

基于自发曲率模型对几种极限形状膜泡及典型相变和分裂过程的研究*

周晓华^{1)†} 张劭光²⁾ 杨继庆¹⁾ 屈学民¹⁾ 刘渊声¹⁾ 王斯刚¹⁾

1) 第四军医大学数理教研室, 西安 710032)

2) 陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710062)

(2006 年 11 月 7 日收到, 2007 年 1 月 31 日收到修改稿)

通过在 Surface Evolver 软件中建立一些具有多重对称性的初始形状, 经逐次细分并长时间演化后, 得到了几种能量很低的极限形 budding 形状, 其参数与理论值一致. 通过逐步调整参数并跟踪其演化途径, 发现了一个不连续的相变和一个连续的可逆相变以及两种稳定的新形状, 并且获得的海星形的两种分裂路径已被实验所证实.

关键词: 生物膜泡, 曲率, Surface Evolver

PACC: 8720, 8720E, 0240

1. 引言

生物膜结构广泛地存在于生物体中. 近年来, 有关生物膜功能及结构的研究不断取得进展. 在解释人体红血球细胞膜以及其他各种人造膜的形状形成机理方面, Helfrich 提出的膜泡能量的曲率变分理论取得了很大成功. 在此模型中, 平衡形状的膜泡由其自由能的最小值决定, 其能量为^[1]

$$F = \frac{1}{2} k_c \int (C_1 + C_2 - C_0)^2 dA + \Delta P \int dV + \lambda \int dA, \quad (1)$$

此处的 dA 和 dV 分别为曲面的面积元和体积元, k_c 为弹性模量, C_1 和 C_2 为曲面的两个主曲率, C_0 是 Helfrich 引入的一个描述膜泡周围环境的不对称性所引起的自发曲率, 其具体的物理意义还有待进一步研究. 拉格朗日乘子 ΔP 和 λ 分别对应于体积和面积约束. 其中 ΔP 可理解为膜泡内外的渗透压, 而 λ 可解释为曲面强度系数. 由于自发曲率 C_0 的存在, 人们将此模型称为自发曲率 (SC) 模型.

通过对方程 (1) 作变分, Ou-Yang 等人得到了下面平衡形状满足的普适方程^[2]:

$$\Delta P - 2\lambda H + k_c (2H - C_0) (2H^2 - 2K - C_0 H)$$

$$+ 2k_c \nabla^2 H = 0, \quad (2)$$

此处的 ∇^2 为曲面拉普拉斯算子, $H = (C_1 + C_2)/2$ 为曲面平均曲率 (文献 [2] 中的取法为 $H = -(C_1 + C_2)/2$, 与此处相差一个负号), $K = C_1 C_2$ 为曲面高斯曲率. 虽然方程 (2) 是一个高阶非线性偏微分方程, 要得到其通解非常困难, 但是人们还是得到了一些有趣的特解, 这可以说是 SC 模型一个很大的成功之处. 已知的这些特解大都为 Ou-Yang 及其合作者给出, 包括克利福德锚环解^[3]、红血球解^[4]、扩展的德朗尼曲面解^[5] 以及柱面型通解^[6,7]. 这些特解的获得无论是在数学以及膜泡的形状研究方面都具有较重要的意义.

为了标度不同形状膜泡的能量, 我们使用约化量进行计算. 通常用膜泡面积 A 来定义约化半径 $R_0 = \sqrt{A/4\pi}$, 此时, 约化体积可表示为 $v = 3V/4\pi R_0^3$, 其中的 V 为膜泡体积. 同时可得到约化自发曲率 $c_0 = C_0 R_0$. 由此, 方程 (2) 的解将由 v 和 c_0 两个量决定. 对于轴对称的情况, Seifert 等人利用打靶法数值求解了与方程 (2) 等价的拉格朗日方程组并给出了球形和环形拓扑的相图^[8,9]. 至今为止, 人们始终没能找到非轴对称的解, 然而, 实验上却发现了许多非旋转对称的稳定膜泡^[10-12]. 近年来, 欧阳小组利用功能强大的曲面模拟软件 Surface Evolver^[13] 得

* 陕西省自然科学研究计划 (批准号 2003A08) 资助的课题.

† E-mail: zhouxh1980@gmail.com

到了一些非轴对称的膜泡^[14-16]此外, Du 等人的数值计算也获得了很丰富的图形^[17]. 本文的作者也利用 Surface Evolver 软件模拟确定了两种不连续的相变过程, 并且提出了目前还需要深入研究的问题^[18].

