

用弛豫法探寻新的双开口膜泡

孔祥波 张劭光

Exploring new opening-up membrane vesicles of two holes by using the relaxation method

Kong Xiang-Bo Zhang Shao-Guang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 068701 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.068701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.068701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I6>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

磁驱动准等熵加载下 Z 切石英晶体的折射率

Refractive index of Z-cut quartz under magnetically driven quasi-isentropic compression

物理学报.2016, 65(4): 046201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.046201>

La<sup>3+</sup> 存在形式对白云鄂博稀选尾矿微晶玻璃性能的影响

Effect of existence form of La<sup>3+</sup> on the properties of the Bayan Obo Mine tailing glass ceramics

物理学报.2015, 64(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.196201>

高密度氦相变的分子动力学研究

Molecular dynamics study on the phase transition of high density helium

物理学报.2015, 64(1): 016202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016202>

铁钛共掺强韧化蓝宝石晶体的研究

A method to strengthen and toughen Sapphire by codoping of Fe/Ti ions

物理学报.2013, 62(6): 066201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.066201>

<100> LiF 的低压冲击响应和 1550 nm 波长下的窗口速度修正

Elastic-plastic response of shocked <100> LiF and its window correction at 1550 nm wavelength

物理学报.2012, 61(15): 156202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.156202>

## 用弛豫法探寻新的双开口膜泡\*

孔祥波 张劭光†

(陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710119)

(2015年11月9日收到; 2015年12月31日收到修改稿)

基于面积差弹性模型, 用弛豫法探寻满足开口膜泡边界条件的欧拉-拉格朗日方程组的新解, 得到了双开口的哑铃形分支解, 并结合以前得到的单开口哑铃形及闭合哑铃形, 对它们之间的相变进行了深入的研究. 为了探究实验上是否可能发现这些形状, 与以往实验上观察到的较小约化弛豫面积差的杯形、管形、烟囱形开口形状的能量进行了比较, 发现这些新形状在较大的约化弛豫面积差值时, 在某些线张力区间比以往发现的形状能量更低. 另外为了对比, 本文对于实验上已知的杯形、管形、烟囱形及球形之间的相变行进行了探讨, 并对两者之间的不同特点进行了对比.

**关键词:** 面积差弹性模型, 弛豫法, 开口膜泡, 数值计算

**PACS:** 87.16.D-, 82.70.Uv

**DOI:** 10.7498/aps.65.068701

## 1 引言

双亲分子在水溶液中会自发形成双层膜, 在分子浓度较低时, 双层膜会形成闭合的膜泡. 这种人造膜泡被认为是生物膜的简化模型. 以往人们普遍认为闭合膜泡才是稳定的, 然而1982年, Lieber和Steck<sup>[1,2]</sup>发现正常情况下闭合的成熟红细胞在实验上存在开口现象. 随后Saitoh等<sup>[3]</sup>在实验中通过向水溶液中类脂膜泡加入一定浓度的类膜性质的蛋白质Talin分子, 观察到了一些杯形、管状形和烟囱等形状的开口膜泡. 他们发现通过改变Talin分子的浓度, 可以改变膜泡开口口径的大小. 以往人们也尝试着通过渗透压震扰<sup>[4]</sup>、光镊<sup>[5]</sup>、电穿孔等<sup>[6]</sup>方法在膜泡上打开一个临时的小孔, 以尝试通过类脂膜泡来运输药物和DNA. 所以开口膜泡的研究在生物学和医学上也有重大意义.

近些年, 理论上的研究也有很大的进展. Capovilla等<sup>[7]</sup>首先用场论方法给出了一般情况下开口膜泡的形状方程和边界条件, Tu和Ouyang<sup>[8]</sup>将外微分法用于处理曲面上的问题, 亦给出了自

发曲率(SC)模型下的形状方程和边界条件. 最近Li和Zhang<sup>[9]</sup>利用欧阳双凹盘形及周期性结点解构造出了开口的管形拓扑解. 而Umeda和Suezaki<sup>[10]</sup>则基于面积差弹性(ADE)模型首次用弛豫法数值计算得到了一些能够与实验上观察到的形状对应的球形附近的一些开口膜泡形状. 但是他们的计算局限在约化弛豫面积差 $\Delta a_0$ 较小的区域, 他们的相图虽然给出了 $\Delta a_0 = 1.5$ 的区域, 但他们认为该区域的稳定形状都是闭合球形. 我们小组以往的研究中用打靶法证实了在较大 $\Delta a_0$ 时存在比球形能量更低的单开口的哑铃形状<sup>[11,12]</sup>. 但是否存在双开口的哑铃形, 目前仍是一个没有解决的问题; 双开口哑铃形开口膜泡的形状随线张力系数等物理量的变化规律也不清楚.

本文基于ADE模型, 用弛豫法数值探寻哑铃形附近的双开口膜泡. 在文章的第二部分简述了双开口膜泡的欧拉-拉格朗日方程组和两端须满足的边界条件. 第三部分讨论了数值计算得到的新的双开口膜泡形状. 我们发现弛豫法能有效地求解该类问题, 进而讨论了双开口的哑铃形与其他形状的相变关系.

