系统

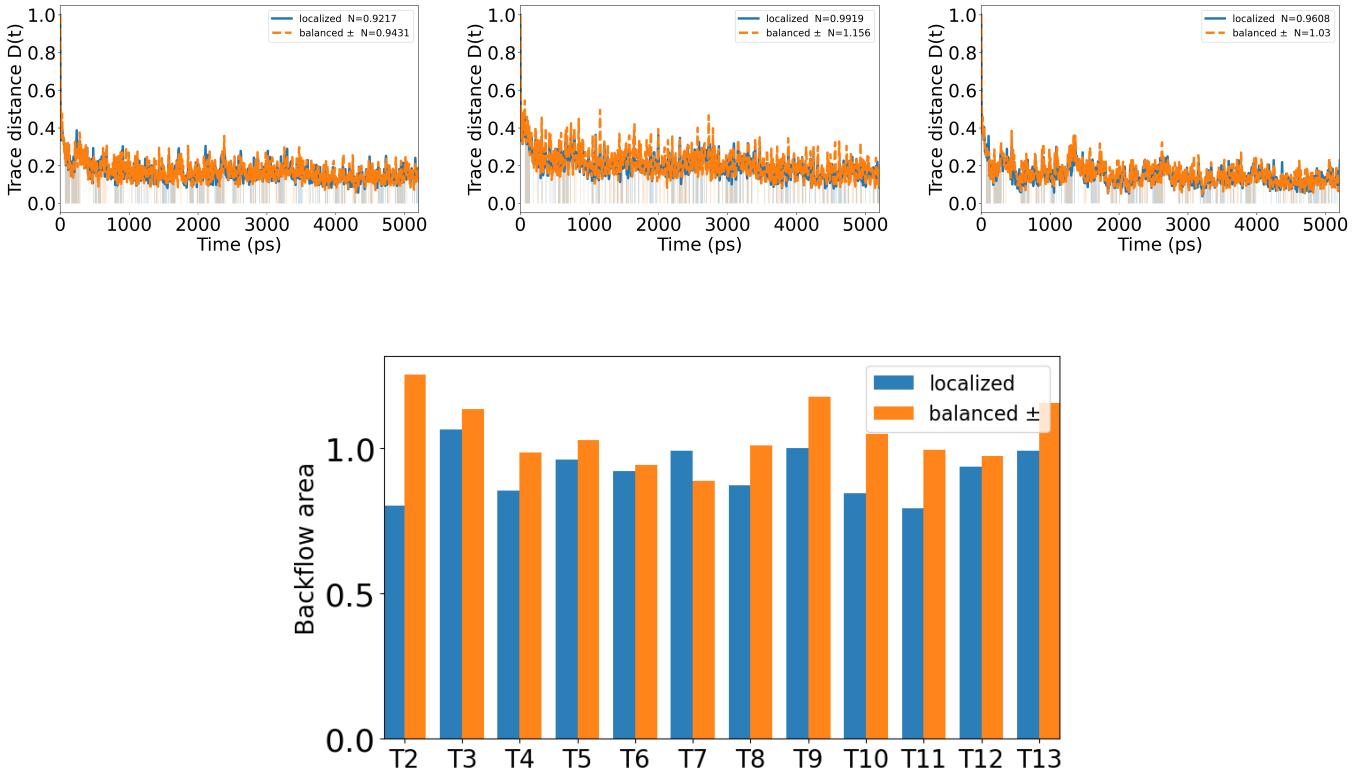

图 9. 单个螺旋中两个微管蛋白子系统的信息回流。上图：$D_k(t)$ 对 $X_2 = (T_1,\ T_2)$、$X_9 = (T_1,\ T_9)$ 和 $X_{13} = (T_1,\ T_{13})$ 的迹距离动力学；实线表示布居对比对 $|10\rangle$ 与 $|01\rangle$；虚线表示相位对比对 $(|10\rangle \pm |01\rangle)/\sqrt{2}$。阴影区间标示 $\dot{D}_k(t) > 0$（信息回流）。所有面板中的时间均以皮秒（ps）为单位。下图：两种制备态下，跨越 $k = 2$、.....、13 的积分回流 $\mathcal{N}(k)$。

由一组色氨酸位点构成），而不是在单个发色团之间。具体而言，我们考察两种几何划分：（i）螺旋间相干性，其中每个螺旋包含13个微管蛋白，因此有104个色氨酸位点；（ii）丝状体间相干性，其中每个丝状体子系统包含100个微管蛋白，因此有800个色氨酸位点。随后，我们计算整个组装体中所有此类子系统对之间的关联相干性，得到图10和11所示的矩阵。我们计算由色氨酸位点集合定义的复合子系统之间的成对关联相干性（基于 L_1 范数），对象为超辐射和亚辐射本征态。

图 10 和 11 展示了对称性和无序对微管系统中相干性的影响。在通过重复 1JFF PDB 结构构建的对称微管中（图 10 ），超辐射态中的相干性广泛分布于整个晶格，表明存在长程离域。相比之下，图 11 表明，引入无序会显著破坏这种相干性；无论是通过从分子动力学模拟中随机采样微管蛋白二聚体引入空间变异（面板 a–d），还是通过在哈密顿量中加入静态对角噪声（面板 e–h），结果均如此。在这两种情况下，超辐射相干都会变得局域化且碎片化，从而证实结构无序和能量无序都会抑制系统中的长程量子相干。

