

双柱胶体粒子与管状生物膜的相互作用*

牛余全 郑斌 崔春红 魏巍 张彩霞 孟庆田†

(山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

(2013年10月4日收到; 2013年10月23日收到修改稿)

本文采用 Helfrich 理论模型研究双柱胶体粒子与管状生物膜的相互作用. 通过对柱状粒子与不同半径的管状膜吸附时的自由能分析发现, 该体系存在具有较小包络角的弱吸附相以及具有较大包络角的深度吸附相. 进一步研究发现体系从解吸附相到弱吸附相的相变是二级相变, 而从弱吸附相到深度吸附相的相变是一级相变. 双柱粒子与管状膜相对位置的不同会影响体系相变和结构.

关键词: Helfrich 理论, 相变, 自由能, 管状膜

PACS: 87.15.-v, 68.47.Pe, 82.35.Gh

DOI: 10.7498/aps.63.038701

1 引言

细胞作为生物体结构和功能的最基本单元, 其表面以及内部都存在着形态和结构不尽相同的薄膜, 这层薄膜被称为生物膜. 生物膜是沟通细胞以及细胞器内外环境的特殊生命结构, 具有选择性的对物质进行跨膜运输并调节细胞内外物质平衡的功能^[1]. 当细胞从外界摄取物质以维持其正常机能时, 就涉及到粒子与生物膜的相互作用. 对于大小尺度为几个Å的粒子, 例如一些离子可以通过简单扩散或主动运输等方式通过生物膜; 然而对于大分子物质, 例如直径大于250 nm的粒子则通过囊泡转运——胞吞和胞吐^[2,3]的方式, 并且该方式会引起生物膜的形状变化. 按照流体镶嵌模型^[4]的描述, 生物膜的基本结构是由两亲性脂质分子所组成的双层膜以及镶嵌在其上的蛋白质、酶、胆固醇等大分子组成. 为了克服生物膜结构上的复杂性并从理论上研究生物膜的形变特性, 本文将生物膜用类脂双层代替, 并将所研究的生物膜抽象成为没有厚度的曲面从而进行研究. 实验上主要是通过对人工制备的类脂双层开展对生物膜功能和结构的研究, 并且观测到的生物膜的厚度要远小于其所研究

的平面尺度, 所以上述简化模型是简单而有效的.

目前已有许多模型应用于研究生物膜的性质以及粒子与生物膜的相互作用^[5-16]. Deserno等^[17-19]曾成功运用 Helfrich 理论^[5-9]研究了一个球粒子与平面膜的相互作用, 内容包括膜的结构和对应的体系自由能, 进而发现了生物膜的连续及不连续相变. Tu^[11]引入外微分描述了具有自由裸露边界的生物膜, 通过对 Helfrich 自由能的分析得到了体系的平衡方程以及边界条件. 彭勇刚等^[15]采用傅里叶空间中的布朗运动方程研究了具有双层结构的生物膜的动力学性质. Chen等^[20-25]从理论上研究了包括管状膜和柱状胶体粒子在内的生物膜和胶体粒子的相互作用, 例如单球粒子和多个球粒子在管状膜中与膜的相互作用、被束缚在管状膜内部的高分子物质与管状膜的相互作用以及单柱粒子与管状膜的相互作用等. Sergey^[24]研究了一个以及两个柱粒子与平面膜的吸附作用, 发现在这个简单体系中存在多个相.

由柱状粒子和管状膜所组成的体系作为理想化模型, 可以用于研究相关生物体系内粒子和膜的相互作用规律, 并为其物理特性提供基础性的理解. 例如柱状粒子可以模拟 MVL51 杆状噬菌体^[26], 而管状膜则可以模拟大肠杆菌, 进而在特殊

* 国家自然科学基金(批准号: 11074151)和国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB808100)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: qtmeng@sdu.edu.cn

情况下这个理想化模型可以为噬菌体侵染细菌提供一定的理论解释. 本文的工作旨在研究双柱粒子与管状膜的相互作用, 并且管状膜的半径相对于柱状粒子大许多. 这个简单但却具有一定意义的体系也可以为软物质领域的研究以及自然界中与杆状噬菌体或杆状病毒有关的生命现象提供理论帮助. 下面我们将会根据 Helfrich 理论推导出体系的自由能, 并通过求解哈密顿正则方程得到体系的形状函数. 然后数值求解体系对应的最小自由能从而确定体系稳定的结构, 并进一步讨论体系的相变等.

2 理论模型

考虑两个柱状粒子与管状膜的相互作用. 由于管状膜的长度远大于柱状粒子的长度, 柱状粒子与其相互作用的过程中管状膜沿轴向的形变可以忽略不计, 从而可以用一个二维模型来描述该体系, 即用闭合曲线表示可以形变的管状膜. 在相互作用前, 管状膜的截面是一个闭合的圆, 所以管状膜的形变就是该闭合曲线沿径向的改变. 图 1(a) 中, 点横线所示的两个圆代表两个柱状粒子, 实线所示的

闭合圆表示未发生形变的管状膜; 图 1(b) 中, 由于粒子的附着, 该圆所表示的管状膜已经发生形变. 由图 1(a) 可见, O_1 与 O_2 的距离为柱粒子与管状膜的间距 H , 其中 O_1 - O_2 连线与纵轴的夹角等于 80° .

