

打结高分子链穿孔行为的研究*

温晓会¹⁾ 章林溪^{2)†}

1) (浙江大学物理系, 杭州 310027)

2) (温州大学物理系, 温州 325027)

(2009 年 11 月 16 日收到; 2010 年 4 月 23 日收到修改稿)

以三叶草型结(即 3_1 结)为例, 采用分子动力学(MD)方法, 研究打结高分子链在外场力作用下穿越微孔的动力学过程. 模拟发现, 在拉动打结高分子链的过程中, 结的大小呈涨落变化, 直至最后散结. 定性讨论了结的存在对高分子链穿孔速率的影响. 在外场力作用下, 打结高分子链平均穿孔时间(τ)与链长(N)满足标度关系 $\tau \sim N^\alpha$, 其中标度系数 α 随外场力 f 增大而增大. 对于短链, 外场力越大, 平均穿孔时间越短; 而对于较长的链, 外场力越大, 平均穿孔时间反而越长. 本文还研究了结在长链中所处的位置对平均穿孔时间的影响. 结点位置不同, 高分子链平均穿孔时间也不同. 初始时, 结越靠近第一个穿孔原子, 其平均穿孔时间就越长. 通过这些研究, 可对打结高分子链(特别是打结 DNA)穿越微孔的微观过程有一定认识, 从而加深对生物大分子穿孔行为的理解.

关键词: 分子动力学方法, 打结高分子链, 穿孔时间, 散结

PACC: 8120S

1. 引 言

对于高分子长链, 打结和纠缠不可避免地存在, 并影响其各种构象性质^[1-3]. 对于生物大分子(如 DNA 和蛋白质), 人们发现了许多打结现象, 如二十四面噬菌体中 DNA 的打结现象^[4], 细菌和病毒中的转甲基酶能够结合形成 α/β 类结现象^[5], 蛋白质打结现象等^[6]. 应用大分子的拓扑打结理论, 人们已经发现三叶草型结或者其他更复杂的结在长链体系中出现概率非常大^[7-9]. 打结高分子链是一类结构特殊的高分子链, 链打结是高分子链相互作用的一种形式, 它主要影响链的长程运动. 在蛋白质分子中, 打结的存在会影响蛋白质分子的一些功能和行为, 如蛋白质分子的折叠等^[10]. 近几年来, 高分子链穿孔行为的研究引起了许多研究者的兴趣, 如 DNA 测序^[11,12]、蛋白质在线粒体内的迁移^[13]、基因治疗^[14]和可控药物传输^[15,16]等. 实验上, Kasianowicz 等^[17]发现外加电场能够驱动单个 DNA 和 RNA 分子链穿过 α -溶血素蛋白质小孔孔道. Meller 等^[18]做了一系列不同种类的 DNA 穿过 α -溶血素孔道的实验, 发现这类实验可以提供一种

低成本的测量 DNA 核苷酸序列的方法. 在模拟方面, Jiang 等^[19]已经成功模拟了环形链穿越微孔的过程. 由于拓扑结构的差异, 打结高分子链不同于线性及环形高分子链, 高分子链在打结情况下的穿孔行为会表现出一些不同的特性, 结的存在会影响高分子链的穿孔行为. 对于只允许单个原子通过的纳米孔道来说, 打结高分子链无法直接通过纳米孔道, 必须在散结以后, 成为线性高分子链才能通过纳米孔道^[4,20,21], 所以散结的过程对于整条链的穿孔行为有很大影响. 本文采用粗粒化高分子链模型代替复杂 DNA 链, 研究结存在对高分子链穿孔过程的影响, 最终目的是为了了解复杂拓扑结构的生物大分子(打结 DNA 和蛋白质等)穿孔行为的复杂性.

