89-825

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р17-89-825

И.Г.Бранков, В.Б.Приезжев

ИЗБЫТОЧНАЯ ПОВЕРХНОСТНАЯ ЭНЕРГИЯ В ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ БИОМЕМБРАНЫ

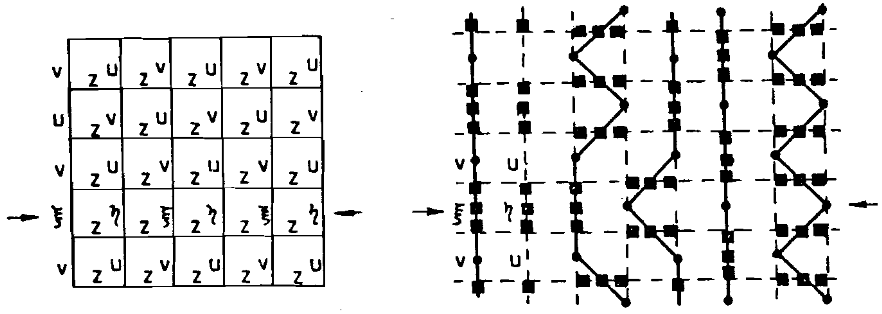
Направлено в "Journal of Physics A"

1989

Среди статистических моделей биомембраны важное место занимают двумерные решеточные модели [I,2] , благодаря возможности получения для них точного решения. Большинство из этих моделей относится к классу "свободных фермионов" [3] , наиболее известным представителем которого является двумерная модель Изинга. Полимерные модели из класса "свободных фермионов" обычно формулируются как модели димеров на различных решетках с разнообразным распределением весов димеров на рёбрах. Выбор решетки и распределение весов определяют конфигурационные свойства полимеров, отражаемые тремя основными характеристиками: плотностью ρ , гибкостью и степенью упорядочения полимерных цепочек. В работе [I] Нейгл предложил достаточно простую модель на квадратной решетке, которая включает в себя все три параметра и является обобщением первоначально изученной модели Кастеляйна (К-модели). В обзоре [4] , суммирующем достижения в изучении анизотропных димерных моделей, эта модель названа шахматной квадратной моделью Кастеляйна; здесь для краткости мы будем называть её SQ-моделью. SQ -модель формулируется как задача о димерах на квадратной решетке с чередующимися в шахматном порядке весами u и v димеров на вертикальных ребрах и одинаковыми весами z димеров на горизонтальных ребрах (см. рис. I (а)). На рис. I (б) показано соответствие между димерным и полимерным представлением этой модели [1,4] . Число полимеров на решетке определяется разностью чисел димеров с весами u и v , расположенных в одной строке. Число изгибов полимеров (точнее число наклонных звеньев) определяется числом горизонтальных димеров с весом z . Полностью упорядоченное состояние соответствует заполнению димерами всех ребер с весом u .

Большинство полученных до сих пор решений моделей мембраны, включая SQ-модель, относятся к трансляционно-инвариантному случаю, когда двумерная мембрана предполагается свернутой в тор. В то же время изучение поверхностного натяжения мембраны σ, а также взаимодействия полимеров мембраны с макроскопическими примесями требует решения модели на решетке с границей. В работе [5] было найдено решение К-модели с границей, расположенной вдоль основной ориентации полимерных звеньев, и показано, что $\sigma \sim \rho^2$, в отличие от трехмерного случая, когда $\sigma \sim \rho^{3/2}$. Значительно больший интерес, однако, представляет изучение естественной поверхности мембраны, т.е. границы, расположенной перпендикулярно к ориентации полимеров. Выяснение влияния статистики полимерных звеньев на поверхностное натяжение мембраны и определение его зависимости от параметров SQ-модели составляют основную цель данной статьи.

Из формулировки SQ-модели следует, что элементарная ячейка содержит четыре узла решетки. Добавление границы означает изменение весов u и v на ξ и η в одной строке и приводит к необходимости диагонализации довольно громоздкой матрицы. Радикальное упрощение задачи может быть достигнуто, если заметить, что между статсуммой SQ-модели с линейным дефектом $\Lambda_{SQ}(z,u,v;\xi,\eta)$ и статсуммой однородной модели димеров $(u=v=y)$ с таким же дефектом, $\Lambda_{HQ}(z,y;\xi,\eta)$, существует взаимооднозначное соответствие. Соответствие между этими статсуммами устанавливается с помощью закона сохранения, сформулированного в работе [4]: на каждой строке разность Δ числа димеров с весами u и v одна и та же. Этот закон, разумеется, отражает просто факт непрерывности полимерных цепей.