以图 1(b) 中虚线 a-c 段部分的管状膜为研究对象, s 表示弧长, 其形状可由切角 $\psi(s)$ 和标准圆半径 $r(s)$ 两个物理量共同表示. 这两个参量都是弧长 s 的函数, 其中 $\psi(s)$ 表示管状膜在 s 处的切线与管状膜未发生形变时在该点切线的夹角 (未发生形变的一部分弧长由图 1(b) 中点弧线表示); γ_1 和 γ_2 分别是柱粒子被管状膜上下两部分所包络的角度即包络角, α 指 $r(s)$ 与 O_1 - O_2 连线的夹角. 管状膜上的所有点都必须满足如下两个约束关系

$$\frac{dr}{ds} = \sin \psi(s), \quad (1)$$

$$r(s) \frac{d\theta}{ds} = \cos \psi(s), \quad (2)$$

管状膜 s 处的曲率可以写为

$$\frac{d(\theta - \psi)}{ds}. \quad (3)$$

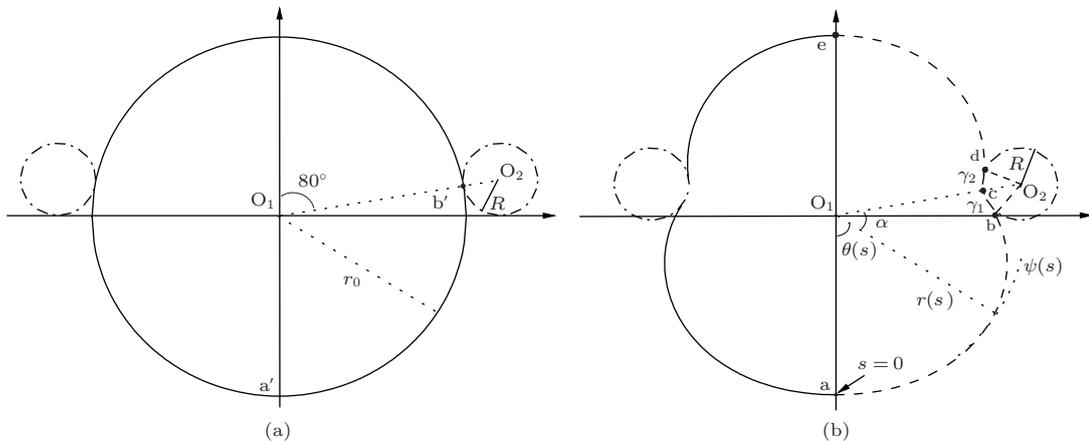


图 1 柱状粒子 (点横线所示的圆) 与管状膜 (闭合曲线) 相互作用截面图, 管状膜的中心为 O_1 且初始半径为 r_0 , 柱状粒子的中心为 O_2 半径为 R , γ_1, γ_2 分别表示柱粒子被管状膜的上下两部分所包络的角度

从理论上来说, 体系的自由能可以通过 Helfrich 模型求得, 其中包括两个重要参量, 即弯曲刚度 κ 和表面张力系数 σ . 考虑到管状膜与柱状粒子表面的短程吸引力, 用参量 w (单位面积的吸附能) 来体现. 这样体系的自由能可由三部分组成, 即表面张力能、弯曲能和吸附能.

从结构上来说, 体系总的自由能又可以分为未发生吸附作用的部分即自由膜部分和发生吸附作用的部分. 例如图 1(b) 中 a-c 段管状膜中的 a-b

段是自由膜部分, 而 b-c 段是发生吸附作用的部分. 相对于找出自由膜部分的体系自由能来说, 发生吸附作用部分的自由能更容易得到. 因为体系自由能是膜结构的函数, 而发生吸附作用后这部分管状膜的结构就唯一的确定从而自由能也唯一的确定. 对于自由膜部分, 因为其结构并不确定, 所对应的自由能也就有多种可能, 并且只有找到对应体系结构的最小自由能才能确定该部分的稳定结构.

假设所研究管状膜的长度为 L , 对于 a-b 段管

状膜, 其自由能可以由 Helfrich 理论写为

$$E_{\text{free}} = 2L \int_0^S ds \left[\frac{\kappa}{2} \left(\frac{d(\theta - \psi)}{ds} \right)^2 + \sigma \right], \quad (4)$$

其中弧长参量 s 的取值范围是从 0 到 S , S 是截止到粒子与管状膜接触的总长度. 应用约束关系 (2) 体系的自由能可写为

$$E_{\text{free}} = 2L \int_0^S ds \left[\frac{\kappa}{2} \left(\frac{\cos \psi}{r} - \frac{d\psi}{ds} \right)^2 + \sigma \right]. \quad (5)$$

由于体系关于纵轴具有对称性, 故在 (4) 和 (5) 式的积分号前引入因子 2.