由一些近球形用较细的脖子连接起来组成的形状称为 budding 形膜泡. 如文献[8]中的梨形以及($c_0 = 2.8, v = 0.707$)的哑铃形都属于这类形状. 对这类形状的研究对认识膜泡的合成、分裂以及发芽有较重要的意义. 文献[10]中, Hotani 小组观察到了红血球形状通过几种不同路径的相变及分裂过程. 文献[19]和[20]中, 人们利用电极化方法, 获得了由极细的微管连接成的高亏格网络状膜泡结构. 文献[21]中, 人们通过给溶液中加入一定的钠盐, 观察到了膜泡的疏离及融合过程. 本文通过 Surface Evolver 软件模拟得到了一些具有多重对称性的极限型 budding 形膜泡, Hessian 矩阵^[18]的正定性表明它们都是 SC 模型中的稳定形状. 通过逐步增大一些近极限形状的 c_0 , 获得了两种典型的海星形状的分裂路径, 其过程与实验上已观察到的现象基本一致.

与 SC 模型中的能量函数相比较, 我们得到在 Surface Evolver 软件中, 膜泡的能量函数可表示为

$$F = m_1 \int (H - H_0)^2 dA + \lambda \int dA - P \int dV, \quad (3)$$

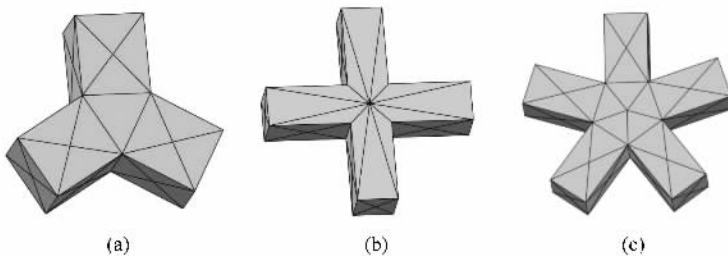


图 1 初始形状 (a) (b) 和 (c) 依次具有 D_{3h} , D_{4h} 和 D_{5h} 对称性

1) 细分初始形状后演化一定步数(一般数十步即可), 固定其面积, 再次细分并演化, 直到曲面较为光滑.

2) 设定 c_0 值为理论值. 逐步调节膜泡体积向着目标形状体积(略低于理论值)演化. 例如: 为了得到图 2(a) 中的 3 个球的形状, 我们利用初始形状图 1(a), 在第一步完成后, 设定 c_0 为理论值 $2\sqrt{3} \approx 3.46$. 此时 v 的理论值为 $\sqrt{3}/3 \approx 0.57$, 我们将 v 向着目标值 0.55 演化.

3) 获得目标体积下的形状后, 再次细分, 不固定其面积并长时间演化. 在其脖子坏掉之前再次细

其中, m_1 为曲率能的权重, 平均曲率 $H = (C_1 + C_2)/2$. 为了与 SC 模型一致, 此处 $m_1 = 2k_c$, $P = -\Delta P$, $H_0 = C_0/2$. 在我们的计算中, 取 $m_1 = 1$.

2. 几种极限型 budding 形状

在没有约束的条件下, 球形和克利福德锚环形分别是球形和环形拓扑中, 能量绝对极小的形状. 再者, 由几个近似相同的球组成的形状同样可以具有很低的能量. 我们假设某种形状的膜泡由 n 个相等的球组成, 则理论计算不难得到在点($c_0 = 2\sqrt{n}$, $v = \sqrt{n}/n$)上将出现能量接近于零的形状(有关内容将另文讨论). 同时得到相应的约化平均曲率积分 $m = \int H dA / R_0 = 4\pi\sqrt{n}$. 此外, 不难证明(1)式中, 面积和体积约束中只有一个是独立的.

为迅速得到一些具有多重对称性的 budding 形状, 我们建立一些如图 1 中所示的具有多重对称性的初始形状. 通过软件的逐次细分并长时间演化, 可以得到图 2 中的几种具有多重对称性的 budding 形膜泡, 它们的能量都很接近于零. 获得的具体步骤如下:

分并长时间演化, 就可得到图 2 中的形状.