2. 模型和算法

采用分子动力学(MD)模拟方法^[22,23]研究打结高分子链的穿孔行为, 模型如图 1 所示. 在厚度为 L 的无限大平面上有直径为 d 的圆柱形孔道, 孔道 d 很小, 只允许单个原子通过. 孔道里有外场存在, 当打结高分子链通过孔道时, 受到一个外力的作用从

* 国家自然科学基金(批准号: 20574052, 20774066, 20974081, 20934004)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: Lxzhang@zju.edu.cn

而拉动整条链穿过孔道^[24]. 打结高分子链的原子数目为 $N+1$ (链长为 N), 所用结的类型为三叶草型 (即 3_1 结), 它在平面上投影可以看到三个交叉. 开始时打结高分子链在孔道左侧, 其第一个原子固定在孔道入口处, 另一端为自由端^[4]. 在打结高分子链没有进入孔道之前, 无限大平面与打结高分子链之间没有相互作用, 此时高分子链体系的能量为:

$$V = V_{\text{bond}} + V_{\text{nonbond}} + V_{\text{bend}} + V_{\text{dih}}, \quad (1)$$

即体系的能量来源于链内部的键能、非键能、弯曲势能和二面角势能. 其中键能为

$$V_{\text{bond}} = \frac{1}{2} \sum_{i=2}^N k_b (L_i - l_0)^2, \quad (2)$$

这里 l_0 是平衡时的键长, 大小为 $l_0 = 0.153 \text{ nm}$, 弹性系数 $k_b = 6.34 \text{ kcal/mol}^{-1} \text{ nm}^{-2}$ ($1 \text{ cal} = 4.19 \text{ J}$).

不相邻的原子间存在着非键能:

$$V_{\text{nonbond}} = \sum_{|i-j| \geq 4} \varepsilon \left[\left(\frac{\Delta r_m}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\Delta r_m}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad r_{ij} < 0.9 \text{ nm}, \quad (3)$$

式中的平衡参数 $\Delta r_m = 0.45 \text{ nm}$, 对于不同的基团对 $\text{CH}_2 \cdots \text{CH}_2$, $\text{CH}_3 \cdots \text{CH}_3$ 和 $\text{CH}_2 \cdots \text{CH}_3$, ε 分别取 0.09344 , 0.22644 和 0.14546 kcal/mol .

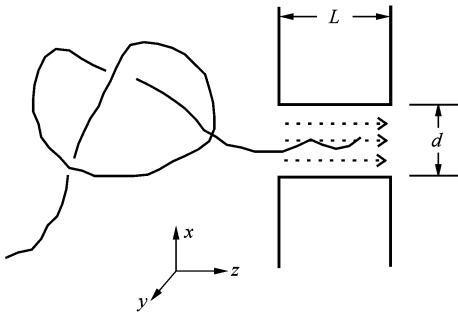


图1 打结高分子链穿孔示意图

3个连续的单体单元之间的键角由弯曲势能所限制:

$$V_{\text{bend}} = \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{N-1} k_\theta (\cos \theta_i - \cos \theta_0)^2, \quad (4)$$

平衡时键角 $\theta_0 = 1.920 \text{ rad}$, θ_i 是键矢量 \mathbf{l}_i 和 \mathbf{l}_{i+1} 之间的夹角, 系数 $k_\theta = 120 \text{ kcal/mol}$.

另外还有二面角势能

$$V_{\text{dih}} = \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{N-2} \{ k_\varphi^1 (1 - \cos \varphi_i) + k_\varphi^2 (1 - \cos 2\varphi_i) + k_\varphi^3 (1 - \cos 3\varphi_i) \}, \quad (5)$$

其中包含了4个连续的单体单元, φ_i 是二面角, 式

中 $k_\varphi^1 = 1.6 \text{ kcal/mol}$, $k_\varphi^2 = -0.867 \text{ kcal/mol}$, $k_\varphi^3 = 3.24 \text{ kcal/mol}$.

在 Langevin 动力学算法中, 各个原子都受到保守力、摩擦力和随机力的作用. 对于在孔道里的原子, 还要受到外力 f 的作用, 那么其运动方程为^[25,26]:

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -\nabla V - \eta \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{F}_i^R + \mathbf{f}, \quad (6)$$

其中 m 是单个原子的质量, η 是摩擦系数, $\dot{\mathbf{r}}_i$ 是原子 i 的速度, \mathbf{F}_i^R 是随机力, \mathbf{f} 是外场的作用力, 其方向固定不变, 因此方程(6)按三个方向分别求解. 随机力 \mathbf{F}_i^R 满足涨落耗散理论^[25,26]

$$\langle \mathbf{F}_i^R(t) \cdot \mathbf{F}_j^R(t') \rangle = 6kT\delta_{ij}\delta(t-t'). \quad (7)$$