在管状膜与粒子发生相互作用前, 二维平面空间中管状膜是一个标准的圆 $\psi(s) = 0$ (如图 1(a) 所示). 设 a'-b' 段管状膜的弧长为 S_0 , 由于 O_1 - O_2 连线与纵轴的夹角等于 80° , 则管状膜的初始半径可以表示为 $r_0 = r(s) = 9S_0/5\pi$ 且 $\theta(s) = 5s\pi/9S_0$. 通过对此时体系的自由能

$$E_{\text{free}} = 2LS_0 \left(\frac{\kappa}{2r_0^2} + \sigma \right), \quad (6)$$

求最小化可得有关半径平方的关系

$$r_0^2 = \frac{\kappa}{2\sigma}. \quad (7)$$

使用变量 r_0 作为一个标准量, 可以将其他变量写成无量纲的形式, 例如 $\tilde{s} = s/r_0$, $\tilde{r} = r/r_0$, $\tilde{R} = R/r_0$ 以及 $\tilde{H} = H/r_0$ 等, 继而可以将 (1) 和 (2) 式改写为

$$\frac{d\tilde{r}}{d\tilde{s}} = \sin \psi, \quad (8)$$

$$\frac{d\theta}{d\tilde{s}} = \frac{\cos \psi}{\tilde{r}}. \quad (9)$$

约化间距 \tilde{H} 以及自由能 \tilde{E}_{free} 可表示成

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \tilde{R} \cos \gamma_1 + \tilde{r} \sin \theta, \\ \tilde{E}_{\text{free}} &= \frac{E_{\text{free}} r_0}{2\kappa L} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\tilde{S}} d\tilde{s} \left[\left(\frac{\cos \psi}{\tilde{r}} - \frac{d\psi}{d\tilde{s}} \right)^2 + 1 \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

当 a-b 段部分管状膜未发生形变时同理可以根据 Helfrich 理论写出自由能

$$E_0 = 2L \int_0^S ds \left[\frac{\kappa}{2} \left(\frac{d\theta}{ds} \right)^2 + \sigma \right], \quad (11)$$

相应的约化自由能为

$$\tilde{E}_0 = \int_0^{\tilde{S}} d\tilde{s} \frac{d\theta}{d\tilde{s}} = \int_0^{\tilde{S}} d\tilde{s} \frac{\cos \psi}{\tilde{r}}. \quad (12)$$

这样 a-b 段管状膜的约化自由能差就可写为

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{E}_{\text{free}} &= \tilde{E}_{\text{free}} - \tilde{E}_0 \\ &= \int_0^{\tilde{S}} d\tilde{s} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\cos \psi}{\tilde{r}} - \frac{d\psi}{d\tilde{s}} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} - \frac{\cos \psi}{\tilde{r}} \right]. \end{aligned} \quad (13)$$

对于给定的约化间距 \tilde{H} , 结合约束关系式 (8) 和 (9) 对 (13) 式进行最小化处理, 可以得出形状函数 $\psi(s)$. 为此我们引入哈密顿正则方程并写出拉格朗日函数

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} \left(\frac{\cos \psi}{\tilde{r}} - \dot{\psi} \right)^2 + \frac{1}{2} - \frac{\cos \psi}{\tilde{r}} \\ &\quad + \lambda(\tilde{s}) [\dot{\tilde{r}} - \sin \psi(\tilde{s})], \end{aligned} \quad (14)$$

其中 $\lambda(\tilde{s})$ 是拉格朗日乘子, 对应的正则动量 P_ψ , P_r 有如下形式:

$$P_\psi(\tilde{s}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = \dot{\psi} - \frac{\cos \psi}{\tilde{r}}, \quad (15)$$

$$P_r(\tilde{s}) = \frac{\partial L}{\partial \dot{\tilde{r}}} = \lambda(\tilde{s}). \quad (16)$$

总哈密顿函数为

$$\begin{aligned} H' &= P_\psi \dot{\psi} + P_r \dot{\tilde{r}} - L \\ &= \frac{P_\psi^2}{2} + \frac{P_\psi \cos \psi}{\tilde{r}} + \frac{\cos \psi}{\tilde{r}} \\ &\quad - \frac{1}{2} + P_r \sin \psi, \end{aligned} \quad (17)$$

公式中的“.”表示该函数对 \tilde{s} 求一阶导数.

应用哈密顿正则方程可以将求解体系自由能差最小值的问题转化为求解包含 $\psi(\tilde{s})$, $P_\psi(\tilde{s})$, $P_r(\tilde{s})$, 以及 $\tilde{r}(\tilde{s})$ 四个函数的耦合微分方程组, 即

$$\frac{d\psi}{d\tilde{s}} = P_\psi + \frac{\cos \psi}{\tilde{r}}, \quad (18)$$

$$\frac{dP_\psi}{d\tilde{s}} = (P_\psi + 1) \frac{\sin \psi}{\tilde{r}} - P_r \cos \psi, \quad (19)$$

$$\frac{dP_r}{d\tilde{s}} = \frac{(P_\psi + 1) \cos \psi}{\tilde{r}^2}, \quad (20)$$

$$\frac{d\tilde{r}}{d\tilde{s}} = \sin \psi, \quad (21)$$

其边界条件是

$$\psi(0) = 0, P_\psi(0) = \xi, P_r(0) = \zeta, \tilde{r}(0) = 1. \quad (22)$$

上式中, ξ 和 ζ 是初始位置 $\tilde{s}=0$ 处的两个试射参数, 而在终点 $\tilde{s} = \tilde{S}$ 处管状膜与粒子相切, 可以在这个接触点导出两个有关粒子约化半径 \tilde{R} 和包络角 γ_1

的约束关系

$$\gamma_1 = \theta(\tilde{S}) - \psi(\tilde{S}) - \frac{5\pi}{9}, \quad (23)$$

$$\tilde{R} = \frac{\tilde{r}(\tilde{S}) \cos \theta(\tilde{S})}{\sin \gamma}, \quad (24)$$

$\theta(s)$ 是 $r(0)$ 和 $r(s)$ 的夹角, 可以通过对方程 (9) 求解得到.