\* 中央高校基本科研业务费专项资金(批准号:GK201302011)和国家自然科学基金(批准号:10374063)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangsg@snnu.edu.cn

## 2 理论基础

### 2.1 ADE模型

因为双层膜的厚度远小于膜泡的线度, 可将生物膜看成二维曲面  $\Sigma$ , 其边缘的闭合曲线记为  $\partial\Sigma$ . 膜泡的曲率能  $F_c$  可写为

$$F_c = \frac{1}{2}k_c \iint_{\Sigma} (C_1 + C_2 - C_0)^2 dA + k_g \iint_{\Sigma} K dA, \quad (1)$$

其中  $k_c$  和  $k_g$  分别是局域弯曲模量和高斯弯曲模量,  $C_0$  为自发曲率,  $C_1$  和  $C_2$  是三维空间中曲面上的任意一点的两个主曲率. 因而平均曲率  $H = \frac{1}{2}(C_1 + C_2)$ , 高斯曲率  $K = C_1 C_2$ . 对该曲率能在给定面积  $A$  和体积  $V$  的约束下做变分, 即得到闭合膜泡的平衡形状, 这就是膜泡的SC模型<sup>[13]</sup>. SC模型认为由于膜两面的不对称性(双亲分子的不对称性及膜两侧化学环境的不对称性), 膜有一自发弯曲的倾向, 用  $C_0$  描述该不对称性.

在ADE模型<sup>[14]</sup>中, 膜泡双层之间的不对称性起源于双层之间的面积差  $\Delta A$ , 该面积差有一弛豫值  $\Delta A_0$ (或初始值). 当双层之间的实际面积差  $\Delta A$  偏离该值时, 将有一附加的能量

$$F_{el} = \frac{\bar{k}_{el}}{2} \frac{\pi}{AD^2} (\Delta A - \Delta A_0)^2, \quad (2)$$

称为面积差弹性能. 其中常数  $\bar{k}_{el}$  是非局部弹性模量,  $D$  是两层膜泡间的间距. 因为  $D$  远小于膜泡尺度,  $\Delta A$  可以由下式计算得到

$$\Delta A = 2D \iint_{\Sigma} H dA. \quad (3)$$

对于开口膜泡, 在开口处还有一线张力能

$$F_{\gamma} = \gamma \oint_{\partial\Sigma} dl, \quad (4)$$

式中积分代表对边界的积分,  $\gamma$  是线张力系数.

在ADE模型中, 开口膜泡的总能量  $F$  由曲率能  $F_c$ 、弹性能  $F_{el}$  和开口处线张力能  $F_{\gamma}$  三部分构成, 即  $F = F_c + F_{el} + F_{\gamma}$ ,

$$F = \frac{1}{2}k_c \iint_{\Sigma} (C_1 + C_2)^2 dA + k_g \iint_{\Sigma} K dA + \frac{\bar{k}_{el}}{2} \frac{\pi}{AD^2} (\Delta A - \Delta A_0)^2 + \gamma \oint_{\partial\Sigma} dl. \quad (5)$$

对该能量在给定面积  $A$  和体积  $V$  的约束下做变分, 即得到闭合膜泡的平衡形状.

我国物理学家 Ouyang 与 Helfrich<sup>[15]</sup> 最先得到了SC模型闭合膜泡的普遍形状方程. 该方程亦适用于其他模型. 对开口膜泡而言, 膜泡的形状方程在非边界处与闭合膜泡完全一样, 不过在边界处要附加额外的边界条件<sup>[7,8]</sup>. 该方程为高阶非线性偏微分方程, 很难解析求解, 也没有数值积分的一般方法. 另一方面, 在实验中经常观察到旋转对称性的形状, 这时相应的欧拉-拉格朗日方程变为一常微分方程, 可以数值求解. 下面简要讨论旋转对称性开口膜泡的形状方程和边界条件.

### 2.2 旋转对称性开口膜泡的形状方程和边界条件

旋转对称性形状可看成一条平面曲线绕  $z$  轴旋转得到, 以两端开口的形状为例, 曲线的参数如图1所示.  $r$  代表曲线上一点到  $z$  轴的距离, 为了方便通常引入参数  $\psi$ , 即曲线切线与水平线的夹角, 因而有  $\tan \psi = \frac{dz}{dr}$ .  $s_1$  是曲线一端处的弧长(本文中取  $s_1 = 0$ ),  $s_2$  是曲线另一端处的弧长.  $r_0$  是旋转对称膜泡开口处的半径, 若膜泡为单开口膜泡,  $r_0 = r(s_2)$ ; 若膜泡为双开口膜泡,  $r_0 = r(s_2) + r(s_1)$ ; 若膜泡为闭合膜泡,  $r_0 = 0$ . 平均曲率和高斯曲率可写为

$$H = \frac{1}{2} \left( \dot{\psi} + \frac{\sin \psi}{r} \right), \quad (6)$$

$$K = \dot{\psi} \frac{\sin \psi}{r}, \quad (7)$$

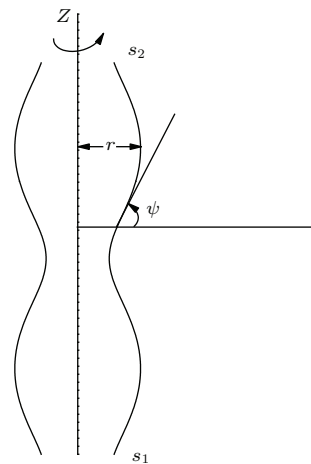


图1 旋转对称开口泡参数图示

Fig. 1. Schematic picture of the opening-up vesicle.