图 2 中的几种 budding 形, 每种形状的剖断面数都在 1 万以上, 由于是在没有约束条件下得到的, 因此它们是些能量的绝对极小点. 对于这些胞化很厉害的形状, 我们相信在它们附近很可能存在发芽和分裂过程. 但是, 若将它们的面积再次固定后计算, 目前看来有一定困难. 原因在于此时一个很小的体积或面积扰动都可能使膜泡演化坏掉. 初步的计算表明, 图 2(a) 和 (b) 中的两种形状, 若固定其面积和 c_0 , 逐步增大体积, 其脖子会断掉而分裂成多个球形, 不会有大小不等的球由共同的脖子连接起来的稳定形状出现. 这说明只有体积相等的球形之间的

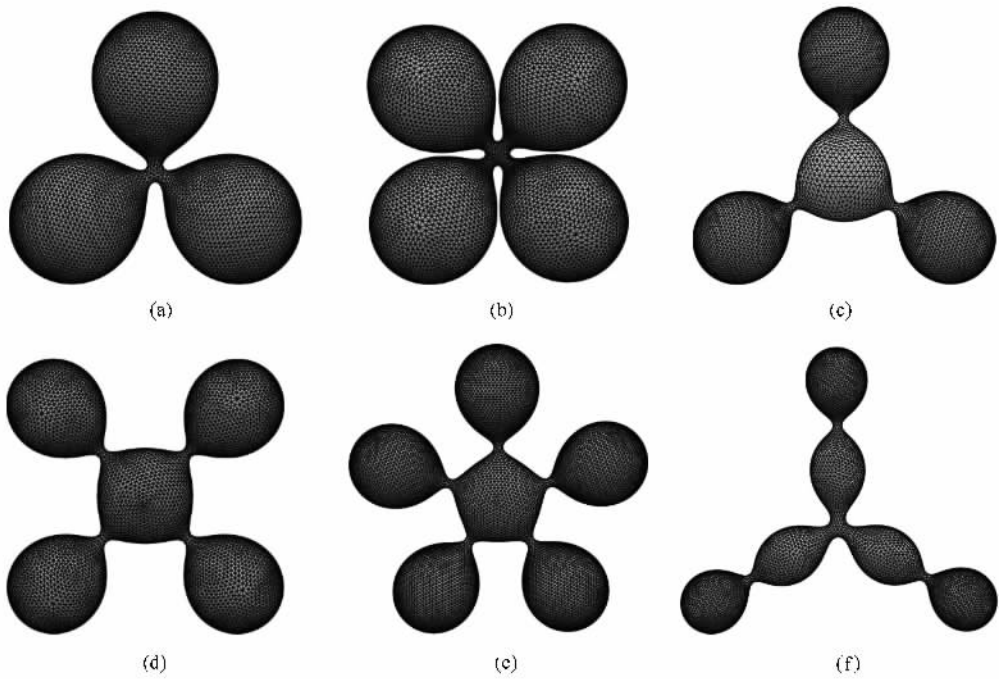


图2 几种多重对称性的极限形 budding 形状 (a) $c_0 = 3.491$, $v = 0.569$, $m = 1.700 \times 4\pi$; (b) $c_0 = 3.954$, $v = 0.492$, $m = 1.964 \times 4\pi$; (c) $c_0 = 3.927$, $v = 0.492$, $m = 1.940 \times 4\pi$; (d) $c_0 = 4.391$, $v = 0.44$, $m = 2.164 \times 4\pi$; (e) $c_0 = 4.85$, $v = 0.402$, $m = 2.365 \times 4\pi$; (f) $c_0 = 4.764$, $v = 0.391$, $m = 2.353 \times 4\pi$

竞争才能形成稳定的、具有多重对称性的脖子. 同样,若固定图 3(c) 和 (e) 中的两种形状的面积和 c_0 , 逐步增大体积之后, 处于最外面的几个球会同时变大, 处于中间的球会变小. 对于图 3(f) 中的形状, 其形变过程所知甚少.

3. 几种典型的相变及分裂过程

利用图 1(a) 为初始形状, 在较小的约化体积下, 很容易得到图 3(a) 中, 胞化很厉害的、稳定的 Y 字形. 固定其体积 $v = 0.46$, 逐步增大 c_0 (步长为 0.1), 当 $c_0 = 4.2$ 时, 处于 Y 字形最底端的球会由于脖子形成极细的微管而最先分离出来. 当 c_0 继续增大到 4.3 时, 处于最上边的两个球将分离出来. 这样具有明显先后次序的分裂过程正是实验中观察到的海星形的几种分裂路径之一^[10].