为在数值上求解微分方程组 (18)–(21), 通常选用打靶法并结合初位置的边界条件 (22), 通过调整预设的试射参数 ξ 和 ζ 对微分方程组从 $\tilde{s}=0$ 到 $\tilde{s}=\tilde{S}$ 进行积分, 直到终点 $\tilde{s} = \tilde{S}$ 处的约束关系式 (23)–(24) 得到满足. 由数值解可得对应某约化间距 \tilde{H} 的形状函数 $\psi(s)$, 进而确定体系的自由能.

对已经发生吸附作用部分的管状膜即 b-c 段管状膜, 其结构已经确定并且膜的结构形状就是被吸附部分的粒子表面的形状. 一旦约化间距 \tilde{H} 确定, 则根据 Helfrich 理论, 相应的自由能差就可以很容易得到, 并写为如下形式:

$$\Delta \tilde{E}_{\text{contact}} = \tilde{w} \gamma_1 \tilde{R} + \frac{\gamma_1}{2\tilde{R}} + \frac{\gamma_1 \tilde{R}}{2} - \alpha. \quad (25)$$

此处引入约化吸附能, 其形式为 $\tilde{w} = w r_0^2 / \kappa$, 结合 (13) 式可得该部分体系总的约化自由能差

$$\Delta \tilde{E}_1 = \Delta \tilde{E}_{\text{free}} + \Delta \tilde{E}_{\text{contact}}. \quad (26)$$

求解体系总约化自由能差 (相对自由能) 的最小值就可以确定体系的稳定结构.

同理以 c-e 段管状膜为研究对象, 也可以应用 Helfrich 理论结合打靶法求解微分方程组得到对应某约化间距 \tilde{H} 的形状函数 $\psi(s)$ 、相应的体系约化自由能差 $\Delta \tilde{E}_2$ 以及相关参数.

3 结果与讨论

约化间距 \tilde{H} 是相变的特征量. 对于给定约化半径 \tilde{R} 的体系, 通过数值分析约化间距 \tilde{H} 的变化趋势可以对其相变进行讨论. 在约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 一定的情况下, 约化间距 \tilde{H} 是约化自由能差值的函数. 随着约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 增加到第一个临界值附近, 约化间距 \tilde{H} 的变化是连续的, 此时的相变被称为二级相变. 当约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 增加到第二个临界值附近, 约化间距 \tilde{H} 的变化为阶跃的, 则该处的相变是一级相变 [27,28].

3.1 二级相变

以 $\tilde{R} = 0.10$ 的体系为例. 当约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 较小时, 自由能差值存在最小值并且此时包络角 $\gamma_0=0$, 约化间距 $\tilde{H} = 1.10$, 体系处于自由状态即解吸附状态. 随着吸附能 $|\tilde{w}|$ 的增加, 体系达到第一个相变点, 即此时 $|\tilde{w}| = |\tilde{w}_0|$, 体系自由能差有唯一的最小值, 并且当约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 增加到这个临界值附近时, 约化间距 \tilde{H} 出现微小的变化.

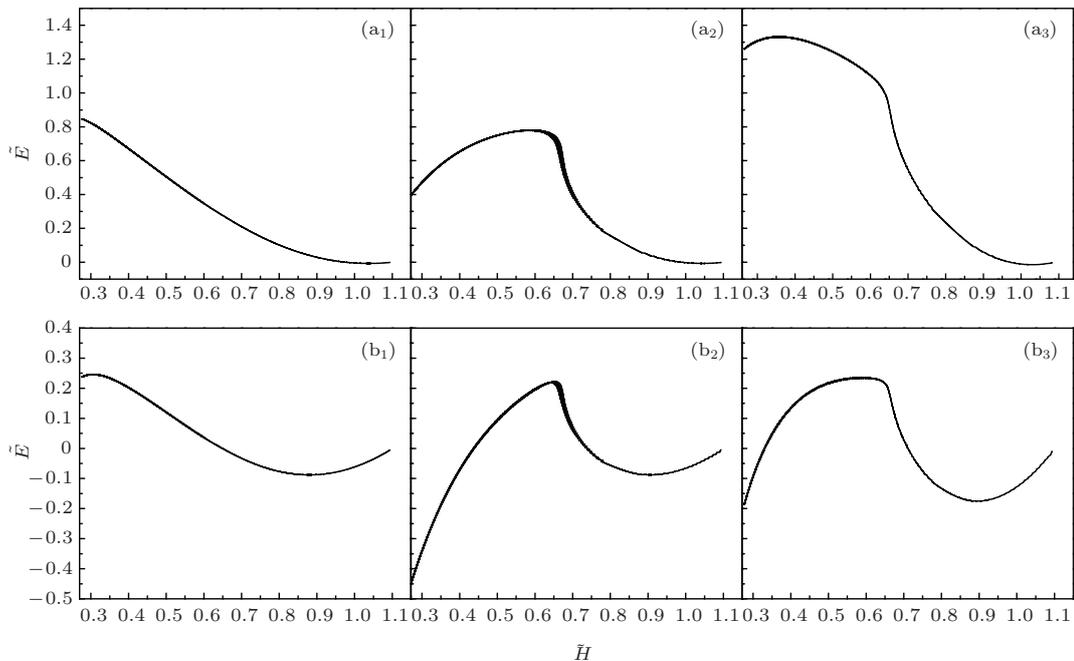


图 2 对于约化半径 $\tilde{R}=0.10$ 的双柱粒子体系, 体系在发生二级、一级相变时, a-c 段及其对称部分管状膜的约化间距与其约化自由能差的关系 (a₁), (b₁); 体系在发生二级、一级相变时, c-e 段及其对称部分管状膜的约化间距与其约化自由能差的关系 (a₂), (b₂); 体系在发生二级、一级相变时, 约化间距 \tilde{H} 与整个体系约化自由能差的关系 (a₃), (b₃)