在本文中, 高分子链中原子质量 $m = 23.24 \times 10^{-27} \text{ kg}$, 孔道半径 $d = 0.38 \text{ nm}$, 温度 $T = 350 \text{ K}$. 在厚度为 L 的无限大平面上以及孔道内壁, 以 $\sigma = 0.153 \text{ nm}$ (σ 仅表示无限大平面以及孔道内壁上都存在原子, 而这些原子的排列是等距的, 即按等距离 σ 排列) 的距离均匀地分布着与打结高分子链相同的单体 (即 CH_3), 这些单体与打结高分子链单体的作用也采用与公式(3)相同的形式^[19,27]. 采用 MD 方法模拟打结高分子链的穿孔过程, 由于孔道只允许单个原子通过, 打结高分子链必须要在结点散开, 打结高分子链成为线性高分子链后才能穿越孔道, 那么散结的微观过程就成为研究的重点.

3. 结果与讨论

3.1. 拉动过程中结点大小的变化

首先, 根据 Kardar 等^[3] 的方法定义结的大小, 即采用 KMT (Koniaris-Muthukumar-Taylor) 算法对打结高分子链进行删减. 从第一个穿孔原子开始, 沿着打结高分子链的方向依次查找结形成的始端, 也就是形成结的第一个交叉处的原子, 将这个原子之前的部分链删掉. 继续沿着链的方向查找形成结的最后一个交叉处的原子 (对于 3_1 结来说是第三个交叉处的原子), 将这个原子之后的部分链删掉. 那么, 剩下的链长即为结的大小, 结的单位就是键的数目^[3]. 打结高分子链在穿孔过程中, 其结的大小会随拉动过程发生变化, 具体结果见图2和3. 现将图2和3对应起来详细分析其穿孔过程. 图2给出了当外场力为 $f=15$ 时 (单位为约化单位, 1个约化单位等于 1.44 pN ($1 \text{ pN} = 10^{-12} \text{ N}$)) 某两次穿孔过

程中结的大小 N_k 与拉动时间的关系. 在第一次穿孔过程中(即 run1), 开始结的大小为 66, 当拉动时间(t)为 6500 fs($1 \text{ fs} = 10^{-12} \text{ s}$)时, 结迅速减小至 49. 在 6400—7700 fs 区间内, 结大小保持不变, 之后随着拉动进行, 结的大小出现涨落变化, 直到拉动时间为 25000 fs 左右时散结. 再来分析图 3, 图 3 横坐标表示一条打结高分子链的各个原子, 纵坐标表示各个原子穿孔的不同时刻(第一个原子穿孔时刻记为 0). 第一次拉动过程中(即 run1), 在第 1—18 原子的区域, 速率几乎保持不变; 在第 18—20 原子区间, 打结高分子链在 4700—8000 fs 内穿孔速率较慢, 有的时候原子出现了来回运动现象; 对于第 20—40 原子, 穿孔速率保持不变; 而对于第 41—43 原子, 穿孔速率又变慢, 对应于散结的时间区域为 19600—23700 fs, 此时的打结高分子链自身要重新调整, 所以出现了穿孔速率变慢的情况. 从此刻以后, 打结高分子链就变成线型高分子链. 将图 2 和 3 中的第一次拉动对应起来, 可以看出, 在 4700—8000 fs 区间, 原子的穿孔时间较长, 穿孔速率较慢, 有的时刻穿孔速度小于零, 即为反方向运动. 在 20000—25000 fs 区间, 再次观察到原子的穿孔速率变慢的情况. 图 2 和 3 中第二次拉动(即 run2)的初始结大小为 80, 这时结比较大. 在图 2 中, 拉动 11000 fs 后结点大小直接由 80 减小至 57; 再看图 3 中的 run2, 当时间为 11000 fs 时, 正是突变区域, 说明结在经过高分子链拉动和与孔道平面原子的作用以后缩小, 并滞留在孔道口, 这对正在穿孔的其他原子形成阻力, 所以穿孔时间较长. 同时, 在图 2 的 run2 中, 拉动时间为 $t = 11000 \text{ fs}$ 以后, 当结的大小为 57 时有一些微小波动, 直到 $t = 15000 \text{ fs}$ 时散结, 对应于图 3 中 run2 的突变区域部分. 在外力拉动下, 打结高分子链穿过孔道时, 当结点与孔道平面的距离较小时, 由于整个结点无法同时穿过单孔, 这样结就滞留在孔道口, 在外力的拉动下结点的大小迅速减小, 如图 2 所示. 而由于高分子链原子间存在各种势能相互作用, 当结点缩小到一定程度, 原子间的 L - J 排斥势和高分子原子与平面原子之间的 L - J 排斥势增大, 结的大小就增大, 此时高分子链可能出现短暂的停留或返回. 在 run2 过程中没有出现像 run1 中结大小的涨落现象, 是因为 run2 的初始结足够大, 在外力拉动和孔道的作用下, 打结高分子链一边散结一边穿孔, 在没有减小至最小时结就已经散开了, 所以看到的只有结迅速减小而

没有出现结大小的涨落.