利用图 1(a) 为初始形状, 选择适当的约化体积, 可得到如图 4(a) 中, 稳定的、具有 D_{3h} 对称性的三爪海星形. 固定其体积, 逐步增大 c_0 , 其会先变成稳定的人字形. 这是一个不连续的变形过程, 改用更小的步长计算, 也会有该过程出现. 人字形继续增大 c_0 , 会分裂成如图 4(c) 中, 由极细的微管相连

的几个球形, 该形状与文献 [19] 中利用电极化方法得到的形状很类似. 图 4(c) 中几个球的分裂过程几乎是同时的, 不存在明显的先后次序, 这也正是实验上观察到的海星形的几种分裂路径之一^[10].

利用图 1(b) 为初始形状, 可得到如图 5(a) 中, 稳定的、具有 D_{2h} 对称性的四爪海星形. 固定其体积, 逐步增大 c_0 到 $c_0 \geq 3.28$ 时, 其会连续地变成图 5(c) 中稳定的、具有 D_{4h} 对称性的四爪海星形. 由于这是一个连续的相变, 我们取 c_0 的步长为 0.02. 图 6 给出了其 c_0 与 m 的变化曲线, 显然, 在 $c_0 = 3.28$ 附近 m 值不存在突变. 进一步计算表明, 这是一个连续的可逆相变, 即 D_{4h} 对称性海星形也可以连续地变形为 D_{2h} 对称性的海星形. 这是我们首次发现 SC 模型中, 海星形存在连续的可逆相变.

如果将图 5(c) 中的形状继续增大 c_0 到 $c_0 > 4.2$ 以上, 由于此时 c_0 较大, 一个较小的面积或体积扰动都可能产生较大的误差, 即使在剖分面数达 8 万个面以上, 算得的本征值的重复性也较差, 因此, 其变形情况目前还不是很清楚. 初步的计算表明, 其会不连续地变形为四个球的中心分别处于正四面体的四个顶点上的空间结构.

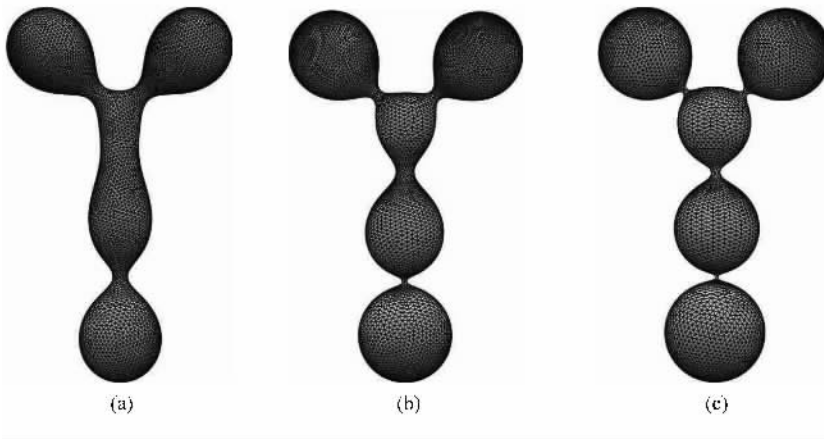


图3 $v=0.46$ 时增大 c_0 , Y字形的分裂过程 (a) 稳定的具有 C_{2v} 对称性的海星形, $F=1.061$, $c_0=4.1$, $m=1.994 \times 4\pi$, $P=1.279$, $\lambda=-0.058$ (b) 最下端球分离时的形状, $c_0=4.2$ (c) 上端两球分离时的形状, $c_0=4.3$