分别以 a-c 段、c-e 段管状膜 (包括相应的对称部分) 为研究对象. 当吸附能 $|\tilde{w}| = 61.9$ 时, 可以做出约化间距 \tilde{H} 与约化自由能差 $\Delta\tilde{E}_1$ 和 $\Delta\tilde{E}_2$ 的关系图, 即图 2(a₁) 和 (a₂). 在相同的约化间距 \tilde{H} 条件下, 将这两部分的约化自由能差值相加可以得到整个体系的约化间距 \tilde{H} 与体系约化自由能差的关系图 (图 2(a₃)). 很明显约化自由能差存在惟一的最小值, 此处约化间距 $\tilde{H} = 1.041$. $\tilde{R} = 0.10$ 和 $|\tilde{w}_0| = 61.9$ 代表了二级相变的一个相边界点, 将 $|\tilde{w}_0|$ 和 \tilde{R} 描绘到图 3 中用方块表示. 对于其他约化半径 \tilde{R} 的体系可应用相同方法找到对应的 $|\tilde{w}_0|$ 进而描绘到 $|\tilde{w}|$ - \tilde{R} 参数空间. 该参数空间即体系的相空间, 并且整个空间被分为三部分, 分别是解吸附状态即解吸附相 (I)、弱吸附状态即弱吸附相 (II) 和深度吸附状态即深度吸附相 (III). 对于给定的吸附能 $|\tilde{w}_0| = 61.9$, 当 $\tilde{R} < 0.10$ 时体系处于解吸附状态, 而当 $0.10 < \tilde{R} < 0.105$ 体系处于弱吸附状态.

3.2 一级相变

相对于二级相变, 即随着约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 的增加, 约化间距 \tilde{H} 的变化是连续的, 在发生一级相变时, 约化间距 \tilde{H} 的变化是阶跃的. 对于给定的约化半径 \tilde{R} , 改变约化吸附能 $|\tilde{w}|$, 当吸附能增加到第二个相变关键点 $|\tilde{w}_1|$ 时, 在约化间距 \tilde{H} 与约化自由能差的关系图中可以发现, 约化自由能差存在两个近似相等的最小值, 即出现一级相变, 此时 $|\tilde{w}_1|$ 和 \tilde{R} 是体系发生一级相变的相边界点.

在 $\tilde{R}=0.10$ 的体系中, 分别以 a-c 段、c-e 段管状膜 (包括相应的对称部分) 为研究对象. 当约化吸附能 $|\tilde{w}| = 65.6$ 时, 可以做出约化间距 \tilde{H} 与约化自由能差的关系图, 即图 2(b₁) 和 (b₂). 在相同的约化间距 \tilde{H} 条件下, 将这两部分的约化自由能差相加可以得到约化间距 \tilde{H} 与整个体系约化自由能差的关系图 (图 2(b₃)). 从图中可以看出, 在 $\tilde{H} = 0.892$ 以及 $\tilde{H} = 0.278$ 附近约化自由能差存在两个近似相等的最小值. 约化间距 $\tilde{H} = 0.892$ 表示体系的稳定结构是弱吸附状态. 随着约化间距的减小, 约化自由能差逐渐增大并达到一个峰值, 然后减小到第二个最小值, 此时对应较小的约化间距 $\tilde{H} = 0.278$, 表示体系处于深度吸附状态. 约化自由能差值的能垒把体系分为弱吸附和深度吸附两个状态, 从而导致相变的不连续性. 此时 $\tilde{R} = 0.10$ 和 $|\tilde{w}_1| = 65.6$ 代

表了一级相变的一个相边界点, 描绘到图 3 中用圆点表示. 对于其他的约化半径 \tilde{R} 可应用相同方法找到对应的 $|\tilde{w}_1|$ 并描绘到 $|\tilde{w}|$ - \tilde{R} 参数空间, 从而得到体系的一级相变曲线. 很明显对于吸附能临界值 $|\tilde{w}_1| = 65.6$, 当 $\tilde{R} > 0.105$ 时体系处于深度吸附状态. 正如我们所知, 体系的相变被排体效应所控制^[29], 包括管状膜与粒子之间、粒子与粒子之间以及管状膜之间的排体效应. 而当约化间距 $\tilde{H} < 0.278$ 时, 上下两部分管状膜已经彼此嵌入, 所得的约化间距 \tilde{H} 与约化自由能差即 $\tilde{H} - \Delta\tilde{E}$ 曲线已无实际意义.