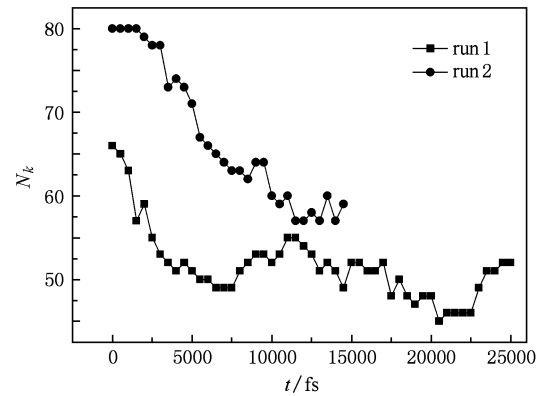


图 2 结的大小随穿孔时间的变化情况($f = 15$)

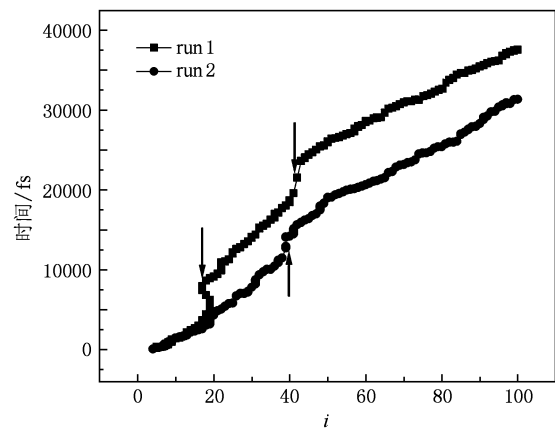


图 3 打结高分子链上各个原子的不同出孔时间($f = 15$)

3.2. 外场力对打结高分子链穿孔过程的影响

定义从第一个原子穿孔到最后一个原子穿孔的时间为穿孔时间, 所加外场力不同, 打结高分子链的穿孔时间也不同. 定义平均穿孔时间为 τ , 本文中 τ 为 1000 次穿孔时间的平均. 外场力是决定散结和穿孔时间的主要因素. 图 4 为不同外场力时, 打结高分子链平均穿孔时间与链长的标度行为. 这里对于打结高分子链, 外场力大小分别为 $f = 5, 15$ 和 25 (单位为约化单位), 为了比较, 同时计算了线性高分子链在外场力 $f = 15$ 的标度行为. 平均穿孔时间 τ 与链长 N 存在关系

$$\tau \sim N^\alpha. \quad (8)$$

当 $f = 5$ 时, $\alpha = 0.53$; 当 $f = 15$ 时, $\alpha = 0.67$; 当 $f = 25$ 时, $\alpha = 0.82$; 对于线性高分子链, $f = 15$ 时, $\alpha = 0.97$. 对于打结高分子链, 随着外场力的增加, 标度