2. 亚辐射态与超辐射态的寿命

为了表征系统的辐射行为，我们根据非厄米有效哈密顿量本征值的虚部计算物理衰减率 Γ_i^{phys}（单位：cm^{-1}）。

相应的辐射寿命 τ_i（单位为秒）通过以下光谱学关系获得：

$$\tau_i = \frac{1}{2\pi c \Gamma_i^{\mathrm{phys}}},$$

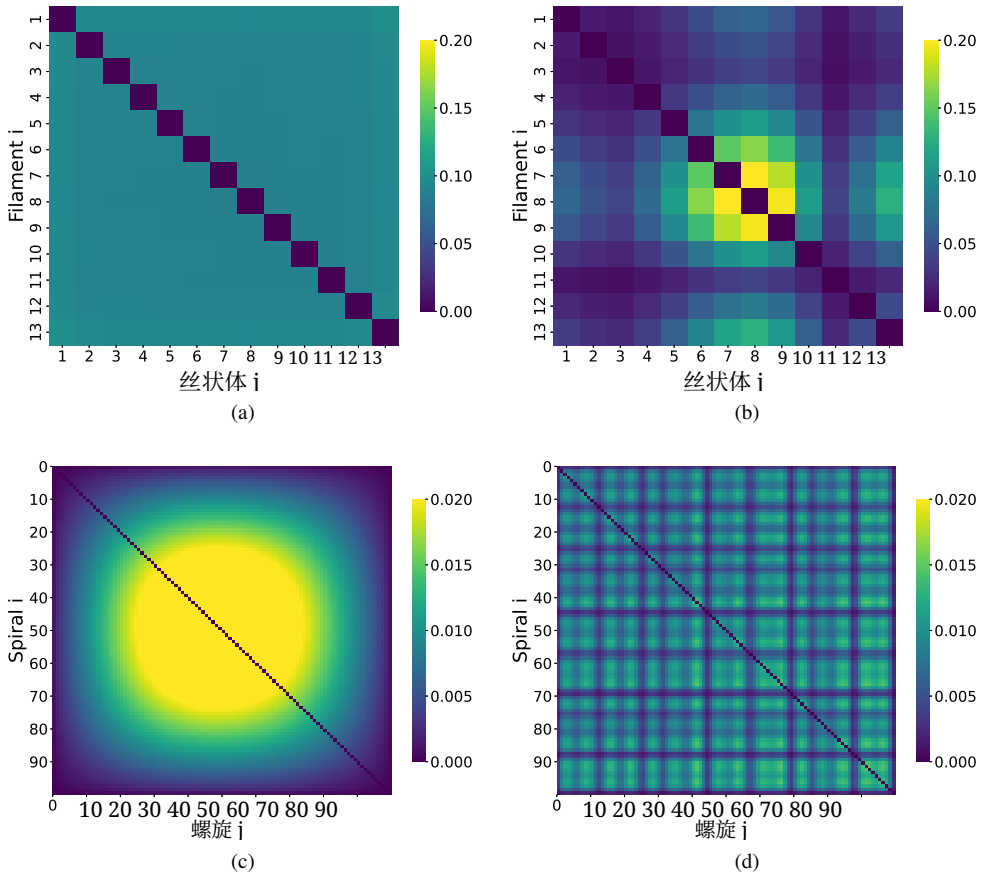

图10. 由对称的 1JFF PDB 结构构建的微管中微管蛋白二聚体之间的关联相干性。所有面板均对应一个含有13 条细丝（原丝）和 100 个螺旋（周向匝）的微管片段；每个螺旋包含 13 个微管蛋白二聚体（见图 7）。(a–b) 分别显示超辐射态和亚辐射态下细丝之间的相干性。(c–d) 显示螺旋之间的相干性。在这种有序构型中，超辐射相干离域化于整个微管，反映了长程量子关联。

其中 $c = 2.99792458 \times 10^{10}$ cm/s 为光速。我们确定：

- $\tau_{\text{分钟}}$：最超辐射态的寿命（对应于最大衰减率 $\Gamma_{\text{最大值}}$），
- τ_{max}：最亚辐射态的寿命（对应于最小衰减率 $\Gamma_{\min}$）

这些寿命可以直接揭示不同结构构型中辐射增强或抑制的程度。

我们强调，本文报告的寿命是在全文采用的马尔可夫辐射损耗模型中定义的。具体而言，Γ_i^{phys} 取自与集体发射相关的有效非厄米生成元本征值的虚部，这对应于与电磁浴之间无记忆的（时间无关的）耦合，因此会为每个集体模式产生指数衰减包络。在第IIIF 节讨论的非马尔可夫行为则源于不同机制：当我们对有限的结构化微管蛋白环境的一部分进行迹运算，并分析子系统上的约化动力学时，就会出现这种行为；即使整体辐射衰减模型是马尔可夫的，子系统仍可能表现出信息回流。因此，在静态无序或结构无序下，本节中的寿命曲线应被理解为量化无序如何在马尔可夫辐射模型中重塑亮暗速率分离（例如，通过降低集体性并使亮分量局域化），而子系统层面的记忆效应仍可能由于结构化嵌入而发生。

我们首先考虑一个由重复的1JFF微管蛋白单元构建的微管。随后，我们通过如下方式修改未微扰哈密顿量中的位点能，将静态无序纳入模型：

$$H_0 \to H_0 + \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon_n(W)|n\rangle\langle n|, \tag{16}$$

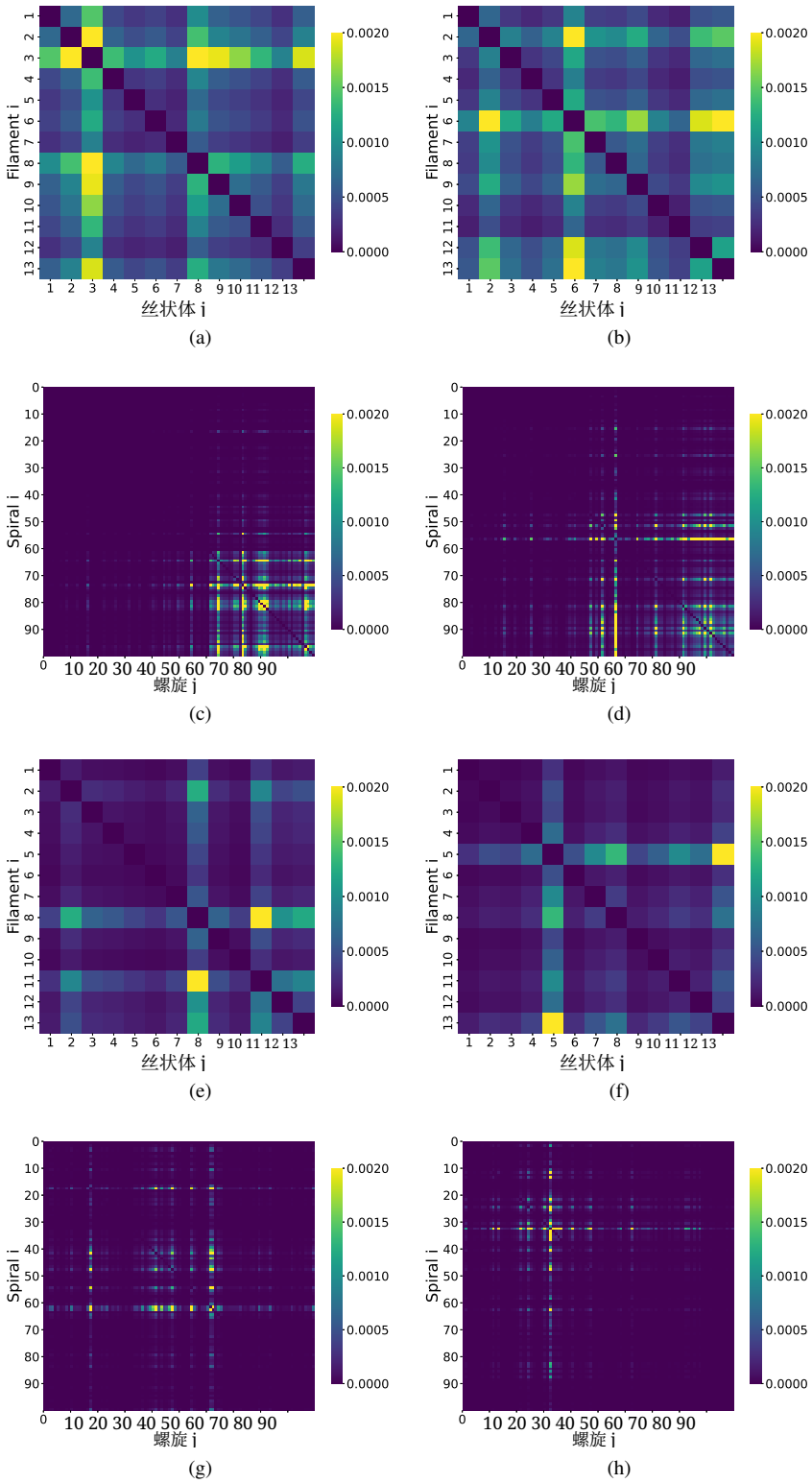

图11. 无序微管中的关联相干性。所有面板均对应一个含有 13 条细丝（原丝）和 100 个螺旋（周向匝）的微管片段；每个螺旋包含 13 个微管蛋白二聚体（见图 7）。(a–d) 对应于由分子动力学轨迹中随机采样的帧构建的结构（偶极几何结构中的结构/空间无序）。(e–h) 展示对称微管（基于1JFF）中的相干性，其中通过在哈密顿量中加入随机对角涨落引入了静态能量无序。在这两种情况下，超辐射态中的相干性都显著降低并变得局域化，这表明空间无序和静态无序都会破坏长程相干，与图 10 中的有序情形形成对比（此处“降低”是指在采用相同关联相干度量时，相较于基于有序1JFF的微管，其相干性降低）。请注意，图10与本图的色标范围不同。