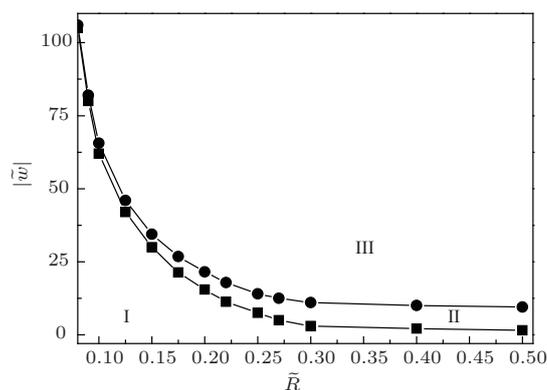


图 3 双柱粒子体系的相图, 其中由方块所描绘的曲线是分隔解吸附状态 (I) 与弱吸附状态 (II) 的相边界即二级相变曲线. 由圆点所描绘的曲线是分隔弱吸附相 (II) 和深度吸附相 (III) 的相边界线即一级相变曲线

因为在管状膜与柱粒子发生相互作用前, 管状膜的界面为圆, 此时体系约化自由能差最小并且管状膜将会维持该状态. 当约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 增加到第一个相变临界值, 此时吸附能相对较小, 对体系总自由能差贡献也较小, 弱吸附状态约化自由能差为最小. 弱吸附状态较其他状态更为稳定并且包络角 γ 较小. 体系从自由状态 (即解吸附状态) 转变到弱吸附状态时, 管状膜的横截面经历一个微小的变化. 图 4(a₁)—(a₃) 给出了对应不同约化半径 \tilde{R} 的体系处于弱吸附状态的结构图. 对给定约化半径 \tilde{R} , 当约化吸附能 $|\tilde{w}|$ 较大时, 吸附能对体系总约化自由能差贡献较大, 从而约化吸附能会使管状膜最大程度地包络粒子; 从弱吸附状态到深度吸附状态转变的过程中约化间距有一个阶跃性的改变, 此时柱粒子几乎被全部包络到管状膜中, 体系的平衡构型已经与初始状态截然不同. 图 4(b₁)—(b₃) 给出的是对应不同约化半径 \tilde{R} 的体系处于深度吸附状态的结构图.

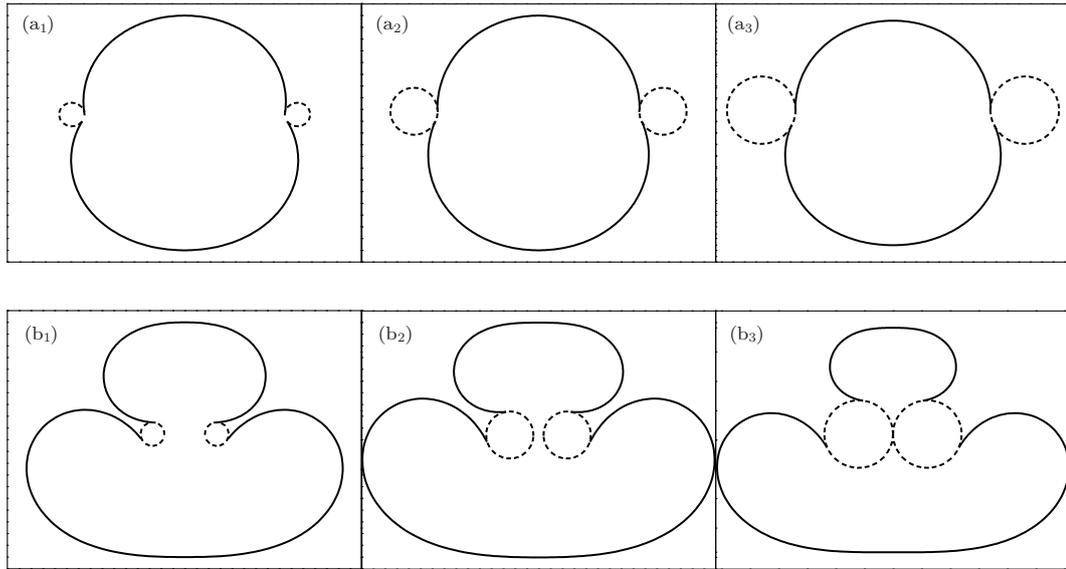


图4 对应于 $\tilde{R} = 0.10, 0.20$, 以及 0.30 的体系处于弱吸附状态 ((a₁)—(a₃)) 和深度吸附状态 ((b₁)—(b₃)) 的体系结构图, 其中虚线表示柱状胶体粒子, 实线表示发生形变的管状生物膜

3.3 双柱粒子与管状膜相对位置的不同对相变的影响

图5给出的是对应于 $\tilde{R} = 0.20$ 的体系处于弱吸附状态和深度吸附状态的结构图, 其中图5(a₁), (b₁)表示体系 O₁-O₂ 连线与纵轴夹角为 80° 时体

系所处的弱吸附状态和深度吸附状态的结构图. 图5(a₂), (b₂)表示 O₁-O₂ 连线与纵轴夹角为 85° 时体系所处的弱吸附状态和深度吸附状态的结构图. 图5(a₃), (b₃)表示 O₁-O₂ 连线与纵轴夹角为 90° 时体系所处的弱吸附状态和深度吸附状态的结构图.