其中  $\psi$  和本文中其他物理符号上的点代表对弧长求导数. 引入约化半径  $R_0 = \left(\frac{A}{4\pi}\right)^{1/2}$ , 则约化面积差可定义为

$$\begin{aligned} \Delta a &= \frac{\Delta A}{8\pi DR_0} \\ &= \frac{1}{4\pi R_0} \iint_{\Sigma} H dA = \frac{1}{2R_0} \int_{s_1}^{s_2} rH ds. \end{aligned} \quad (8)$$

而约化弛豫面积差  $\Delta a_0 = \frac{\Delta A_0}{8\pi DR_0}$ , 则膜泡总能量可写为

$$\begin{aligned} \hat{F} &= \int_{s_1}^{s_2} 2\pi r [2H^2 + \hat{k}_g K] ds + 8\alpha\pi^2 (\Delta a - \Delta a_0)^2 \\ &\quad + 2\pi\hat{\gamma}r_0, \end{aligned} \quad (9)$$

其中

$$\hat{F} = \frac{F}{k_c}, \quad \hat{k}_g = \frac{k_g}{k_c}, \quad \alpha = \frac{\bar{k}_{el}}{k_c}, \quad \hat{\gamma} = \frac{\gamma}{k_c}.$$

在给定的面积约束的情况下, 开口膜泡的形状方程可由

$$\delta(\hat{F} + \lambda A) = 0 \quad (10)$$

得到, 其中  $\lambda$  是保持面积约束的拉格朗日乘子. 一般情况下非边界处膜泡的方程为 [7,8]

$$\Delta H + 2H(H^2 - K) + C_0 K - \lambda H = 0, \quad (11)$$

$\Delta$  是拉普拉斯算子. 因为在开口情况下, 没有体积取固定值这个约束, 该方程和闭合膜泡的 Ouyang-Helfrich 方程 [15] 在膜内外渗透压  $\Delta P = 0$  情况下的形式完全一样. 而在边界处, 开口膜泡还须满足以下边界条件

$$2H - C_0 + \hat{k}_g \frac{\sin \psi}{r} = 0, \quad (12a)$$

$$2\dot{H} + \hat{\gamma} \frac{\sin \psi}{r} = 0, \quad (12b)$$

$$2H(H - C_0) + \hat{k}_g K + \lambda + \hat{\gamma} \frac{\cos \psi}{r} = 0. \quad (12c)$$

从 (11) 和 (12) 式可以看出参数  $\hat{\gamma}$  和  $\hat{k}_g$  只在边界条件中出现, 但仍对膜泡平衡时的形状有重要影响. Tu [16] 注意到 (12) 式中的三个条件只有两个是独立的. 而 (11) 式虽然是在 SC 模型下推出的, 但只要注意到关系 [14]

$$c_0 = 2\pi\alpha(\Delta a_0 - \Delta a), \quad (13)$$

则它对 ADE 模型也适用, 其中约化自发曲率  $c_0$  与 (1) 式中的  $C_0$  的关系为  $c_0 = C_0 R_0$ .

开口膜泡的形状方程是一个自由边界问题, 即自变量弧长的取值范围不是固定的, 而是需要

根据边界条件确定, 因而需要把它转化为标准两点边界值问题来求解. 因此引入一个新的自变量  $t = \frac{s - s_1}{s_2 - s_1}$ ,  $s$  为弧长,  $s_1$  是积分起始点,  $s_2$  是积分的终点, 即自由边界点, 如此引入的参数  $t$  则始终在区间  $0 \leq t \leq 1$ , 因而变成固定边界值问题. 引入新的因变量  $l$  代表曲线总的弧长, 则  $l = s_2 - s_1$ ,  $dl/dt = 0$ . 如取膜泡总面积  $A = 4\pi$ , 则约化半径  $R_0 = 1$ . 将 (6), (7) 和 (9) 式代入 (11) 式, 再结合前面提到的其他关系, 得到膜泡平衡时的欧拉-拉格朗日形状方程组:

$$\begin{cases} \psi' = l \left( 2H - \frac{\sin \psi}{r} \right), & H' = l \frac{N \sin \psi}{2r}, \\ N' = l \left[ \frac{\cos \psi}{r} N + 2(2H - c_0) \left( H - \frac{\sin \psi}{r} \right) \right], \\ r' = l \cos \psi, & z' = l \sin \psi, & A' = 2\pi r l, \\ \Delta a' = \frac{1}{2} l H r, & c_0' = 0, & l' = 0. \end{cases} \quad (14)$$

其中为计算方便, 引入了新的函数

$$N = \frac{r}{\cos \psi} \left[ -H \left( \psi - \frac{\sin \psi}{r} \right) - c_0 \frac{\sin \psi}{r} + \lambda \right]. \quad (15)$$

(14) 式中的物理符号右上角的撇表示对  $t$  求导.

在实际计算中膜泡所要满足的边条件, 可用方程组 (12) 中的两个, 正如黄聪和张劭光 [12] 在计算中所做的. 利用方程组 (12) 及方程 (11) 可以证明 (15) 式中引入的函数  $N$  在边界处满足以下条件 [10]:

$$N(t_b) = -\hat{\gamma}, \quad (16)$$

因此我们采用的边界条件是与方程组 (12) 等价的 (12a) 及 (16) 式.