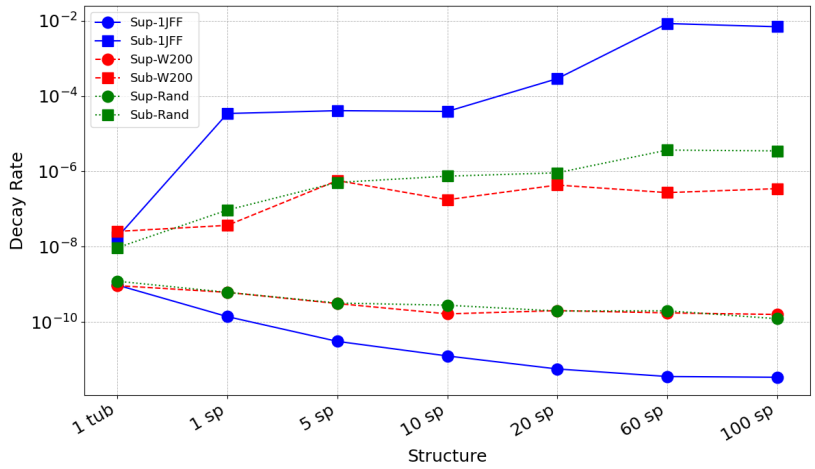

图12. 最超辐射（圆形）和亚辐射（方形）态的辐射寿命随结构尺寸的变化，从单个微管蛋白二聚体到包含100个螺旋（100 sp）的微管片段；在我们的构造中，一个螺旋（sp）表示由13个二聚体组成的一个周向匝。蓝色实线对应于使用PDB 1JFF生成的理想周期结构。红色虚线表示具有强度为 $W = 200\ \mathrm{cm}^{-1}$的静态无序的同一结构。绿色点线对应于由分子动力学模拟获得的微管蛋白单元随机排列构建的结构无序微管。

其中 W 是无　序强度，单位为cm^{-1}，而 $\epsilon_n(W)$是在范围内均匀分布的随机变量　ge

$$\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right].$$

最后，我们通过利用分子动力学数据构建微管来考察结构无序，其中微管蛋白单元的位置是随机的。

如图12所示，在不存在无序的情况下，增大系统尺寸会显著增强超辐射（寿命缩短）和亚辐射（寿命延长）。例如，超辐射寿命显著缩短，而亚辐射寿命可达到毫秒量级。这表明，合作辐射效应会随结构尺寸增大而增强。

然而，引入静态无序或结构无序后，总体趋势依然不变，但最小与最大结构之间的差异会小得多，尤其是对于超辐射态而言。对于这些态，从单个微管蛋白到100个螺旋所带来的辐射加速收益微乎其微，只有微秒量级。亚辐射态则相对更稳健，即使在无序条件下，其寿命仍比超辐射态长数个数量级。

这表明，无序往往会减小辐射寿命之间的差异，而且超辐射态比亚辐射态对缺陷更敏感。

IV. 讨论与结论

我们利用由含辐射损失项且明确纳入位点几何结构的有效非厄米生成元构建的林德布拉德主方程，研究了微管蛋白色氨酸网络中的激发动力学。通过比较五种定义明确的制备态，并追踪位点分辨的布居及量子信息度量，我们展示了制备方式、几何结构和环境规模如何共同决定关联的演变。逐步将单个 $\alpha\beta$-微管蛋白嵌入一对耦合微管蛋白、再嵌入单个螺旋，最终嵌入双螺旋组装体，会重新分配焦点微管蛋白内占主导地位的 L_1 相干性，降低其振幅，并引入与周围微管蛋白之间的振荡性交换。在单个螺旋中，两个微管蛋白子系统表现出非马尔可夫回流，可通过迹距离的复苏检测到；相位对比制备态下的响应更强。通过非厄米本征模分析将系统扩展至大型有序组装体，证实了超辐射输出与亚辐射保留各自发挥互补作用，并揭示了系统对称性和无序的明显敏感性。有序结构能够维持长程关联相干，并扩大亮态与暗态寿命之间的差距；而静态能量与结构无序会使超辐射分量局域化、抑制长程相干并降低寿命对比，同时使亚辐射保护相对保持稳健。

综上，这些结果表明，微管色氨酸网络是一种结构化储库，其中，对称性、空间排布和初始相位决定了量子信息是通过亮通道迅速广播，还是优先存储在暗子空间中 [57, 58]。量子信息工具为这种角色划分提供了一套简洁且具可操作性的语言。 L_1 范数和关联相干性揭示了相干性在何处共享，迹距离则通过

回流量化记忆，而有效生成元的谱宽则在不同尺度上梳理辐射寿命。这种结合动力学与谱学的图景，为讨论生物激子网络中的放大、缓冲和时序提供了一个连贯的框架。

从生物学角度看，我们对初态的比较并不意味着微管必须借助量子关联进行神经处理；相反，它表明，结构化的色氨酸网络能够根据激发的制备方式（局域化还是离域化，以及相对相位的不同）以不同方式引导动力学，从而使演化倾向于快速输出（亮通道）或瞬态滞留（暗子空间）。在细胞中，位点特异性制备的可能来源包括局域吸收事件，以及芳香族残基上的氧化还原/活性氧驱动的化学反应 [50, 51]。如果存在任何下游耦合，最可能也是间接的：它通过改变耗散模式或局部相互作用景观，调节已知的微管功能（运输、微管相关蛋白结合以及依赖微管蛋白编码的调制）[47, 52, 59]。这为未来研究提供了方向：将亮态与暗态通路选择同特定的生化读数及可实验测量的条件联系起来。另一方面，第 IIIF 节报告的迹距离回升表明，约化微管蛋白子系统中存在短时记忆效应，这意味着有限螺旋中的相邻激发事件未必表现为彼此独立的无记忆衰减 [55, 56]。

我们的结果也自然地联系到早期将微管视为量子信息通道的观点。在这些研究中，研究者表明，色氨酸链和偶极网络中的激发迁移与量子弛豫能够支持纠缠传输，并维持具有生物学相关性的相干时间 [18–23]（此处“具有生物学相关性”仅在有限的操作性意义上使用：指布居/相干性在受保护子空间中的保持时间，原则上可能与下游分子自由度的演化时间重叠；后者的演化时间尺度为 ns–ms）。本文从互补的辐射视角出发，进一步表明，即使存在集体发射，结构化色氨酸网络也能暂时储存并再分布关联；其表现更接近广播通道还是短期量子缓冲器，取决于对称性和制备方式。

应区分两个时间尺度。首先，局部色氨酸网络内的相干再分布发生在由偶极耦合决定的 ps–ns 时间尺度上（第 3.1–3.4 节）。其次，在有序组装体中，集体本征模的辐射寿命可延长至远长于此的时间尺度（第 3.7.2 节）；而无序往往会使亮分量局域化，并缩小寿命对比。因此，我们所说的“功能相关性”并非指某种特定的细胞机制，而是提出一个具体的时间尺度匹配标准：亚辐射（暗态）扇区中的布居/相干性保持时间，是否与分子状态变量的时间尺度重叠；这些变量可能对局部激发或静电重组敏感（例如构象微观状态占据、相互作用伙伴的结合/解离动力学，或化学介导的状态变化）。这一表述可为相关实验提供指导，以检验光激发是否会与下游微管相关动力学发生可测量的耦合，以及这种耦合在何种结构条件下发生；这也包括微管相对稳定的神经元环境。