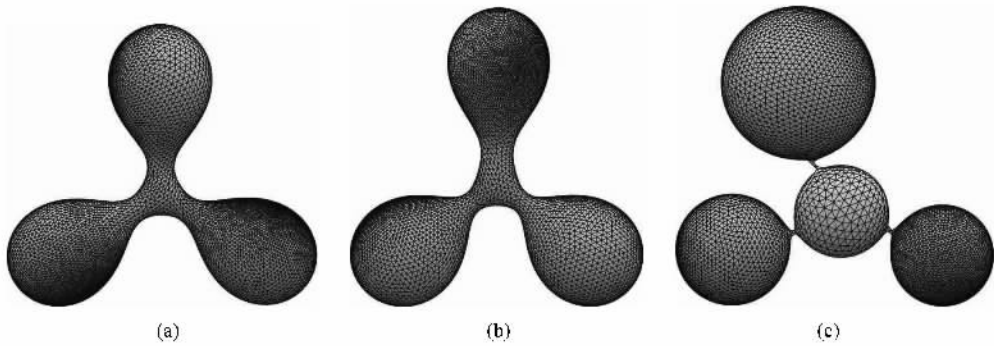


图4 $v=0.53$ 时增大 c_0 三爪海星形的相变及分裂过程 (a) 稳定的具有 D_{3h} 对称性的海星形, $F=5.527$, $c_0=4.3$, $m=1.749 \times 4\pi$, $P=5.237$, $\lambda=0.311$; (b) 稳定的具有 C_{2v} 对称性的海星形, $F=6.577$, $c_0=4.4$, $m=1.762 \times 4\pi$, $P=8.071$, $\lambda=-0.237$; (c) 分离时的形状, $c_0=4.5$

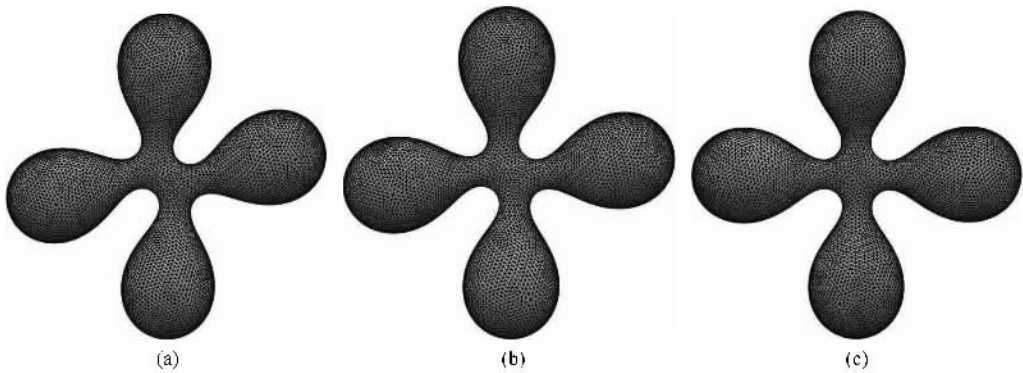


图5 $v=0.46$ 时增大 c_0 四爪海星形的连续相变过程 (a) 稳定的具有 D_{2h} 对称性的海星形, $F=5.019$, $c_0=3.10$, $m=1.921 \times 4\pi$, $P=-10.744$, $\lambda=1.317$; (b) 稳定的具有 D_{2h} 对称性的海星形, $F=4.132$, $c_0=3.20$, $m=1.931 \times 4\pi$, $P=-10.219$, $\lambda=1.288$; (c) 稳定的具有 D_{4h} 对称性的海星形, $F=3.49$, $c_0=3.28$, $m=1.937 \times 4\pi$, $P=-9.75$, $\lambda=1.262$

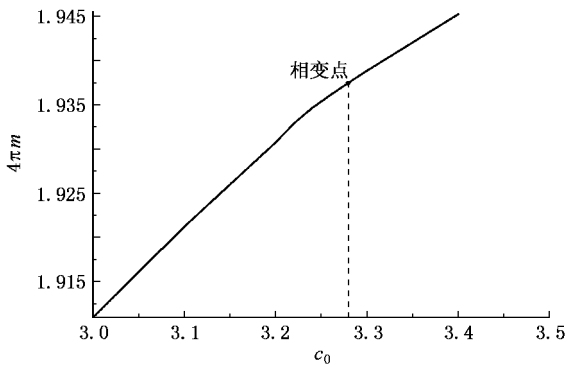


图6 $v = 0.46$ 时四爪海星形的 c_0 与 m 的变化曲线,其说明在 $c_0 = 3.28$ 附近 m 值不存在突变

4. 结 论

无约束条件下,SC模型中形状的收敛速度很快(其他模型我们也作了一定的计算),很容易得到一些极限形状.文献[8]中已经发现极限的哑铃形会连续地变为梨形.因此,我们猜测,图2中的这些形状很可能会连续地变为由不相等的球形组成的形状,或者连续地发芽出一些小的球形.这需要进一步研究才能确定这种相变是否存在.

图4(b)和5(c)是两种有待深入研究的新形状,其中,图4(b)中的人字形只是在具有 D_{3h} 对称性的三爪海星形增大体积或 c_0 的形变过程中出现,并且其稳定区间非常狭窄.除过图5中的连续相变之外,我们还发现具有 C_{2v} 对称性的Y字形增大体积时会连续地变形为具有 D_{3h} 对称性的三爪海星,但这是一个不可逆的单向连续相变.图4中的分裂过程似乎暗示着这样一个规律:具有较高对称性脖子的形状,其在分裂之前必先失去或降低脖子的对称性,然后再分裂.显然,如果不先失去这种对称性,几个相等的球(或几只相同的爪)之间的竞争会始终维持脖子平衡.