а) б)

Рис. I. Шахматная димерная модель на квадратной решетке с линейным дефектом. Ряд с измененными значениями активностей вертикальных ребер указан стрелками. (а) Распределение активностей ребер. (б) Соответствие между димерным и полимерным представлениями модели.

Рассмотрим димерную модель на квадратной решетке размером $M \times N$ с периодическими граничными условиями и с активностями ребер, выбранными в соответствии с рис. I(а). При умножении всех активностей на константу λ статистическая сумма этой модели изменится на тривиальный множитель λ^{2MN}. Если выберем $\lambda = (uv)^{-1/2}$ и учтем, что $n_u - n_v = (N-1)\Delta$, где $n_u(n_v)$ - полное число димеров на u-ребрах (v-ребрах) и $n_\xi - n_\eta = \Delta$, то получим:

$$\Lambda_{SQ}(z,u,v;\xi,\eta) = \sum_{\{C\}} z^{n_z} u^{n_u} v^{n_v} \xi^{n_\xi} \eta^{n_\eta} =$$

$$= (uv)^{-MN} \sum_{\{C\}} \tilde{z}^{n_z} [\tilde{\xi}\, \tilde{u}^{(N-1)}]^{n_\xi} [\tilde{\eta}\, \tilde{v}^{(N-1)}]^{n_\eta}. \qquad \text{(I)}$$

Здесь суммирование проводится по всем димерным конфигурациям $\{C\}$ и знак " $\sim$ " над активностью означает ее умножение на λ. Рассмотрим теперь однородную модель (HQ-модель) с активностью горизонтальных ребер x, вертикальных ребер

$u = v = y$ и с тем же линейным дефектом. Ее статистическая сумма имеет вид

$$\Lambda_{HQ}(x, y; \xi, \eta) = \sum_{\{C\}} x^{n_x} y^{n_y} \xi^{n_\xi} \eta^{n_\eta} . \tag{2}$$

Сравнивая правые части (I) и (2), мы получаем соотношение:

$$\Lambda_{SQ}(z, u, v; \xi, \eta) = (uv)^{-MN} \Lambda_{HQ}(x, 1; \xi_0 e^{\alpha N}, \eta_0 e^{-\alpha N}), \tag{3}$$

в котором

$$x = z(uv)^{-1/2}, \; \xi_0 = \xi/u, \; \eta_0 = \eta/v, \quad \alpha = \frac{1}{2} \ln(u/v). \tag{4}$$

Найденное соответствие позволяет перейти к исследованию более простой модели димеров - HQ-модели с линейным дефектом. Эта задача уже была рассмотрена нами в работе [6] в связи с предложенной там моделью кристаллизации. В случае решетки в форме бесконечно длинного цилиндра $(\infty \times N)$ были получены точные выражения для плотностей димеров на ξ и η ребрах, справедливые при любом четном N :

$$\rho_\xi^{(N)}(x, y; \xi, \eta) = \frac{\xi}{2(\xi + x)} \left\{ 1 - \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\varphi \; \times \right.$$

$$\left. \times \frac{y(y-\eta) + y(y+\eta) R(\varphi)[1 + 2\delta_N(\varphi)]}{y^2 + \xi\eta + (y^2 - \xi\eta) R(\varphi)[1 + 2\delta_N(\varphi)] + 2(\xi + y)(\eta + y)\delta_N(\varphi)[1 + \delta_N(\varphi)]} \right\} . \tag{5}$$

Здесь

$$R(\varphi) = x|\sin\varphi|(y^2 + x^2 \sin^2\varphi)^{-1/2}$$

$$\delta_N(\varphi) = y^N \{ [x|\sin\varphi| + (y^2 + x^2 \sin^2\varphi)^{1/2}]^N - y^N \}^{-1} . \tag{6}$$

Выражение для $\rho_\eta^{(N)}$ получается из (5) переменой мест ξ и η.