本模型刻画了辐射损失条件下，瞬时单激发态制备后的弛豫过程。在生命系统中，非平衡生化输入（例如 GTP水解伴随的能量释放、氧化还原/活性氧化学或酶活性）可能发挥驱动作用：既可以通过调节位点能/耦合间接驱动，也可以在现象学描述中维持激发态布居处于非平衡状态。在林德布拉德框架内，这类驱动可通过以下方式纳入模型：(i) 通过额外的跃迁算符进行非相干泵浦（例如，$L_n^{\mathrm{pump}} = \sqrt{p_n}\,\sigma_n^+$，泵浦速率为 p_n）；或 (ii) 添加哈密顿量项进行相干驱动（例如，$H_{\mathrm{drive}}(t) = \sum_n \Omega_n(t)(\sigma_n^+ + \sigma_n^-)$）。非相干泵浦能够维持非平衡布居，但通常也会引入额外的退相干，因此未必能延长相干性，除非泵浦选择性地占据（或反复补充）对称性保护的暗态/亚辐射子空间；相干驱动可以维持相位关系，但对应的是另一种物理机制（例如外部光场）。在局域注入事件较为罕见的极限下，驱动动力学通常可近似为对第3.4节中已研究的局域态制备所形成的混合态。这些扩展为进一步评估连续能量通量如何重塑超辐射输出与亚辐射保留之间的平衡提供了明确方向，尤其是在存在无序的情况下。

此外，理论上还有一些明确的后续研究方向。将主方程扩展以纳入非辐射衰减、结构化退相干和显式振电耦合，有助于进一步阐明几何结构与记忆之间的联系。在单激发流形之外，还可以利用随机李维尔方法或时间非局域核研究多体效应和激子-激子相互作用，以评估拥挤条件下回流和亚辐射保护的稳定性。在结构层面，对本征模和相干性路径进行基于图的分析，并结合对现实静态和动态无序的系综平均，可以将微观组织与涌现时间尺度联系起来。最后，以相干长度、通道可区分性和资源转换速率等信息论术语描述动力学，或许有助于在统一的定量语言框架内，将微管网络与其他生物光响应系统进行比较。

总之，主方程动力学补充了静态光谱分析，并揭示几何结构、初态制备和环境规模如何调节基于微管蛋白的网络中量子信息输出与留存之间的平衡。将非厄米本征模结构与量子信息度量相结合，可为生物系统提供一套灵活多用的工具，阐明相干性何时呈离域化、何时受到保护，以及记忆效应何时会重塑信息的局部流动。

作者贡献

概念构思：L.G.、O.P. 和 T.J.A.C.；方法学：L.G.、O.P. 和 T.J.A.C.；形式分析：L.G.；资源提供：T.J.A.C.；数据整理：L.G.；论文撰写——初稿：L.G.；论文撰写——审阅与编辑：L.G.、O.P. 和 T.J.A.C.；可视化：L.G.；监督：T.J.A.C. 和 O.P.；项目管理：T.J.A.C.；经费获取：T.J.A.C.

资金支持

本研究部分得益于加拿大研究讲席计划（CRC-2022- 00204）和滑铁卢大学向 T.J.A.C. 提供的资助。L.G. 感谢滑铁卢大学教务长跨学科博士后学者计划的支持。

数据可用性声明

支持本研究　　研究结果的数据可应合理请求向通讯作者（L.G.）获取　　st.

致谢

在准备本手稿期间，作者使用了人工智能辅助语言工具，以帮助提升文本的清晰度和可读性。所有人工智能辅助生成的内容均经作者审阅和编辑，作者对最终手稿的完整性和准确性承担全部责任。本研究部分得益于加拿大数字研究联盟（alliancecan.ca）向 T.J.A.C. 提供的支持。

利益冲突

作者声明不存在任何利益冲突。

附录 A：有序和无序微管几何结构的构建

1. 微管几何构建

有序微管由重复的 1JFF 微管蛋白二聚体组装而成，并按照先前的研究 [10, 12] 以及 Patwa 等人提供的代码 [11]，将二聚体排列成左手螺旋几何结构。初始二聚体的取向使 α 和 β 亚基沿原丝方向排列，我们将其定义为 x 轴。每个二聚体依次经过以下变换：绕纵轴旋转 $-55.38°$；绕穿过 β微管蛋白 Trp346 CD2原子的轴旋转 $11.7°$；沿 y 方向平移 11.2 nm，沿 z 方向平移 0.3 nm。要生成螺旋中的第 N 个二聚体，还需进行两项额外操作：绕 x 轴旋转 $27.69°$；沿 x平移 0.9 nm。一个螺旋包含 13 个二聚体，形成的直径约为 22.4 nm。从微管纵轴到二聚体质心测得的半径接近 11.2 nm，介于约 13.5 nm 的外表面半径与约 9.5 nm 的内腔半径之间。多个螺旋通过沿 x 轴平移 8 nm 连接起来。

2. 分子动力学中的结构无序

通过对微管蛋白二聚体进行分子动力学模拟，并根据快照结构组装微管，来采样几何变化。模拟使用 AMBER 分子动力学软件包（AMBER 22，pmemd；2022年）[60] 在 310 K 下进行，生产阶段持续 6.2 ns。初始模板取自蛋白质数据库条目 1TVK，并通过同源建模（Swiss-Model）补全缺失残基 [61]。使用基于连续介质静电学的工具（H++，pH 7）设定接近中性 pH 的质子化状态，包括组氨酸指派；随后使用 PROPKA 进一步优化组氨酸 [62, 63]。微管蛋白采用 ff14SB 力场描述 [64]，；在 LEaP 中使用标准 Amber 库及所需的其他兼容 Amber 的参数文件，组装微管蛋白–核苷酸复合物（GTP 和 GDP 结合形式）。随后在 LEaP 中对体系进行中和，并在缓冲层为 25 Å 的 TIP3P 水盒中进行溶剂化。经过最小化和平衡后

生成了生产轨迹，并使用 cpptraj（随 AMBER 22 分发的 AmberTools）进行分析 [65]。每 1,000 步（2 ps）保存一次轨迹坐标，从而得到 3100 帧。我们提取这些帧，并用其坐标替换构建流程中的有序 1JFF二聚体。无序微管构建至 100 条螺旋，对应 1300 个二聚体；计算使用加拿大数字研究联盟提供的高性能计算资源完成。

Ap附录 B：非厄米哈密顿量与 Lindblad 主方程之间的联系 n

我们从密度算符 ρ 的一般 Lindblad 型主方程开始：

$$\dot{\rho} = -i[H,\rho] + \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \left(L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger} - \tfrac{1}{2}\{L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}, \rho\} \right), \tag{B1}$$

其中， H 是系统哈密顿量， L_{μ} 是坍缩（跳跃）算符，γ_{μ} 是相应的速率。

1. 有效非厄米哈密顿量

我们将有效非厄米哈密顿量定义为

$$H_{\text{eff}} = H - \frac{i}{2} \sum_{\mu} \gamma_{\mu} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}. \tag{B2}$$

利用这一点，主方程（B1）可改写为

$$\dot{\rho} = -i \left(H_{\text{eff}} \rho - \rho H_{\text{eff}}^{\dagger} \right) + \sum_{\mu} \gamma_{\mu} L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger}. \tag{B3}$$

如果忽略最后一个“量子跳跃”项，动力学就简化为纯粹的非厄米哈密顿量演化。在量子轨迹（解缠）图像中，这对应于条件无跳跃演化（即以没有发生发射事件为条件的演化），而跳跃项则在平均意义上恢复迹保持 [35, 66, 67]。

2. 偶极网络中的有效哈密顿量

在辐射耦合偶极子的模型中，有效哈密顿量通常具有如下形式

$$H_{\text{eff}} = \sum_{n=1}^{N} \left(\hbar\omega_0 - \tfrac{i}{2}\gamma \right) |n\rangle\langle n| + \sum_{\substack{m,n=1 \\ m \neq n}}^{N} \left(\Omega_{mn} - \tfrac{i}{2}\Gamma_{mn} \right) |m\rangle\langle n|, \tag{B4}$$