由此可得单开口膜泡的边界条件, 在  $t = 0$  处为

$$\psi(0) = 0, \quad r(0) = 0, \quad (17)$$

(16) 式是旋转对称性的封闭的南极端应满足的条件.

$$z(0) = 0, \quad A(0) = 0, \quad \Delta a(0) = 0. \quad (18)$$

在  $t = 1$  处为

$$\begin{aligned} A(1) &= 4\pi, \\ \Delta a(1) &= \Delta a_0 - \frac{c_0}{2\pi\alpha}, \end{aligned} \quad (19)$$

由于 Helfrich 变分问题具有标度不变性, 我们在计算时设定膜泡的面积为  $4\pi$ . 并且利用条件 (13), 计



算弛豫面积差为  $\Delta a_0$  的膜泡.

$$H(1) = \frac{1}{2} \left( c_0 - \hat{k}_g \frac{\sin \psi}{r} \right),$$

$$N(1) = -\hat{\gamma}. \quad (20)$$

由于条件 (16), 边界条件 (20) 式是与方程组 (12) 中的任两个等价的条件. 双开口膜泡的边界条件只需将  $t = 0$  处的条件 (17) 式改为

$$H(0) = \frac{1}{2} \left( c_0 - \hat{k}_g \frac{\sin \psi}{r} \right),$$

$$N(0) = \hat{\gamma}, \quad (21)$$

$t = 0$  处的其他条件与 (18) 式一致, 而  $t = 1$  处的条件与 (19) 和 (20) 式一致; 闭合膜泡的边界条件只须将  $t = 1$  处的条件 (20) 改为

$$\psi(1) = 0, \quad r(1) = 0, \quad (22)$$

$t = 1$  处的其他条件与 (19) 式一致, 而  $t = 0$  处的条件与 (17) 和 (18) 式一致.

### 3 数值计算结果和新的双开口膜泡解

#### 3.1 $\Delta a_0$ 值较小时膜泡的相变

在以往的研究中我们曾得到单开口的哑铃形 [11], 并尝试用打靶法去求解两端开口的哑铃形膜泡, 没有成功, 原因在于打靶法求解时, 对边条件要求很严, 初始参数的猜测如果距真实值较远, 就无法给出解. 因而我们尝试用弛豫法来求解该问题. 求解过程中主要步骤为: 将微分方程写成相应的差分方程、给出满足或大概满足差分方程和边界条件的膜泡的初始形状作为猜测值 (试验解)、通过牛顿迭代法得出满足预设精度的有限差分方程的解, 即常微分方程的解. 关于弛豫法的详细介绍可以参看有关文献 [17, 18].

我们首先对  $\Delta a_0$  取值较小时的形状进行了计算. 发现在  $\Delta a_0 < 1.23$  时, 会得到多支接近球形的开口膜泡解, 如闭合球形 (sphere) 膜泡、单开口的杯形 (cup) 膜泡和双开口的管形 (tube) 膜泡及烟囱形 (funnel) 膜泡, 这与以往的计算结果是一致的 [10]. 下面我们以  $\Delta a_0 = 0.76$  求解膜泡的欧拉-拉格朗日方程组得到的结果为例, 讨论  $\Delta a_0$  值较小时膜泡的相变.

以往在研究闭合膜泡时, 人们倾向于先给出各分支解, 然后给出相同参数下各分支解能量最小的区域, 得出所谓相图. 通常认为不同的形状在同一

给定的参数下, 总能量最低的形状更容易出现, 因而给出相图是有参考意义的. 当然一支解的形状比另一支解的能量高时, 并不意味着这支解已经失稳, 它还可以作为亚稳态存在, 因而研究各支解的稳定区域及稳定相图也是很重要的, 这是更困难的课题. 在讨论某参数下能量最低的膜泡的形状时, 须比较各分支解的能量的高低. 在当前参数下, 两端开口的形状有两支, 分别是上下对称的管形 (因而两端口径相同) 和上下不对称的烟囱形 (因而两端口径不同), 它们的能量与杯形膜泡相差很小, 不易通过图形直观地表现出来, 因而我们以杯形的能量为基准, 即 cup 形状的能量在所有参数下都取为零, 即图 2 (a) 中水平基准线代表杯形膜泡的能量. 而图 2 (a) 中其他形状的能量是减去杯形能量值的结果. 关于杯形膜泡能量的实际值随线张力系数的变化情况, 可参看图 2 (b).

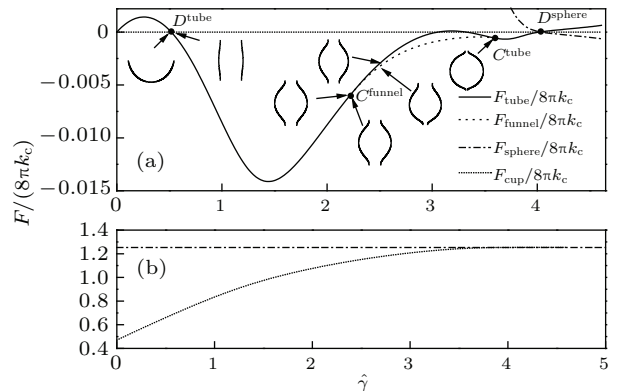


图2  $\Delta a_0 = 0.76$  时, 不同形状的能量随约化线张力系数  $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$  的变化 (a) 管形、烟囱形、球形、和杯形膜泡的相对能量随  $\hat{\gamma}$  的变化, 图中亦给出了一些典型的杯形 ( $\hat{\gamma} = 0.517$ )、管形 ( $\hat{\gamma} = 0.517, 2.218, 2.50$ ) 和烟囱形 ( $\hat{\gamma} = 2.218, 2.50, 3.599$ ) 的形状; 为了在一张图中表示出各形状的能量大小, 图中杯形能量取为零, 其他分支解的能量是减去杯形的能量得到的; (b) 杯形的实际能量随约化线张力系数的变化