Исходя из определения избыточной свободной энергии в SQ-модели, с учетом (3) мы получаем

$$\sigma_{SQ}^{(N)}(z, u, v; \xi, \eta) \equiv \ln[\Lambda_{SQ}^{(N)}(z, u, v; u, v) / \Lambda_{SQ}^{(N)}(z, u, v; \xi, \eta)] =$$

$$= \ln[\Lambda_{HQ}^{(N)}(x, 1; e^{\alpha N}, e^{-\alpha N}) / \Lambda_{HQ}^{(N)}(x, 1; \xi_0 e^{\alpha N}, \eta_0 e^{-\alpha N})] =$$

$$= -\int_1^{\xi_0} \rho_\xi^{(N)}(x, 1; \xi_0' e^{\alpha N}, e^{-\alpha N}) \frac{d\xi_0'}{\xi_0'} - \int_1^{\eta_0} \rho_\eta^{(N)}(x, 1; \xi_0 e^{\alpha N}, \eta_0' e^{-\alpha N}) \frac{d\eta_0'}{\eta_0'} , \tag{7}$$

где параметры x, ξ_0, η_0 и α определены в (4). В термодинамическом пределе $N \to \infty$ равенство (7) приводит к выражению

$$\sigma_{SQ}(z, u, v; \xi, \eta) = -|\Delta| \left\{ \begin{matrix} \ln(\xi/u) \\ \ln(\eta/v) \end{matrix} \right\} -$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\pi|\Delta|}^{\pi(1-|\Delta|)} d\varphi \ln \left\{ \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\xi\eta}{uv}\right) + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\xi\eta}{uv}\right) \frac{z\sin\varphi}{\sqrt{uv + z^2\sin^2\varphi}} \right\} , \tag{8}$$

где параметр Δ выражается линейно через плотность полимеров ρ , $\rho = \frac{1}{2} + \Delta$, и зависит только от объемных характеристик решетки:

$$\Delta = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \arcsin \frac{(u-v)}{2z} , & |u - v| \le 2z \\ \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(u - v) , & |u - v| \ge 2z . \end{cases} \tag{9}$$

В правой части (8) следует брать $\ln(\xi/u)$ при $u \ge v$ и $\ln(\eta/v)$ при $u \le v$. Подчеркнем, что здесь мы определяем плотность ρ как число полимерных цепей на единицу длины сечения, перпендикулярного их ориентации, в отличие от плотности полимерных цепей, введенной Нейглом [I].

Поведение избыточной свободной энергии при малой плотности полимеров, $\rho \to 0$, когда $v - u \to 2z$, дается разложением

$$\sigma_{SQ}(z,u,v;\xi,\eta) = -\tfrac{1}{2}\ln(\eta/v) + \ln\Big[\frac{\eta(u+v)}{v^2+\xi\eta}\Big]\rho + \mathcal{O}(\rho^2). \qquad (10)$$

Видно, что σ_{SQ} линейно зависит от ρ, и отличается от закона $\sigma \sim \rho^2$ для границы, расположенной вдоль ориентации полимеров. Знак коэффициента при ρ зависит от соотношения между объемными параметрами u, v и поверхностными параметрами ξ, η. Наличие закона сохранения не дает нам возможности говорить о притягивающих или отталкивающих граничных условиях, так как число полимеров сохраняется в каждом поперечном сечении мембраны. Вместо этого удобно ввести понятие комплементарности граничных условий. Для прояснения физического смысла этого понятия рассмотрим малые отклонения от трансляционно-инвариантного случая, положив $\xi = u+du$, $\eta = v+dv$. Тогда с учетом (9) для коэффициента при ρ в разложении (10) получим

$$-\frac{1}{u+v}(du-dv) = -\frac{2\pi z\cos[\pi(\rho-\frac{1}{2})]}{u+v}\,d\rho \simeq -\frac{2\pi^2 z}{u+v}\rho\, d\rho.$$

Следовательно, если при замене всех объемных активностей u, v на их граничные значения ξ, η плотность ρ полимеров возрастает, то в достаточно малой окрестности точки $\xi=u, \eta=v$ знак коэффициента при ρ отрицателен, и избыточная свободная энергия понижается с ростом ρ. Назовем такие граничные условия комплементарными. В противоположном случае, когда замена u, v на ξ, η приводит к понижению плотности полимеров, то знак коэффициента при ρ положителен, и избыточная свободная энергия возрастает с ростом ρ. Такие граничные условия будем называть некомплементарными.

