

# Механическое разворачивание гомополимерной глобулы: теория и моделирование

Смолякова Е. Е.

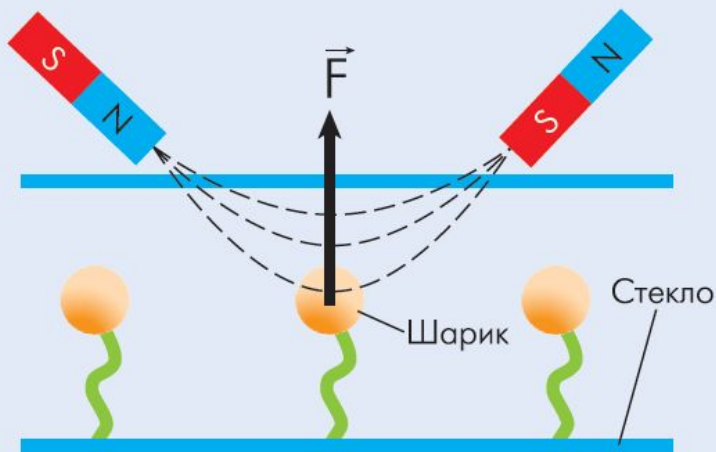
Полоцкий А.А.

Бирштейн Т.М.

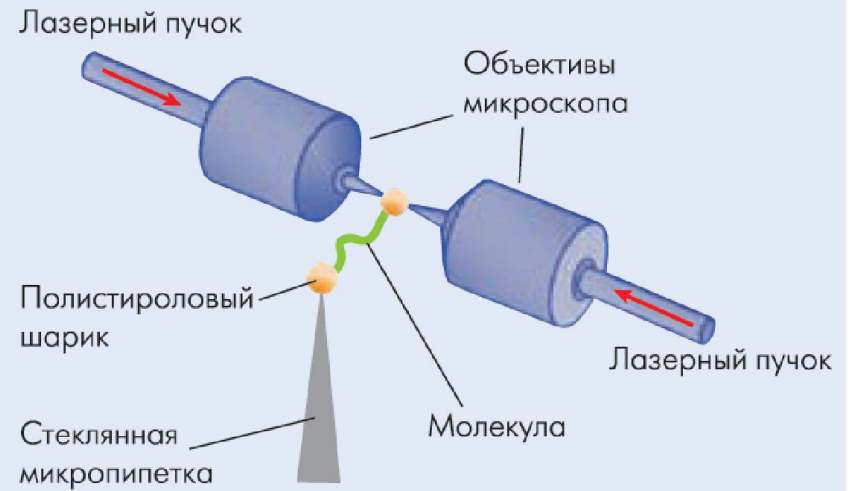
СПбГУ , 2012.