其中 $|n\rangle$ 表示位点 n处的局域激发，Ω_{mn} 是相干偶极-偶极耦合，而 Γ_{mn} 是集体辐射衰变项（在正文中，我们用 G表示集体衰变矩阵；此处 Γ 发挥相同作用）。

3. 单激发加基态空间中的 Lindblad 形式

为了恢复完整的在开放系统动力学中，我们回到式（B3）。将系统哈密顿量写成位点基底 is,

$$H = \sum_{n=1}^{N} \hbar\omega_0 |n\rangle\langle n| + \sum_{m \neq n} \Omega_{mn} |m\rangle\langle n|, \tag{B5}$$

辐射Lindblad方程可写为

$$\dot{\rho} = -i[H,\rho] + \sum_{m,n=1}^{N} \Gamma_{mn} \left(|0\rangle\langle m| \, \rho \, |n\rangle\langle 0| - \tfrac{1}{2}\{|n\rangle\langle m|, \rho\} \right), \tag{B6}$$

其中 $|0\rangle$ 表示基态（不存在激发）。

定义局域激发湮灭算符和激发产生算符通常很有帮助，

$$\sigma_n^- = |0\rangle\langle n|, \qquad \sigma_n^+ = |n\rangle\langle 0|. \tag{B7}$$

采用这一记号，耗散子变为

$$\sum_{m,n=1}^{N} \Gamma_{mn} \left(\sigma_m^- \rho \sigma_n^+ - \tfrac{1}{2}\{\sigma_n^+ \sigma_m^-, \rho\} \right), \tag{B8}$$

这明确表明，辐射通道由厄米半正定矩阵 Γ 决定。接下来将介绍通过对 Γ 进行对角化来构造集体坍缩算符的标准方法。

4. 由衰减矩阵构造集体坍缩算符

由于 Γ 是厄米半正定矩阵，因此它可以进行本征分解

$$\Gamma = V \Lambda V^\dagger, \qquad \Lambda = \mathrm{diag}(\gamma_1, \ldots, \gamma_N), \tag{B9}$$

其中， V 的列向量 $v^{(j)}$ 是正交归一本征向量， $\gamma_j \geq 0$ 是本征值。将其代入耗散子，可得由集体跃迁算符构成的一系列相互独立的林德布拉德通道

$$L_j = \sqrt{\gamma_j} \sum_{n=1}^{N} v_n^{(j)} \, \sigma_n^- = \sqrt{\gamma_j} \sum_{n=1}^{N} v_n^{(j)} \, |0\rangle\langle n|. \tag{B10}$$

这清楚地揭示了超辐射通道和亚辐射通道的形成机制：具有较大 γ_j 的本征模对应亮态（增强衰减）通道，而具有较小 γ_j 的本征模对应暗态（抑制衰减）通道 [35, 66, 67]。

5. 单激发子空间与条件演化

当动力学被投影到不包含基态 $|0\rangle$ 的单激发流形上时，将布居转移到 $|0\rangle$ 的辐射量子跳跃会被构造性地排除。在这一约化描述中，演化是由有效非厄米哈密顿量生成的条件无跳跃动力学，

$$\dot{\rho}(t) = -i\Big(H_{\mathrm{eff}} \rho(t) - \rho(t) H_{\mathrm{eff}}^\dagger \Big), \tag{B11}$$

它不保持迹，因此应被解释为以不存在发射事件为条件的演化（量子轨迹展开中的无跳跃演化） [35, 66, 67]。

在我们的主要模拟中所使用的保持迹且完全正的林德布拉德模型里，我们纳入了基态 $|0\rangle$以及通过本征分解 $G = V\Lambda V^\dagger$得到的相应集体跃迁算符：

$$L_j = \sqrt{\gamma_j} \sum_{n} v_n^{(j)} \, |0\rangle\langle n| \,, \qquad \Lambda = \mathrm{diag}(\gamma_1, \ldots, \gamma_N). \tag{B12}$$

完整的主方程随后写为

$$\dot{\rho}(t) = -i[H, \rho(t)] + \sum_j \Big(L_j \, \rho(t) \, L_j^\dagger - \tfrac{1}{2}\{L_j^\dagger L_j, \rho(t)\} \Big), \tag{B13}$$

该方程保持 $\mathrm{Tr}\,\rho(t)$ 不变，同时允许布居通过集体发射通道从单激发扇区流入 $|0\rangle$ 。

忽略跃迁至基态的量子跳跃（例如，在受限的单激发子空间中）时，非厄米哈密顿量形式体系可作为完整林德布拉德方程的一种近似。林德布拉德主方程则通过以迹保持的方式同时纳入相干动力学和不可逆辐射衰减，推广了这一方法。

附录 C：量子信息度量

1. 量子相干

为了量化色氨酸（Trp）网络内部以及其子结构（例如螺旋区域和丝状区域）之间的量子相干性，我们采用量子相干资源理论中引入的相干性 l_1-范数。对于固定参考基 $|i\rangle$中的密度矩阵 ρ，相干性 l_1-范数定义如下：

$$C_{l_1}(\rho) = \sum_{i \neq j} |\rho_{ij}|, \tag{C1}$$

其中， ρ_{ij} 是 ρ的非对角元素。该度量反映了相对于所选基底，系统中存在的相干性总量。

为了研究相干性如何在不同区域之间分布和共享，我们计算子系统 A 和 B 之间的关联相干性（例如，螺旋区域与丝状区域）。关联相干性 C_{corr} 定义如下：

$$C_{\text{corr}} = C_{l_1}(\rho_{AB}) - C_{l_1}(\rho_A) - C_{l_1}(\rho_B), \tag{C2}$$

其中， ρ_{AB} 是整个系统的密度矩阵， $\rho_A = \text{Tr}B[\rho AB]$ 和 $\rho_B = \text{Tr}A[\rho AB]$分别是子系统 A 和 B的约化密度矩阵。

该量提取出两个子系统之间真正共享的相干性，而这部分相干性并非仅由局域相干性造成。

2. 对数负性

负性记作 $N(\rho)$，用于量化双部量子系统中的纠缠， ρ_{AB} [68]。其定义为部分转置密度矩阵 ρ_A^T 中所有负本征值 λ_i 的绝对值之和，

$$N(\rho_{AB}) = \sum_i |\lambda_i|. \tag{C3}$$

对数负性 E_N 与负性相关，可作为衡量纠缠程度的良好指标。其定义为

$$E_N(\rho_{AB}) = \log_2(2N(\rho_{AB}) + 1). \tag{C4}$$

3. 互信息

我们通过量子互信息来量化总关联

$$I(A{:}B, t) = S(\rho_A(t)) + S(\rho_B(t)) - S(\rho_{AB}(t)), \quad S(\rho) = -\text{Tr}\,\rho \log_2 \rho,$$

其中， $\rho_{AB}(t)$ 是在所选二分划分 $A \otimes B$ 下的约化密度算符，且 $\rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB}, \rho_B = \text{Tr}_A \rho_{AB}$。所有约化均遵循单激发模型：所选子系统之外的布居均被迹化并归入局域基态 $|0\rangle$。