Аналогично, в пределе плотной упаковки, $\rho \to 1$, когда $u - v \to 2z$, получаем

$$\sigma_{SQ}(z,u,v;\xi,\eta) = -\tfrac{1}{2}\ln(\xi/u) - \ln\Big[\frac{u^2+\xi\eta}{\xi(u+v)}\Big](1-\rho) + \mathcal{O}[(1-\rho^2)]. \qquad (11)$$

Легко проверить, что и в этом случае имеет место то же самое соотношение между комплементарностью граничных условий и знаком коэффициента при ρ.

Рассмотрим теперь избыточную свободную энергию в пределе малой гибкости полимерных цепочек. В качестве меры гибкости выберем плотность горизонтальных димеров в SQ-модели, для которой Нейглом [I] было получено выражение (в наших обозначениях)

$$\rho_z(z,u,v) = \frac{1}{2}\Big\{1-\frac{1}{\pi}\arccos\Big[1-\frac{(u+v)^2}{2(uv+z^2)}\Big]\Big\}. \qquad (12)$$

В пределе $\rho_z \to 0$, когда $z(uv)^{-1/2} \to 0$ при фиксированной плотности ρ, получаем

$$\sigma_{SQ}(z,u,v;\xi,\eta) = \sigma_{SQ}^{(0)} + \frac{\xi\eta - uv}{\xi\eta+uv}\rho_z + \mathcal{O}(\rho_z^2). \qquad (13)$$

Для интерпретации знака линейного члена в этом разложении снова обратимся к понятию комплементарности границы. Заметим, что в силу (9) при фиксированной плотности ρ гибкость ρ_z является монотонно возрастающей функцией параметра $X = z(uv)^{-1/2}$. Заменим u, v соответственно на ξ, η и рассмотрим новое значение параметра $X' = z(\xi\eta)^{-1/2}$. Если $X' > X$, то такая замена приводит к увеличению плотности горизонтальных димеров, т.е. увеличению числа наклонных звеньев. Такие границы будем называть комплементарными по отношению к гибкости. Тогда знак коэффициента при ρ_z

в разложении (13) отрицателен при комплементарной границе и положителен при некомплементарной.

Полученные нами результаты для поверхностного натяжения мембраны носят, разумеется, модельный характер. Вывод аналогичных соотношений для трехмерной модели мембраны, предложенной Изуяма и Акуцу в [7] , приблизил бы теоретические оценки к реальным экспериментальным условиям.

Литература

1. J.F. Nagle, J. Chem. Phys. 58 (1973) 252-264.
2. J.F. Nagle, Ann, Rev. Phys. Chem 31 (1980) 157.
3. C.Fan, F.Y. Wu, Phys. Rev. B2 (1970) 723-733.
4. J.F. Nagle, C.S.O. Yokoi, S.M. Bhattacharjee, Dimer Modwls on Anisotropic Latties, in Phase Transition and Critical Phenomena, C. Domb and J.L. Labowitz, eds. (Academic Press, London) vol. 13.
5. V.B. Priezzhev, S.A. Terletsky, J. Phys. France 50 (1989) 599-608.
6. J.G. Brankov, V.B. Priezzhev, Physica A159 (1989) 386-406.
7. T. Izuyama, Y. Akutsu, J.Phys. Soc. Jpn 51 (1982) 50-58.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 декабря 1989 года.

Бранков Й.Г., Приезжев В.Б. Р17-89-825

Избыточная поверхностная энергия в двумерной модели биомембраны

Рассмотрена димерная модель биомембраны на квадратной решетке с чередующимися активностями на вертикальных ребрах. Поверхность мембраны моделируется линейной неоднородностью - измерением активностей вертикальных ребер в одном ряду решетки. Получено точное выражение для избыточной поверхностной энергии и изучена ее зависимость от параметров, определяющих плотность, гибкость и упорядочение полимерных цепей.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Brankov J.G., Priezzhev V.B. P17-89-825

Excess Surface Free Energy in a Two-Dimensional Model of a Biomembrane

The staggered quadratic dimer model of a biomembrane is considered in the case of a lattice with modified activities of the vertical bounds in a selected row. An exact expression for the excess surface free energy is obtained and its dependence on the bulk parameters which control the density, flexibility and ordering of the polymer chains is investigated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989