Fig. 2. Energies of different shapes as functions of the reduced line tension  $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$  when  $\Delta a_0 = 0.76$ : (a) Relative energies of tube, funnel, sphere and cup shapes as functions of  $\hat{\gamma}$ , the figure also shows some typical cup ( $\hat{\gamma} = 0.517$ ), tube ( $\hat{\gamma} = 0.517, 2.218, 2.50$ ) and funnel ( $\hat{\gamma} = 2.218, 2.50, 3.599$ ) shapes; in order to show the energy difference for various branches of solutions, the energy of cup shapes are taken as zero, and the energy of other branches are obtained by subtracting the energy of cup shapes; (b) the actual energy of cup shapes as a function of the reduced line tension.

从图 2 (a) 可以看出,  $0 < \hat{\gamma} < 0.517$  时, 杯形的能量是最低的, 稳定的形状为杯形. 在点  $D^{\text{tube}}(\hat{\gamma} = 0.517)$  处, 管形膜泡的能量开始低于杯

形膜泡, 管形的能量变得最低, 稳定的形状从杯形不连续的跳变为管形. 在点  $C^{\text{funnel}}(\hat{\gamma} = 2.218)$  处, 管形分岔出另一支上下开口不对称的烟囱形解, 而且能量开始比管形能量更低, 稳定的形状从管形连续转变为烟囱形. 随着  $\hat{\gamma}$  值的增大, 管形两开口的口径以相同的速度变小, 而烟囱形两开口的口径以不同的速度变小. 到点  $C^{\text{tube}}(\hat{\gamma} = 3.599)$  处, 烟囱形的两开口口径变得相同, 烟囱形分支解的能量在此处开始就与管形分支解的能量相等, 稳定的形状又从烟囱形连续转变为管形. 从点  $D^{\text{sphere}}(\hat{\gamma} = 4.032)$  开始, 只有球形的相对能量为负值, 所以稳定的形状又不连续地转变为球形.

我们发现在较高的  $\Delta a_0$  值时, 这些开口形状都闭合为球形. 因而在下一节讨论  $\Delta a_0$  值较大时的形状相变时, 只需和球形的能量进行对比. 另外我们还重复了 Umeda 和 Suezaki<sup>[10]</sup> 的计算结果, 得到的结果与他们是完全一致的.

### 3.2 $\Delta a_0$ 值较大时膜泡的相变

在 Umeda 和 Suezaki<sup>[10]</sup> 的工作中, 他们宣称在  $\Delta a_0 > 1.23$  时没有发现开口的形状. 在以往的工作中, 当  $\Delta a_0$  值较大时, 我们用打靶法在 SC 模型下得到了单开口哑铃形或多个连泡的单开口膜泡<sup>[11,12]</sup>. 为了得到双开口的哑铃形形状, 我们选取已有的一端开口哑铃形, 再在一端适当去掉一些点, 即适当改变它的拓扑结构后, 作为计算双开口膜泡的初始猜测形状, 然后利用弛豫法去求解满足方程组(14)及相应边条件的数值解. 我们发现当  $\Delta a_0 > 1.23$  时, 会存在多支接近哑铃形的开口膜泡, 如单开口 (one-hole) 的哑铃形膜泡、双开口 (two-hole) 的哑铃形膜泡、闭合的哑铃形 (dumbbell) 膜泡. 其中单开口的哑铃形与我们以前用打靶法的计算结果完全一致. 下面我们以参数  $\Delta a_0 = 1.38$  的计算结果为例, 来讨论各分支解的相变.

$\Delta a_0 = 1.38$  时, 通过计算发现较小  $\Delta a_0$  值存在的分支解杯形、管形和烟囱性都闭合成球形. 所以为了与以往实验上得到的较小  $\Delta a_0$  值时的分支解的能量比较, 我们只需考虑球形 (sphere). 在图3中我们给出了单开口的哑铃形、双开口的哑铃形、闭合的哑铃形及球形的约化总能量  $F/(8\pi k_c)$  随约化线张力系数  $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$  的变化曲线. 从图3可以看到, 当  $0 < \hat{\gamma} < 0.284$  时, 双开口的哑