附录 D：补充结果

1. 互信息

在图 13 中，我们总结了每种嵌入和初始态下时间平均两两互信息最大的四个位点对，着重展示信息共享模式如何从局域化（单个微管蛋白）逐渐演变为更加离域化（螺旋）。

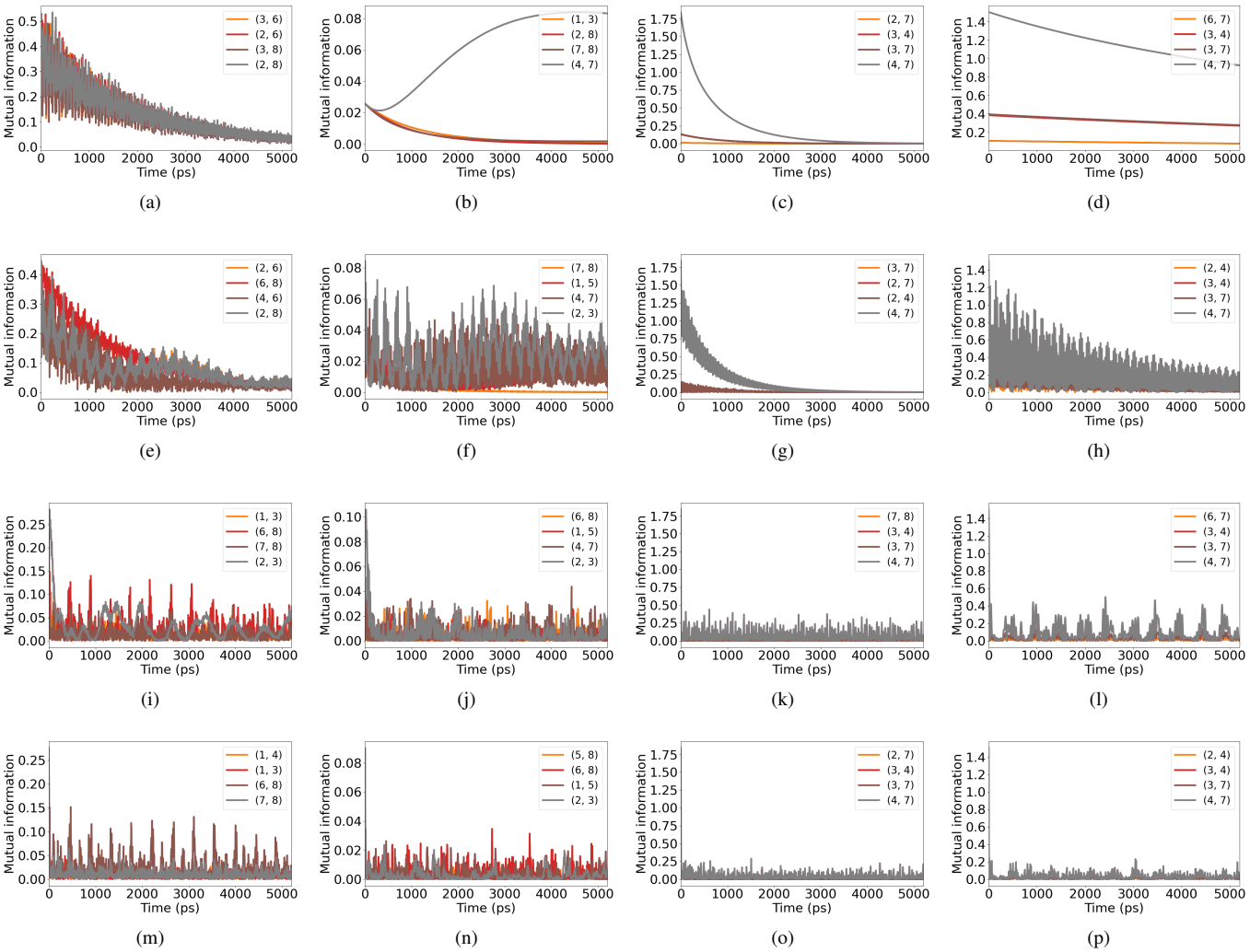

图13. 跨嵌入与初始态的前四位成对互信息值。各列（所有行）：从左到右依次为最大相干、最大混合、超辐射和亚辐射初始态。各行：(a–d) 单个微管蛋白；(e–h) 双微管蛋白系统；(i–l) 单个螺旋；(m–p) 两个螺旋。每个面板显示所追踪微管蛋白内互信息最大的四个位点对。位点对 (i, j) 表示图1中定义的色氨酸位点索引（标签）。所有面板中的时间均以皮秒（ps）表示。

2. 单个螺旋中的关联相干

我们评估了激发态微管蛋白（编号 2）与单个螺旋中其余微管蛋白之间如何共享量子相干（图 14）。对于每一对 $(2, k)$，我们计算其关联相干性。对于每种初始条件——最大相干、最大混合、超辐射和亚辐射——我们绘制了 $C_{\mathrm{corr}}(2{:}k)$随时间的演化，涵盖所有配对微管蛋白 $k \neq 2$。

[1] Fries, P. 认知节律. Neuron 2015, 88, 220–235. https://doi.org/10.1016/j.neuron.2015.09.034. [2] Bastos, A.M.; Schoffelen, J.M. 功能连接分析方法及其解释陷阱教程综述. Frontiers in Systems Neuroscience 2015, 9, 175. https://doi.org/10.3389/fnsys.2015.00175. [3] Schreiber, T. 测量信息传递. Physical Review Letters 2000, 85, 461–464. https://doi.org/10.1103/ PhysRevLett.85.461. [4] Vicente, R.; Wibral, M.; Lindner, M.; Pipa, G. 传递熵——一种面向神经科学的无模型有效连接度量. Journal of Computational Neuroscience 2011, 30, 45–67. https://doi.org/10.1007/s10827-010-0262-3. [5] Baas, P. W.; Rao, A. N.; Matamoros, A. J.; Leo, L. 神经元微管的稳定性. Cytoskeleton (Hoboken) 2016, 73, 442 460 10 1002 21286 – . https://doi.org/ . /cm. .

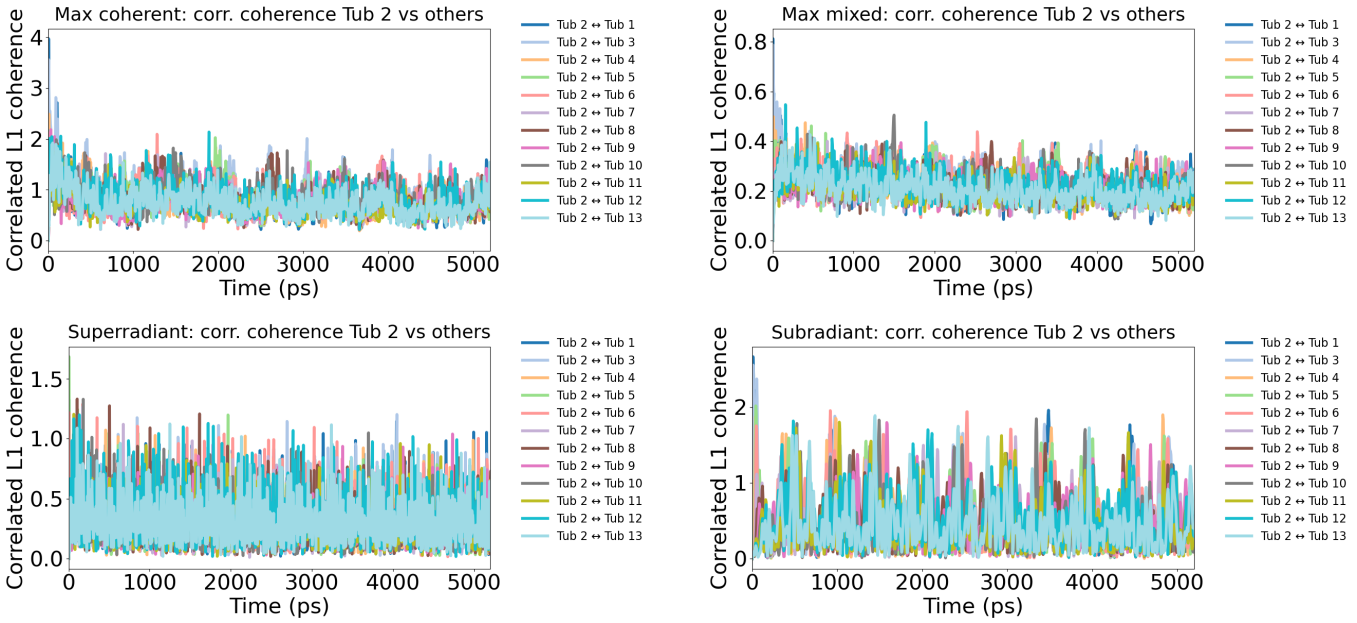

图14. 初始激发的微管蛋白（编号2）与螺旋中所有其他微管蛋白之间的关联相干性，展示了四种不同的初始条件。每条线对应一对 (2，k)，其中 $k \in \{1, 3, \ldots, 13\}$。关联相干性量化了子系统间共享的 ℓ_1-相干性部分，超出了各自的局部贡献。所有图中的时间均以皮秒（ps）为单位。