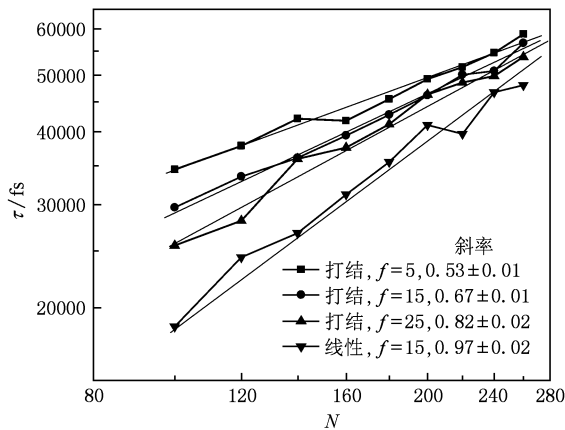


图4 不同外场力下打结高分子链平均穿孔时间与链长 N 的关系

系数 α 也增加. 当链比较短时, 外场力越小, 穿过小孔的时间就越大. 如对于链长 $N = 100$ 的打结高分子链, 当 $f = 5$ 时, 平均穿孔时间为 $\tau = 34500$ fs, 当 $f = 25$ 时, $\tau = 25500$ fs, 二者相比为 $\tau(f = 5)/\tau(f = 25) = 1.35$. 这说明对于较短的打结高分子链, 随着外场力的增加, 打结高分子链的平均穿孔时间变短. 其主要原因是当外场力较小时, 打结高分子链自身平均穿孔速率较慢, 所以在拉动过程中平均穿孔时间较长. 随着外场力的增加, 平均穿孔时间变短, 较大的外力使得打结高分子链更容易克服与孔道之间的排斥势, 打结高分子链自身平均穿孔速率较快. 对于较长的打结高分子链, 随着外场力的增加, 由于结的存在, 使得平均穿孔速率会适当变慢. 如对于链长 $N = 260$ 的打结高分子链, 当 $f = 5$ 时, $\tau = 58800$ fs, 当 $f = 25$ 时, $\tau = 53700$ fs, 二者相比为 $\tau(f = 5)/\tau(f = 25) = 1.09$, 明显小于链长 $N = 100$ 的情形. 从图4还可以看出, 当链长足够大时, 较大外场力作用下的平均穿孔时间会大于较小外场力作用下的平均穿孔时间, 即较大外场力下平均穿孔时间反而较长. 这主要与打结高分子链的结构有关. 一方面, 在较大外场力下, 打结高分子链平均向右速率会变大, 这样使得平均穿孔时间变短; 但另一方面, 结要反复经过迅速变小-扩散-变大这个过程, 在结反复的变小变大过程中, 对高分子链穿孔会形成阻力, 这样使得平均穿孔时间变长. 链越长, 这个效果就越明显. 而在外场力较小时, 结自身的扩散足以缓冲外场力的拉动, 不会出现结迅速变小, 滞留在孔道的现象, 也不会出现结变小-扩散-变大这个过程, 穿孔比较顺利, 这样平均穿孔时间相对

较短. 对于线性高分子链, 由于没有结的存在, 就不存在结与孔道相遇产生的反复短暂停留或向后运动, 穿孔比较顺利, 所以外场力越大, 平均穿孔时间越短.

3.3. 结点处于不同位置对标度行为的影响

结在分子链中的位置不同, 其平均穿孔时间也就不同. 图5给出了不同结的位置时平均穿孔时间 τ 与链长 N 的关系. 首先, 结的位置通过参数 p 来定义,

$$p = \frac{N_p}{N}, \quad (9)$$

N_p 表示第一个穿孔原子到结第一个交叉处的原子之间的键的数目. p 越大, 表示结越远离第一个穿孔原子. 如图5所示, 横坐标表示链长 N , 纵坐标表示不同链长的打结高分子链穿越孔道所需要的平均时间, 图中给出了在 $p = 0.1, 0.5$ 和 0.7 时平均穿孔时间 τ 与链长 N 的关系, $p = 0.1, 0.5$ 和 0.7 分别对应于结在分子链中的前、中、后三个不同位置, 这里外场力 f 均为 15. 从图5可以看出, τ 与 N 有很好的标度关系, 即

$$\tau \sim N^\alpha. \quad (10)$$

不同的结位置, 有不同的标度系数. 当 $p = 0.1$ 时, $\alpha = 0.54$; 当 $p = 0.5$ 时, $\alpha = 0.78$; 当 $p = 0.7$ 时, $\alpha = 1.02$. 很显然, 当 $p = 0.1$ 时, 平均穿孔时间最长, 当 $p = 0.7$ 时, 平均穿孔时间最短. 这些结果很容易理解, 打结高分子链被拉动开始以后, 经过一段类似于线性高分子链的穿孔运动以后到达结的位置, 接下来就是结的穿孔. 结在遇到孔道之后, 结的大小迅速变小, 结会滞留在孔道口, 整条链出现短暂的停留或返回. 经过扩散运动以后继续在外场作用下