铃形能量最低, 因为单开口哑铃形解在该区域不存在, 该范围内稳定的形状就是双开口的哑铃形. 从  $D^{\text{one-hole}}(\hat{\gamma} = 0.284)$  点开始, 出现了单开口的哑铃形分支解, 为了看清相变的细节, 我们把  $D^{\text{one-hole}}$  点附近放大, 示于图4(a)中, 从中可以发现  $0.284 \leq \hat{\gamma} \leq 0.298$  时, 单开口的哑铃形能量一直比双开口的哑铃形能量低, 显然也比其他形状的能量低, 所以在该范围稳定的形状就是单开口的哑铃形. 在  $D^{\text{one-hole}}$  点单开口的哑铃形解开始出现, 该支解是独立的解, 而不是从双开口解分叉出来的. 这时以往文献中一般认为发生了从双开口的哑铃形到单开口的哑铃形的不连续转变. 在  $D^{\text{two-hole}}(\hat{\gamma} = 0.299)$  处, 两曲线相交, 双开口的哑铃形能量变得更低, 稳定的形状从单开口的哑铃形跳变为双开口的哑铃形, 该相变是不连续的, 因为该两支解的能量相交而不是相切. 即  $0.299 \leq \hat{\gamma} \leq 0.519$  时, 稳定的形状为双开口的哑铃形. 在点  $D^{\text{sphere}}(\hat{\gamma} = 0.52)$  处, 双开口的哑铃形能量与球形的能量相交. 相交后球形的能量开始变得最低, 即在点  $D^{\text{sphere}}$  处, 最低能量的形状从双开口的哑铃形不连续地跳变为球形, 从点  $D^{\text{sphere}}$  开始, 球形是稳定态. 当  $\hat{\gamma} > 0.52$  时, 双开口的哑铃形支解和单开口的哑铃形支解继续存在, 双开口的哑铃

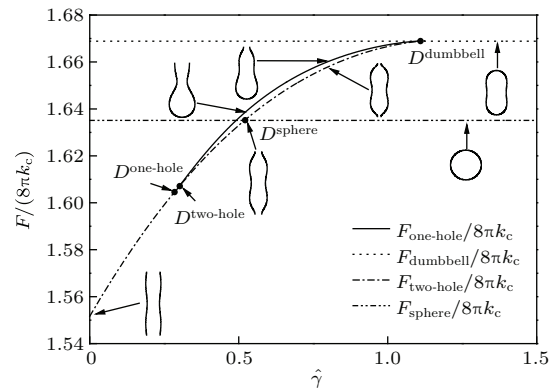


图3  $\Delta a_0 = 1.38$  时, 单开口的哑铃形、双开口的哑铃形、闭合的哑铃形及相同面积下的球形的约化总能量  $F/(8\pi k_c)$  随约化线张力系数  $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$  的变化, 图中亦给出了一些典型的单开口的哑铃形 ( $\hat{\gamma} = 0.519, 0.80$ )、双开口的哑铃形 ( $\hat{\gamma} = 10^{-6}, 0.519, 0.80$ )、闭合的哑铃形以及球形的形状

Fig. 3. The reduced total energy  $F/(8\pi k_c)$  of one-hole dumbbell shapes, two-hole dumbbell shapes, closed dumbbell shapes, and sphere that has the same area for  $\Delta a_0 = 1.38$  as a function of the reduced line tension  $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$ . The figure also shows some typical one-hole dumbbell ( $\hat{\gamma} = 0.519, 0.80$ ), two-hole dumbbell ( $\hat{\gamma} = 10^{-6}, 0.519, 0.80$ ), closed dumbbell and sphere shapes.

形仍然是亚稳态. 随 $\hat{\gamma}$ 的继续增大, 在点 $D^{\text{dumbbell}}$ ( $\hat{\gamma} = 1.109$ )附近会与闭合的哑铃形能量曲线相交, 如图4(b)所示. 在点 $D^{\text{dumbbell}}$ 处双开口的哑铃形不连续地跳变为处于亚稳态的闭合哑铃形. 此时的双开口的哑铃形口径已经很小, 因此该相变近似为连续相变. 在图5中给出了 $0 \leq \hat{\gamma} \leq 0.52$ 范围内, 在不同的 $\hat{\gamma}$ 值区间具有最低能量的典型形状. 当 $\hat{\gamma} > 0.52$ 时双开口的哑铃形不连续地转变为球形.

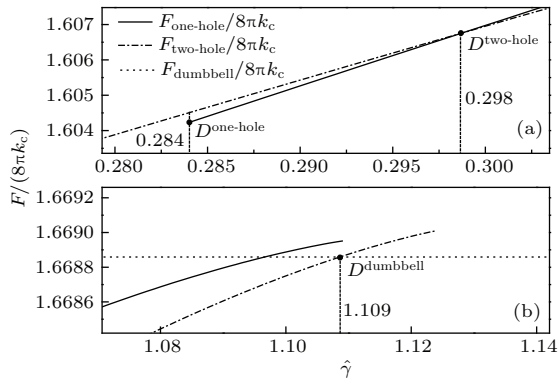


图4 图3中特殊点附近放大图 (a)  $D^{\text{one-hole}}$ 点附近; (b)  $D^{\text{dumbbell}}$ 点附近  
 Fig. 4. Magnification of Fig. 3 in the neighborhood of special point: (a) In the neighborhood of point  $D^{\text{one-hole}}$ ; (b) in the neighborhood of point  $D^{\text{dumbbell}}$ .

以上讨论只是给出了各分支形状的能量大小, 作为实验上的参考, 这也是当前文献中普遍的做法. 实际的相变过程还需要考虑一支解的稳定区间, 即一支解能量不是最低后, 它作为亚稳态存在的区间. 因而需要对膜泡做稳定性分析, 该计算非常繁琐, 而用Surface-Evolver进行直接极小化计算

目前精度还达不到要求, 因而我们目前还没有进行这方面的工作. 总之我们发现的新膜泡在一定的参数区间比实验上已发现的形状能量更低, 它们一定是稳定的, 因而我们相信它们应当被观察到, 但实际的相变过程还需要实验的检验.