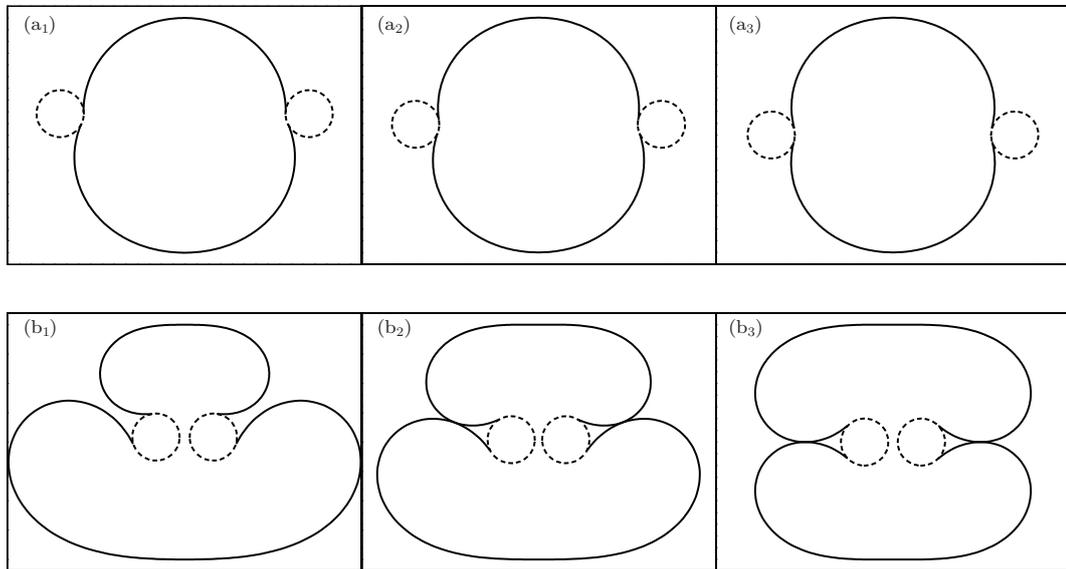


图5 对应于 $\tilde{R} = 0.20$ 的体系处于弱吸附状态 ((a₁)—(a₃)) 和深度吸附状态 ((b₁)—(b₃)) 的结构图, 其中虚线表示柱状胶体粒子, 实线表示发生形变的管状生物膜

通过对弱吸附状态体系包裹角的分析发现, 对 O₁-O₂ 连线与纵轴夹角 $\theta = 80^\circ$ 的弱吸附状态 (图5(a₁)), 柱粒子被管状膜的上下两部分所包裹的角度分别为 $\gamma_1 = 11.00^\circ$, $\gamma_2 = 13.86^\circ$. 对

于 O₁-O₂ 连线与纵轴夹角 $\theta = 85^\circ$ 的弱吸附状态 (图5(a₂)), 体系的包裹角分别为 $\gamma_1 = 14.03^\circ$, $\gamma_2 = 15.52^\circ$. 对于 O₁-O₂ 连线与纵轴夹角 $\theta = 90^\circ$ 的弱吸附状态 (图5(a₃)), 体系的包裹角为 $\gamma = 15.98^\circ$.

进一步对深度吸附状态时体系包络角的分析发现, 在 O_1-O_2 连线与纵轴夹角 $\theta = 80^\circ$ 的深度吸附状态(图 5(b₁)), 柱粒子被管状膜的上下两部分所包络的角度分别为 $\gamma_1 = 105.13^\circ$, $\gamma_2 = 145.70^\circ$. O_1-O_2 连线与纵轴夹角 $\theta = 85^\circ$ 的深度吸附状态(图 5(b₂)), 体系的包络角分别为 $\gamma_1 = 121.00^\circ$, $\gamma_2 = 138.42^\circ$. O_1-O_2 连线与纵轴夹角 $\theta = 90^\circ$ 的深度吸附状态(图 5(b₃)), 体系的包络角为 $\gamma = 127.82^\circ$.

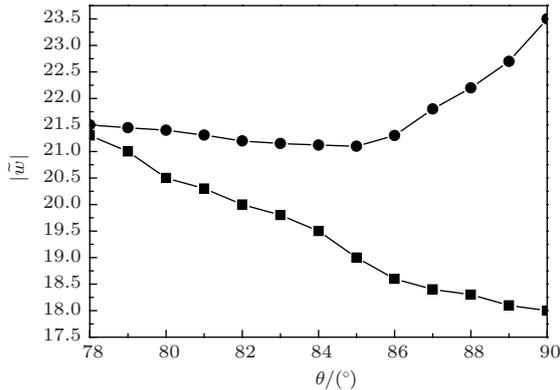


图 6 对应于 $\tilde{R}=0.20$ 的体系处于弱吸附状态(方块所示的曲线)和深度吸附状态(圆点所示的曲线)时单位面积吸附能的绝对值与夹角 θ 的关系图

通过上述分析可以发现, 双柱粒子与管状膜相对位置的不同会导致体系弱吸附状态和深度吸附状态相应包络角(即柱粒子被管状膜的上下两部分所包络的角度之和)变化趋势的差异. 对于弱吸附状态, 包络角随着 O_1-O_2 连线与纵轴的夹角 θ 的变大而增加; 为使相应的约化自由能差最小, 单位面积吸附能的绝对值必须随着夹角 θ 的变大而减小(即图 6 中方块所示的曲线). 对于深度吸附状态, 包络角随着夹角 θ 的变大先缓慢增加, 当夹角 θ 超过 85° 时, 又随着夹角 θ 的变大而逐渐减小. 为使相应的约化自由能差最小, 单位面积吸附能的绝对值必须随着夹角 θ 的变大先减小后增加(即图 6 中圆点所示的曲线).

研究还发现, 当夹角 θ 小于 78° 时, 体系弱吸附状态和深度吸附状态单位面积吸附能的绝对值近似相等, 这表明在 θ 小于 78° 时, 体系已经无法区分弱吸附状态和深度吸附状态.