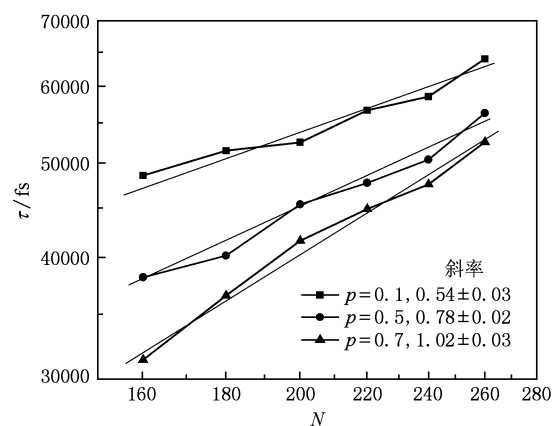


图5 结的不同位置对平均穿孔时间的影响

穿孔,遇到结继续停留或返回,如此反复进行直到散结.散结后,打结高分子链就成为线性高分子链,而线性高分子链的穿孔不会出现上述的停留或返回.相同的链长,由于结位置不同,结与孔道相遇停留或返回的平均次数不一样, p 越小,结越靠近第一个穿孔原子,停留或返回次数越多,穿孔时间就越长.随着 p 的增大,结越靠近链的尾部,停留或返回次数减少,或者不出现停留或反弹过程,拉动过程中越容易散结,穿孔时间越短.如对于 $N = 200$ 的打结链, $p = 0.1$ 时, $\tau = 52500$ fs; $p = 0.5$ 时, $\tau = 45400$ fs; $p = 0.7$ 时, $\tau = 41600$ fs.在图 4 中的打结高分子链的平均穿孔时间,是结在不同位置时穿孔时间的平均.

4. 结 论

本文采用 MD 方法,研究了打结高分子链在外场力作用下穿越微孔的动力学行为.模拟发现:在打结高分子链的穿孔过程中,对于初始较小的结,它的大小随时间呈涨落变化,直到散结;而对于初始足够大的结,结大小一直减小,直到散结,不会出现涨落变化.从打结高分子链各个原子的不同穿孔时间中发现,结未散开时穿孔速率比较慢,结散开后穿孔速率比较快,且明显看出结在最终散开时打结高分子链穿孔会停顿一段时间.这说明高分子链从打结高分子链转变为线性高分子链自身需要重新调整,所以就出现了穿孔时刻的突变区域.通过

计算发现以下两方面决定了打结高分子链的穿孔时间.首先,外场力不同,穿孔时间不同.外场力是决定散结及其穿孔行为的直接因素.不同外场力下,其穿孔时间 τ 与链长 N 存在标度关系,即 $\tau \sim N^\alpha$.对于较短的打结高分子链,散结比较容易,其穿孔行为类似线性高分子链,即随着外场力的增加,穿孔时间变短;而对于链长比较大的打结高分子链,散结比较困难,较大的外场力首先使得结变小,但由于孔道非常小,结必须经过扩散后变大,从而形成结的变小-扩散-变大的过程.这个变化过程本身对高分子链穿孔形成阻力,所以穿孔时间反而变长,链越长越明显.其次,结在链上位置不同,其穿孔时间也不同.初始结点越靠近链的第一个穿孔原子,其穿孔时间越长,反之,则越短.在相同外场力和链长情况下,结在链上所处位置直接决定其穿孔过程,影响穿孔时间的长短.

我们认为,在外场力作用下,打结高分子链在穿孔过程中,结大小随时间涨落的现象并非偶然,从打结高分子链自身来看,这与结的初始大小、位置和类型之间必定存在某种关系,这方面的工作正在深入研究之中.本文研究的打结高分子链,其结是三叶草型(即 3_1 结), 3_1 结是拓扑结构最简单的一种结,而更复杂的结(如 $4_1, 4_2, 5_1, 7_1$ 等)的穿孔特性与三叶草型结点可能有所不同,这需要我们进一步研究.通过这些研究,可以让人们对打结高分子(特别是打结 DNA)穿孔行为有一定认识,加深对生物大分子穿孔行为的理解.