当实验中从稳定的双开口哑铃形出发, 随着 $\hat{\gamma}$ 的增加, 不一定会在 $D^{\text{one-hole}}$ 处发生不连续的相变, 转变为单开口哑铃形. 因为该两支解在泛函空间相距较远, 从一支到另一支的相变存在位垒, 只有当双开口解失稳后才可能转变为单开口形状. 但这时双开口哑铃形能量已处于最低. 因此实验上更可能观测到从双开口哑铃形一直到 $D^{\text{sphere}}$ 附近发生不连续相变转变为闭合的球形, 或该分支解也可能在 $\hat{\gamma} > 0.52$ 后仍作为亚稳态存在, 直到 $D^{\text{dumbbell}}$ 处变为闭合的哑铃形. 另一方面单开口的哑铃形只能从实验中单独地得到, 例如用光镊从一端打开缺口, 它的稳定区间也需要实验去检验. 单开口与双开口的哑铃形和球形膜泡的拓扑结构也不同. 它们之间的相变有利于提供不同拓扑结构形状之间的相变信息, 从而加深对该类问题的了解.

另外我们注意到 $\Delta a_0$ 值较小时解的行为和 $\Delta a_0$ 值较大时解的行为有较大的不同. 当 $\Delta a_0$ 值较小时双开口有管状和烟囱状两支解, 这两支解之间的相变是连续的. 它们和单开口的杯形虽然形状差别很大, 但能量却非常接近. 而对应 $\Delta a_0$ 值较大时只有一支上下对称的双开口哑铃形解, 我们在所有的参数区间并没有发现上下不对称的双开口哑铃形解.

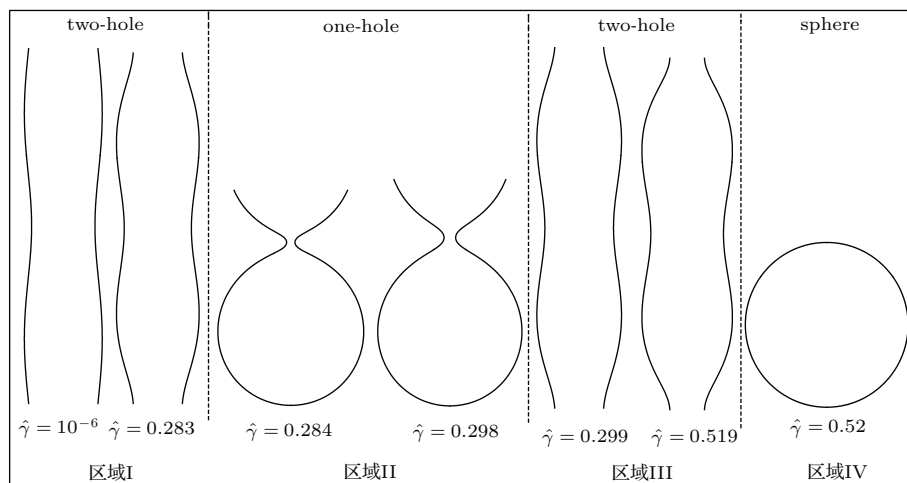


图5  $\Delta a_0 = 1.38$ 时, 几个不同约化线张力系数 $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$ 区间下, 具有最低能量的形状  
 Fig. 5. The shapes which have the lowest energy for  $\Delta a_0 = 1.38$  and different regions of the reduced tension line  $\hat{\gamma} = \gamma R_0/k_c$ .

从图 3 可以看出, 球形的能量比哑铃形的能量低, 它们的能量都不随  $\gamma$  改变, 因为其边界长度都为零. 在较大  $\Delta a_0$  值时, 球形的能量高于哑铃形的能量. 这也解释了为什么实验中经常可以观察到闭合的哑铃形, 虽然单开口或双开口的哑铃形目前还没有观察到.

## 4 结 论

本文研究发现当  $\Delta a_0 > 1.23$  时, 开始存在双开口的哑铃形膜泡解, 结合我们以前发现的单开口的哑铃形及闭合哑铃形, 对它们之间的相变行为进行了深入的探讨. 为了与以往实验上发现的形状进行对比, 我们也对较小  $\Delta a_0$  值的杯形、管形、烟囱形和闭合球形的相变进行了研究. 我们发现在本文得到的双开口哑铃形及单开口哑铃形所对应的  $\Delta a_0$  值下, 杯形、管形、烟囱形都已经闭合为球形. 因而只需将我们发现的新开口形状和球形进行对比. 研究发现, 双开口哑铃形、单开口哑铃形及球形都存在能量最低的区间, 即稳定区间, 因而在实验上是可能发现的. 而且由于双开口哑铃形的形状和球形在泛函空间相距太远, 因而双开口哑铃形是连续转变到闭合哑铃形状, 还是转变到闭合球形, 尚需实验的检验.

我们对参数区间进行了全面的搜索, 目前发现不存在上下不对称的双开口的哑铃形. 而在较小  $\Delta a_0$  值时, 双开口膜泡则存在上下对称的管形和上下不对称的烟囱形两支, 而且它们之间的相变是连续的, 即烟囱形是从管形中分岔出来的. 以上的研究结果一定程度上丰富了对开口膜泡解的性质及

相变特性的了解, 同时也可较大  $\Delta a_0$  值时开口膜泡的实验探究提供一定的参考.