4 结 论

本文应用 Helfrich 理论模型研究了双柱胶体粒子与管状生物膜的相互作用. 通过对体系总约化自

由能差的分析得到了体系存在的三个相, 即解吸附相、弱吸附相以及深度吸附相, 同时伴随有连续和不连续的两个相变即二级相变和一级相变. 并且双柱粒子与管状膜相对位置的不同会对体系相变及其结构产生不同的影响. 计算所得的相图可为分析某些生物单元的结构转变, 例如病毒与细菌的相互作用或纳米颗粒与细胞的相互作用, 提供理论借鉴. 对于双柱粒子与管状膜相互作用体系, 由于打靶法的局限性, 在约化半径 \tilde{R} 大于 0.30 时, 对应的两个初始试射参数 ξ 和 ζ 不再稳定从而使相关计算难以进行; 另外, 对于诸如双柱粒子与管状膜非平行相互作用时体系的结构将如何改变等问题, 在数值求解上仍具有一定的挑战性. 这类问题的解决将大大丰富我们的研究内容.

参考文献

- [1] Lodish H, Berk A, Zipursky S L, Matsudaira P, Baltimore D 2000 *Molecular Cell Biology* (W. H. Freeman and Company New York) p235
- [2] Pietiainen V, Marjomaki V, Upla P, Pelkmans L, Helenius A 2004 *Mol. Biol. Cell* **15** 4911
- [3] Sieczkarski S B, Whittaker G R 2002 *J. Gen. Virol.* **83** 1535
- [4] Singer S J, Nicolson G L 1972 *Science* **175** 720
- [5] Helfrich W, Servuss R M 1984 *Nuovo Cimento D* **3** 137
- [6] Helfrich W 1973 *Z. Naturforsch* **28** C 693
- [7] Ou-Yang ZC, Helfrich W 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2486
- [8] Ou-Yang ZC, Helfrich W 1989 *Phys. Rev. A* **39** 5280
- [9] Tu Z C, Ou-Yang Z C 2003 *Phys. Rev. E* **68** 061915
- [10] Zhou S H, Zhang Z G 2006 *Acta. Phys. Sin.* **55** 5568 (in Chinese)[周晓华, 张昭光 2006 物理学报 **55** 5568]
- [11] Tu Z C 2013 *Chin. Phys. B* **22** 028701
- [12] Niu Y Q, Wei W, Zheng B, Zhang C X, Meng Q T 2013 *Chin. Phys. B* (in press)
- [13] Zheng B, Meng Q T 2012 *College Physics* **31** 9 (in Chinese) [郑斌, 孟庆田 2012 大学物理 **31** 9]
- [14] Smith A S, Sackmann E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 208101
- [15] Peng Y G, Zheng Y J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 088701 (in Chinese)[彭勇刚, 郑雨军 2011 物理学报 **60** 088701]
- [16] Pang X Q, Yang M J, Han K L 2013 *Proteins* **81** 1399
- [17] Deserno M 2004 *Phys. Rev. E* **69** 031903
- [18] Müller M M, Deserno M 2007 *Phys. Rev. E* **76** 011921
- [19] Deserno M, Gelbart W M 2002 *J. Phys. Chem. B* **106** 5543
- [20] Chen Jeff Z Y 2010 *Phys. Rev. E* **82** 060801
- [21] Chen Jeff Z Y 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 088302
- [22] Chen Jeff Z Y, Liu Y, Liang H J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 168103
- [23] Cao S Q, Wei G H, Chen Jeff Z Y 2011 *Phys. Rev. E* **84** 050901

- [24] Mkrtchyan S, Ing C, Chen Jeff Z Y 2010 *Phys. Rev. E* **81** 011904
- [25] Chen Jeff Z Y, Mkrtchyan S 2010 *Phys. Rev. E* **81** 041906
- [26] Das J and M Jack 1976 *Proc. Natl. Acad. Sci. of the US A* **73** 1489
- [27] Paczuski M, Kardar M 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 2638
- [28] Koibuchi H and Kuwahata T 2005 *Phys. Rev. E* **72** 026124
- [29] Lu S Q, Liu J X 2006 *The Introduction to Soft Matter Physics* (Beijing: Peking University Press)p29 (in Chinese) [陆坤权, 刘寄星 2006 软物质物理学导论 (北京: 北京大学出版社) 第 29 页]

The adhesion of two cylindrical colloids to a tubular membrane*

Niu Yu-Quan Zheng Bin Cui Chun-Hong Wei Wei Zhang Cai-Xia Meng Qing-Tian[†]

(College of Physics and Electronics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China)

(Received 4 October 2013; revised manuscript received 23 October 2013)

Abstract

The adhesion of two cylindrical colloids to a tubular membrane is investigated theoretically in terms of the full treatment of Helfrich model. By analyzing the free energy of the system, it is found that this adhesion can produce both shallow wrapping with relatively small wrapping angle and deep wrapping with big wrapping angle. A second-order adhesion transition from the desorbed to weakly adhered state is found, and a first-order phase transition where the cylindrical colloids undergo an abrupt transition from weakly adhered to strongly adhered state can be obtained as well. Different relative positions between rigid cylinders and membrane tube will affect the phase transition and structure of the system.

Keywords: Helfrich model, phase transition, free energy, tubular membrane

PACS: 87.15.-v, 68.47.Pe, 82.35.Gh

DOI: 10.7498/aps.63.038701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11074151), and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB808100).

[†] Corresponding author. E-mail: qtmeng@sdmu.edu.cn