-
- [1] Mansfield M L 1994 *Macromolecules* **27** 5924
- [2] Lua R, Borovinskiy A L, Grosberg A Y 2004 *Polymer* **45** 717
- [3] Virnau P, Kantor Y, Kardar M 2005 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 15102
- [4] Matthews R, Louis A A, Yeomans J M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 088101
- [5] Murzin A G, Brenner S E, Hubbard T, Chothia C 1995 *J. Mol. Biol.* **247** 536
- [6] Wang X H, Shen Y, Zhang L X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1684
- [7] Atiyah M F 1990 *The Geometry and Physics of Knots* (Cambridge: Cambridge University Press) p291
- [8] Katritch V, Bednar J, Michoud D, Scharein R G, Dubochet J, Stasiak A 1996 *Nature* **384** 142
- [9] Katritch V, Olson W K, Pieranski P, Dubochet J, Stasiak A 1997 *Nature* **388** 148
- [10] Virnau P, Mirny L A, Kardar M 2006 *PLoS Comput. Biol.* **2** 1074
- [11] Han J, Turner S W, Craighead H G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 1688
- [12] Turner S W P, Cabodi M, Craighead H G 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 128103
- [13] Grigoriev S M, Muro C, Dejean L M, Campo M L, Martinez-Caballero S, Kinnally K W 2004 *Int. Rev. Cytol.* **238** 227
- [14] Szabo I, Bathori G, Tombola F, Brini M, Coppola A, Zoratti M 1997 *J. Biol. Chem.* **272** 25275
- [15] Hanss B, Leal-Pinto E, Bruggeman L A, Copeland T D, Klotman P E 1998 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **95** 1921
- [16] Tseng Y L, Liu J J, Hong R L 2002 *Mol. Pharmacol.* **62** 864
- [17] Kasianowicz J J, Brandin E, Branton D, Deamer D 1996 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **93** 13770
- [18] Meller A, Nivon L, Brandin E, Golovchenko J, Branton D 2000 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **97** 1079
- [19] Jiang S C, Zhang L X, Xia A G, Chen H P, Cheng J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 018106

- [20] Ali I, Marenduzzo D, Yeomans J M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 208102
- [21] Ali I, Marenduzzo D, Yeomans J M 2008 *Biophys. J.* **94** 4159
- [22] Li Y L, Luo C L 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2589 (in Chinese) [李延龄、罗成林 2002 物理学报 **51** 2589]
- [23] Zhang X R, Shen Z G, Chen J F, Wang W C 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 163 (in Chinese) [张现仁、沈志刚、陈建峰、汪文川 2003 物理学报 **52** 163]
- [24] Xie Y J, Shi Q W, Wang X P, Zhu P P, Yang H Y, Zhang X Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2796 (in Chinese) [谢永军、石勤伟、王晓平、朱平平、杨海洋、张兴元 2004 物理学报 **53** 2796]
- [25] Luo K F, Ala-Nissila T, Ying S C, Bhattacharya A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 058101
- [26] Jiang S C, Zhang L X, Xia A G, Chen H P 2009 *Acta Phys. Sin.* **59** 4337 (in Chinese) [江绍钊、章林溪、夏阿根、陈宏平 2010 物理学报 **59** 4337]
- [27] Luo K F, Ala-Nissila T A, Ying S C, Bhattacharya A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 148102

A knotted polymer chain passing through a pore^{*}

Wen Xiao-Hui¹⁾ Zhang Lin-Xi^{2)†}

1) (Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

2) (Department of Physics, Wenzhou University, Wenzhou 325027, China)

(Received 16 November 2009; revised manuscript received 23 April 2010)

Abstract

A knotted polymer chain passing through a pore is investigated by molecule dynamics method. In this paper, we take 3_1 knot as an example. It is found that, during the process of translocation, the size of the knot fluctuates until the knot is unknotted. In addition, the effect of the knot on the translocation velocity of the knotted chain is also discussed. For the given external force, the average translocation time τ satisfies the scaling relation: $\tau \sim N^\alpha$, and the scaling exponent α increases with the external force f . For short knotted polymer chains, the average translocation time τ decreases when the external force f increases. However, for very long knotted polymer chains, the average translocation time τ increases when the external force f increases. In the meantime, the position of knot in a knotted polymer chain also affects the average translocation time τ strongly. The closer the knot approaches the first translocated monomer, the longer the average translocation time. This investigation can provide some insights into the translocation of knotted polymer chains (especially knotted DNA) through the nanopore, and help us understand the translocation behavior of biomacromolecules.

Keywords: molecule dynamics method, knotted polymer chain, translocation time, unknotted

PACC: 8120S

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 20574052, 20774066, 20974081, 20934004).

† Corresponding author. E-mail: Lxzhang@zju.edu.cn