本文给出的两种典型的分裂过程是在增大 c_0 的情况下得到的(注:由于分裂后形状的Hessian矩阵已不正定,其相应参数已不太可靠,因此我们并没有给出这些参数),而实验上是在不同的渗透压条件下观察到海星形的几种分裂路径,显然,需要考虑 c_0 与渗透压之间的对应关系,才能肯定其结果与实验完全一致.但是,由于导致膜泡产生 c_0 的物理过程相当复杂,必须考察膜泡周围环境中可能的各种相互作用才能确定 c_0 具体的物理意义,这是目前需要深入研究的问题.

- [1] Helfrich W 1973 *Z. Naturforsch. C* **28** 693
- [2] Ou-Yang Z C, Helfrich W 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2486
- [3] Ou-Yang Z C 1990 *Phys. Rev. A* **41** 4517
- [4] Naito H, Okuda M, Ou-Yang Z C 1993 *Phys. Rev. E* **48** 2304
- [5] Naito H, Okuda M, Ou-Yang Z C 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 4345
- [6] Zhang S G 1997 *Acta Phys. Sin. (Overseas Ed.)* **6** 641
- [7] Zhang S G, Ou-Yang Z C 1996 *Phys. Rev. E* **53** 4206
- [8] Seifert U, Berrndl K, Lipowsky R 1991 *Phys. Rev. A* **44** 1182
- [9] Jlicher F, Seifert U, Lipowsky R 1993 *J. Phys. II France* **3** 1681
- [10] Hotani H 1984 *J. Mol. Biol.* **178** 114
- [11] Wintz W, Döbereiner H G, Seifert U 1996 *Europhys. Lett.* **33** 404
- [12] Sekimura T, Hotani H 1991 *J. Theor. Biol.* **149** 326
- [13] <http://www.susqu.edu/facstaff/b/brakke/>
- [14] Yan J, Liu Q H, Liu J X, Ou-Yang Z C 1998 *Phys. Rev. E* **58** 4730
- [15] Zhou J J, Zhang Y, Zhou X, Ou-Yang Z C 2001 *In. J. Mod. Phys. B* **15** 2977
- [16] Zhang Y, Zhou X, Zhou J J, Ou-Yang Z C 2002 *In. J. Mod. Phys. B* **16** 511
- [17] Du Q, Liu C, Wang X Q 2006 *J. Comput Phys.* **212** 757
- [18] Zhou X H, Zhang S G 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5568 (in Chinese)
[周晓华,张绍光 2006 物理学报 **55** 5568]
- [19] Karlsson M, Sott K, Davidsson M, Cans A S, Linderholm P, Chiu D, Orwar O 2002 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **99** 11573
- [20] Karlsson A, Karlsson R, Karlsson M, Can A S, Stromberg A, Ryttsen F, Orwar O 2001 *Nature* **409** 150
- [21] Menger F M, Balachander N 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 5862



Some new limiting vesicles and typical phase transforms and abruptions processes studied using the spontaneous-curvature model^{*}

Zhou Xiao-Hua¹† Zhang Shao-Guang²) Yang Ji-Qing¹) Qu Xue-Min¹) Liu Yuan-Sheng¹) Wang Si-Gang¹)

¹ *Department of Mathematics and Physics, The Fourth Military Medical University, Xi'an 710032, China)*

² *College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)*

(Received 7 November 2006 ; revised manuscript received 31 January 2007)

Abstract

Through building several multi-symmetric initial shapes in Surface Evolver software, after refining them and doing a long time of evolution step by step, we obtained some new budding vesicles with small energy whose coefficients are consistent with the theoretical values. Through changing the coefficient and scanning the direction of different shapes, we found a discontinuous phase transition and a reversible continuous phase transition and two new stable shapes. Furthermore, we obtained two kinds of starfish shaped abruption processes which have been supported by experiment.

Keywords : vesicle, curvature, Surface Evolver

PACC : 8720, 8720E, 0240

^{*} Project supported by the Natural Science Research Plan of Shaanxi Province, China (Grant No. 2003A08).

† E-mail : zhouxh1980@gmail.com