[6] Li, Y.; Black, M. M. 生长中的轴突内微管的组装与周转。《神经科学杂志》1996, 16, 531–544. https: // doi.org/10.1523/JNEUROSCI.16-02-00531.1996. [7] Kalra, A.P.; Benny, A.; Travis, S.M.; Zizzi, E.A.; Morales-Sanchez, A.; Oblinsky, D.G.; Craddock, T.J.; Hameroff, S.R.; MacIver, M.B.; Tuszynski, J.A.; 等. 微管中的电子能量迁移。《ACS中央科学》2023, 9, 352–361. https://doi.org/10. 1021/acscentsci.2c01114.[8] Craddock, T.J.A.; Friesen, D.; Mane, J.; Hameroff, S.; Tuszynski, J.A. 微管中相干能量传递的可行性。《皇家学会界面期刊》2014, 11 (100), 20140677. https://doi.org/10.1098/rsif.2014.0677. [9] Kurian, P.; Obisesan, T.; Craddock, T.J. 氧化性物种诱导的微管蛋白芳香族网络中的激子输运：对神经退行性疾病的潜在影响。《光化学与光生物学杂志B辑：生物学》2017, 175, 109–124. [10] Babcock, N.; Montes-Cabrera, G.; Oberhofer, K.; Chergui, M.; Celardo, G.; Kurian, P. 生物结构中色氨酸巨型网络产生的紫外超辐射。《物理化学杂志B辑》2024. https://doi.org/10.1021/acs.jpcb. 3c07936.[11] Patwa, H.; Babcock, N.S.; Kurian, P. 神经蛋白结构中的量子增强光保护源于集体光-物质相互作用。《物理学前沿》2024, 12, 1387271. https://doi.org/10.3389/fphy.2024.1387271. [12] Celardo, G.; Angeli, M.; Craddock, T.; Kurian, P. 关于微管中超辐射激子态的存在。《新物理学杂志》2019, 21, 023005. https://doi.org/10.1088/1367-2630/aaf839. [13] Rotter, I. 非厄米哈密顿算符与开放量子系统物理学。《物理学杂志A辑：数学与理论》2009, 42, 153001. https://doi.org/10.1088/1751-8113/42/15/153001. [14] Ashida, Y.; Gong, Z.; Ueda, M. 非厄米物理学。《物理学进展》2020, 69, 249–435. https://doi.org/10.1080/ 00018732.2021.1876991.[15] Celardo, G.L.; Borgonovi, F.; Merkli, M.; Tsifrinovich, V.I.; Berman, G.P. 光合光捕获复合物中的超辐射跃迁。《物理化学杂志C辑》2012, 116, 22105–22111. https://doi.org/10.1021/jp302627w. [16] Wang, C.; Ren, J.; Zhu, X.; El-Ganainy, R. 从经典到量子的非厄米光学与光子学。《光学与光子学进展》2023, 15, 1097–1238. https://doi.org/10.1364/AOP.475477. [17] Bergholtz, E.J.; Budich, J.C.; Kunst, F.K. 非厄米系统的例外拓扑。《现代物理评论》2021, 93, 015005. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.93.015005. [18] Shirmovsky, S.E.; Chizhov, A.V. 微管色氨酸系统中纠缠态传输过程的建模。《生物系统》2023, 231, 104967 10 1016 2023 104967 . https://doi.org/ . /j.biosystems. . . [19] Shirmovsky, S.E. 细胞微管中量子纠缠态传输协议的建模。《生物系统》2024, 235, 105100. https://doi.org/10.1016/j.biosystems.2023.105100. [20] Shirmovsky, S.E. 关于在生物系统中实现量子纠缠分发的可能性：微管。《生物系统》2024, 245, 105320 10 1016 2024 105320 . https://doi.org/ . /j.biosystems. . . [21] Shirmovsky, S.E.; Shulga, D.V. 微管中的量子弛豫效应。《物理学A辑：统计力学及其应用》2021, 582, 126254 10 1016 2021 126254 . https://doi.org/ . /j.physa. . .