## 参考文献

- [1] Lieber M R, Steck T L 1982 *J. Biol. Chem.* **257** 11651
- [2] Lieber M R, Steck T L 1982 *J. Biol. Chem.* **257** 11660
- [3] Saitoh A, Takiguchi K, Tanaka Y, Hotani H 1998 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **95** 1026
- [4] de Gennes P G, Tauppin C 1982 *J. Phys. Chem.* **86** 2294
- [5] Bar-Ziv R, Frisch T, Moses E 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3481
- [6] Zhelev D V, Needham D 1993 *Biochim. Biophys. Acta* **1147** 89
- [7] Capovilla R, Guven J, Santiago J A 2002 *Phys. Rev. E* **66** 021607
- [8] Tu Z C, Ouyang Z C 2003 *Phys. Rev. E* **68** 061915
- [9] Li S L, Zhang S G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5202 (in Chinese) [李树玲, 张劭光 2010 物理学报 **59** 5202]
- [10] Umeda T, Suezaki Y 2005 *Phys. Rev. E* **71** 011913
- [11] Kang W B, Zhang S G, Wang Y, Mu Y R, Huang C 2011 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **54** 2243
- [12] Huang C, Zhang S G 2013 *J. Shaanxi Normal Univ. (Natural Science Edition)* **41** 0031 (in Chinese) [黄聪, 张劭光 2013 陕西师范大学学报 (自然科学版) **41** 0031]
- [13] Helfrich W 1973 *Z. Naturforsch. C* **28** 693
- [14] Miao L, Seifert U, Wortis M, Dobereinert H G 1994 *Phys. Rev. E* **49** 5389
- [15] Ouyang Z C, Helfrich W 1989 *Phys. Rev. A* **39** 5280
- [16] Tu Z C 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 084111
- [17] Press W H, Teukolsky S A, Vetterling S A, Flannery B P 1996 *Numerical Recipes in Fortran* (Second Edition) (U.K.: Cambridge University Press) pp1316–1320
- [18] He G Y, Gao Y L 2002 *Visual Fortran Commonly Used Numerical Algorithms* (First Edition) (Beijing: Science Press) pp657–678 (in Chinese) [何光渝, 高永利 2002 Visual Fortran 常用数值算法 (第一版) (北京: 科学出版社) 第 657–678 页]



# Exploring new opening-up membrane vesicles of two holes by using the relaxation method\*

Kong Xiang-Bo Zhang Shao-Guang<sup>†</sup>

(College of Physics and Information Technology, Shaan'xi Normal University, Xi'an 710119, China)

( Received 9 November 2015; revised manuscript received 31 December 2015 )

## Abstract

Due to the discovery and study of opening-up lipid vesicles, the theoretical analysis and numerical calculation have aroused increasing interests of researchers. In the previous study, Suezaki and Umeda gave the opening-up vesicles near the spherical vesicles, such as the dish and cup shapes with one hole, and the tube and funnel shapes with two holes. These shapes are found at relatively low values of reduced, relaxed area difference  $\Delta a_0$ . However, what are the stable shapes for high values of  $\Delta a_0$  is not known. Kang *et al.* found solutions of opening up dumbbell shapes with one hole. Whether or not there exist dumbbell shapes with two holes, and the phase transformation behavior between them remains unknown. The purpose of this paper is to explore a new kind of two-hole dumbbell shaped lipid vesicles and phase transformations between this kind of vesicle and previously found vesicles. Based on the area-difference-elasticity model, this paper tries to explore new solutions of the Euler-Lagrange equations of the opening-up membrane vesicles which meet the boundary conditions by using the relaxation method. A new branch of solution of dumbbell shapes with two holes is found. The phase transformations of closed dumbbell shapes and opening-up dumbbell shapes with one hole and two holes are studied in detail. To explore whether these shapes could be found in experiments, the energy of the cup, tube, and funnel shaped vesicles are also compared with the opening-up dumbbell shapes. It is found that at high values of  $\Delta a_0$ , all the cup, tube, and funnel shapes will transform into closed spherical vesicles. So the energy of new opening-up dumbbell vesicles can be compared to that of closed spherical vesicles and closed dumbbell vesicles. It is found that the dumbbell shapes with one hole and two holes all have stable regions, implying that it is possible for these open dumbbells to be observed. Since the distance in the functional space is too far between the open dumbbell shapes and spherical vesicles, experimental test is needed to verify whether the dumbbell shapes with two holes will evolve continuously to the closed dumbbell shapes or to the closed spherical vesicles. It has been noticed that for relatively small values of  $\Delta a_0$ , two holes vesicles may exhibit symmetrical tube shapes and asymmetric funnel shapes between which the phase transformation is continuous, because the funnel solutions bifurcate from the tube solutions. In order to check whether there exist asymmetric opening-up dumbbell shapes with two holes and the similar bifurcation behavior, a thorough search is made in the parameter space. So far no asymmetric dumbbell shape with two holes is found.

**Keywords:** area-difference-elasticity model, relaxation method, opening-up vesicles, numerical calculations

**PACS:** 87.16.D-, 82.70.Uv

**DOI:** 10.7498/aps.65.068701

\* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China (Grant No. GK201302011), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10374063).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zhangsg@snnu.edu.cn](mailto:zhangsg@snnu.edu.cn)