[22] Shirmovsky, S.E.; Shulga, D.V. 微管色氨酸系统中的量子弛豫过程。《物理学A辑：统计力学及其应用》2023, 617, 128687. https://doi.org/10.1016/j.physa.2023.128687. [23] Saenko, V.A.; Shirmovsky, S.E.; Shulga, D.V. 细胞微管中量子弛豫特征的详细分析：马尔可夫动力学与非马尔可夫动力学。《生物系统》2025, 254, 105520. https://doi.org/10.1016/j.biosystems.2025.105520. [24] Nishiyama, A.; Tanaka, S.; Tuszynski, J.A. 波导量子电动力学：与水纠缠的色氨酸作为微管中的数据量子比特。《Dynamics》2025, 5, 7. https://doi.org/10.3390/dynamics5010007. [25] Hameroff, S.R. 关于癌症起源的新理论：量子相干纠缠、中心粒、有丝分裂与分化。《生物系统》2004, 77, 119–136. https://doi.org/10.1016/j.biosystems.2004.04.006. [26] An, S.; Choi, B.S. Orch OR微管斐波那契螺旋路径的表面码模型。《生物系统》2025, 249, 105414. https://doi.org/10.1016/j.biosystems.2025.105414. [27] Lindblad, G. 关于量子动力半群的生成元。《数学物理通讯》1976, 48, 119–130. https://doi.org/10.1007/BF01608499. [28] Gorini, V.; Kossakowski, A.; Sudarshan, E.C.G. N能级系统的完全正动力半群。《数学物理杂志》1976, 17, 821–825. https://doi.org/10.1063/1.522979. [29] Ishizaki, A.; Fleming, G.R. 对电子能量转移中量子相干与非相干跃迁动力学的统一处理。《化学物理杂志》2009, 130, 234111. https://doi.org/10.1063/1.3155372. [30] Ishizaki, A.; Fleming, G.R. 关于Redfield方程及相关方法描述光合系统中激子动力学的适用性。《化学物理杂志》2009, 130, 234110. https://doi.org/10.1063/1.3155214. [31] Huelga, S.F.; Plenio, M.B. 振动、量子与生物学。《当代物理学》2013, 54, 181–207. https://doi.org/10.1080/ 00405000.2013.829687.[32] Mohseni, M.; Rebentrost, P.; Lloyd, S.; Aspuru-Guzik, A. 光合能量转移中的环境辅助量子行走。《化学物理杂志》2008, 129, 174106. https://doi.org/10.1063/1.3002335. [33] Rebentrost, P.; Mohseni, M.; Aspuru-Guzik, A. 量子相干与环境涨落在发色团能量传输中的作用。《物理化学杂志B辑》2009, 113, 9942–9947. https://doi.org/10.1021/jp901724d. [34] Engel, G.S.; 等. 光合系统中量子相干支持波状能量转移的证据。《自然》2007, 446, 782–786. https://doi.org/10.1038/nature05678. [35] Breuer, H.P.; Petruccione, F.; 等. 开放量子系统理论；牛津大学出版社按需出版，2002. [36] Panitchayangkoon, G.; 等. 光合复合物中的长寿命量子相干。《美国国家科学院院刊》2010, 107, 12766–12770. https://doi.org/10.1073/pnas.1005484107. [37] Baumgratz, T.; Cramer, M.; Plenio, M.B. 量化相干性。Physical Review Letters 2014, 113, 140401. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.140401. [38] Streltsov, A.; Adesso, G.; Plenio, M.B. 专题综述：作为资源的量子相干。《现代物理评论》2017, 89, 041003. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.89.041003. [39] Yao, Y.; Xiao, X.; Ge, L.; Sun, C.P. 多体系统中的量子相干。Physical Review A 2015, 92, 022112. https: //doi.org/10.1103/PhysRevA.92.022112. [40] Tan, K.C.; Kwon, H.; Park, C.Y.; Jeong, H. 量子关联与量子相干的统一观点。Physical Review A 2016, 94, 022329 10 1103 94 022329 . https://doi.org/ . / PhysRevA. . . [41] Plenio, M.B. 对数负性。Physical Review Letters 2005, 95, 090503. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.090503.[42] Vidal, G.; Werner, R.F. 可计算的纠缠度量。Physical Review A 2002, 65, 032314. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.65.032314. [43] Ishizaki, A.; Fleming, G. R. 对生理温度下光合系统中量子相干的理论考察。《美国国家科学院院刊》2009, 106, 17255–17260. https://doi.org/10.1073/pnas.0908989106. [44] Chin, A. W.; Datta, A.; Caruso, F.; Huelga, S. F.; Plenio, M. B. 量子网络和光捕获复合物中的噪声辅助能量转移。《新物理学杂志》2010, 12, 065002. https://doi.org/10.1088/1367-2630/12/6/065002. [45] Scholes, G. D.; Fleming, G. R.; Chen, L. X.; Aspuru-Guzik, A.; Buchleitner, A.; Coker, D. F.; Engel, G. S.; van Grondelle, R.; Ishizaki, A.; Jonas, D. M.; 等. 利用相干性增强化学和生物物理系统的功能。《自然》2017, 543, 647–656. https://doi.org/10.1038/nature21425. [46] Kapitein, L. C.; Hoogenraad, C. C. 构建神经元微管细胞骨架。Neuron 2015, 87, 492–506. https://doi.org/ 10.1016/j.neuron.2015.05.046. [47] Janke, C.; Magiera, M. M. 微管蛋白密码及其在调控微管特性与功能中的作用。《自然评论：分子细胞生物学》2020, 21, 307–326. https://doi.org/10.1038/s41580-020-0214-3. [48] Johansson, J.R.; Nation, P.D.; Nori, F. QuTiP：用于开放量子系统动力学的开源Python框架。《计算机物理通讯》2012, 183, 1760–1772. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.02.021. [49] DeLano, W. L. PyMOL分子图形系统。DeLano Scientific, 加利福尼亚州圣卡洛斯，2002. http://www.pymol.org. [50] Ehrenshaft, M.; Deterding, L. J.; Mason, R. P. 绊倒Trp：活性氧对蛋白质色氨酸残基的修饰。《自由基生物学与医学》2015, 89, 220–228. https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2015.08.003. [51] Schöneich, C. 色氨酸氧化介导的蛋白质新型化学降解途径：色氨酸侧链断裂。《药学与药理学杂志》2018, 70, 655–665. https://doi.org/10.1111/jphp.12688. [52] Goodson, H. V.; Jonasson, E. M. 微管与微管相关蛋白。《冷泉港生物学展望》2018, 10, 022608 10 1101 022608 a . https://doi.org/ . /cshperspect.a . [53] Del Giudice, E.; Doglia, S.; Milani, M.; Vitiello, G. 生物系统集体行为的量子场论方法。《核物理B》1985, 251, 375–400. https://doi.org/10.1016/0550-3213(85)90267-6.

[54] Del Giudice, E.; Doglia, S.; Milani, M.; Vitiello, G. 生物物质中的电磁场与自发对称性破缺. 《核物理B》1986, 275, 185–199. https://doi.org/10.1016/0550-3213(86)90595-X. [55] Breuer, H.P.; Laine, E.M.; Piilo, J. 开放系统中量子过程非马尔可夫行为程度的度量. Phys. Rev. Lett. 2009, 103, 210401. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.210401. [56] Rivas, A.; Huelga, S.F.; Plenio, M.B. 量子演化的纠缠与非马尔可夫性. Phys. Rev. Lett. 2010, 105, 050403. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.050403. [57] Ho, M.-W. 生物体与可持续系统的循环热力学. 《系统》2013, 1, 30–49. https://doi.org/10.3390/ systems1030030. [58] Li, K. 物理学与生物学中的相干性. 收录于：Popp, F., 等（编），《生物光子研究及其应用的最新进展》；世界科学出版社：新加坡，1992；第113–155页. https://doi.org/10.1142/9789814439671_0004. [59] Hirokawa, N.; Niwa, S.; Tanaka, Y. 神经元中的分子马达：在脑功能、发育和疾病中的运输机制与作用. Neuron 2010, 68, 610–638. https://doi.org/10.1016/j.neuron.2010.09.039. [60] Case, D. A.; Cheatham III, T. E.; Darden, T.; Gohlke, H.; Luo, R.; Merz Jr., K. M.; Onufriev, A.; Simmerling, C.; Wang, B.; Woods, R. J. Amber生物分子模拟程序. J. Comput. Chem. 26, 1668–1688 (2005). https://doi.org/10.1002/jcc.20290. [61] Waterhouse, A. 等. SWISS-MODEL：蛋白质结构和复合物的同源建模. Nucleic Acids Res. 46, W296–W303 (2018). https://doi.org/10.1093/nar/gky427. [62] Anandakrishnan, R.; Aguilar, B.; Onufriev, A. V. H++ 3.0：自动化pKa预测以及用于原子级分子建模与模拟的生物分子结构制备. Nucleic Acids Res. 40, W537–W541 (2012). https://doi.org/10.1093/nar/ gks375. [63] Olsson, M. H. M.; Søndergaard, C. R.; Rostkowski, M.; Jensen, J. H. PROPKA3：经验性pKa预测中对内部残基和表面残基的一致处理. J. Chem. Theory Comput. 7, 525–537 (2011). https://doi.org/10.1021/ct100578z. [64] Maier, J. A.; Martinez, C.; Kasavajhala, K.; Wickstrom, L.; Hauser, K. E.; Simmerling, C. ff14SB：改进ff99SB中蛋白质侧链和主链参数的准确性. J. Chem. Theory Comput. 11, 3696–3713 (2015). https://doi.org/10.1021/acs. jctc.5b00255. [65] Roe, D. R.; Cheatham III, T. E. PTRAJ和CPPTRAJ：用于处理和分析分子动力学轨迹数据的软件. J. Chem. Theory Comput. 9, 3084–3095 (2013). https://doi.org/10.1021/ct400341p. [66] Wiseman, H. M.; Milburn, G. J. 《量子测量与控制》. 剑桥大学出版社 2009. https://doi.org/10. 1017/CBO9780511813948.[67]Carmichael, H. J. 《量子光学的开放系统方法》. 施普林格 1993. https://doi.org/10.1007/ 978-3-540-47620-7.[68] Benabdallah, F.; Zad, H.A.; Daoud, M.; Ananikian, N. 随机电报噪声下量子比特-量子三能级系统中量子关联的动力学. 《物理学文献》2021, 96, 125116. https://doi.org/10.1088/1402-4896/ac3c5c.