# Растягивание макромолекул:

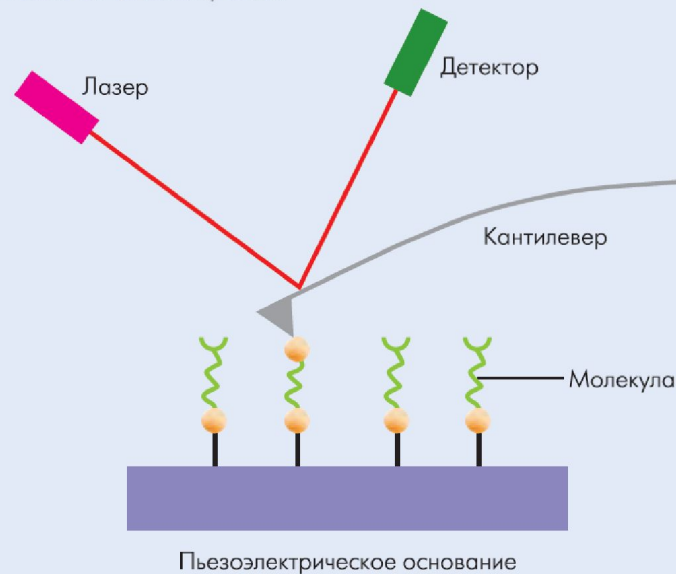
Магнитный пинцет



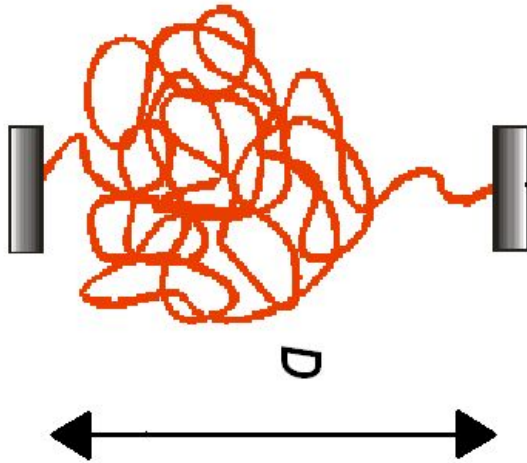
Оптический пинцет



Атомно-силовой микроскоп

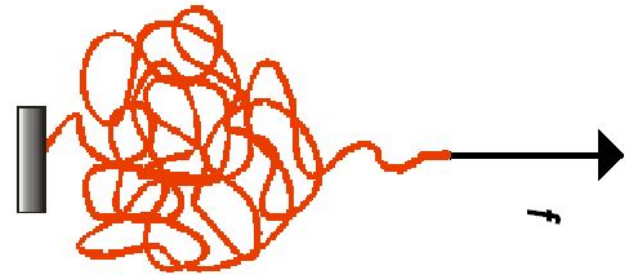


# Два метода манипулирования:



$D$  задано, измеряется  $f$

Свободная энергией  
Гельмгольца  $F$

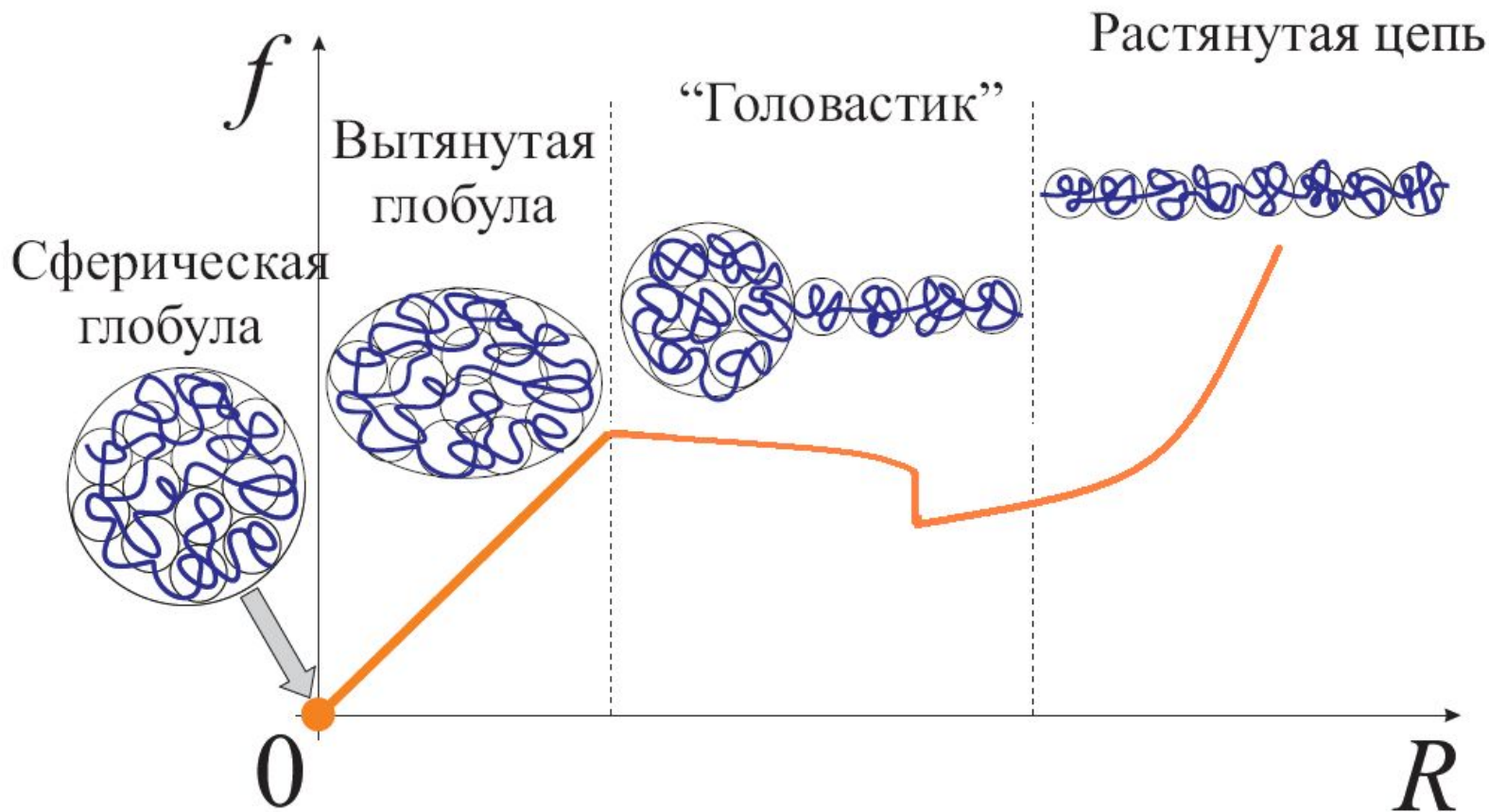


$f$  задано, измеряется  $D$

Свободная энергия  
Гиббса  $G$

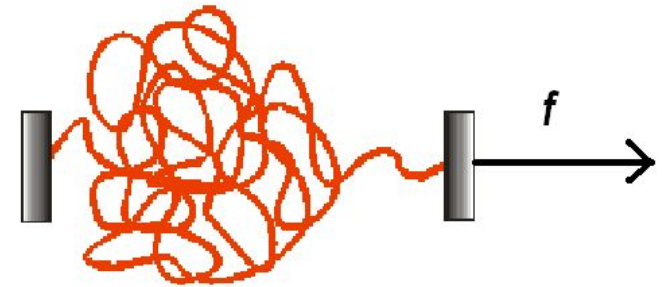
**Глобула** - состояние полимерной цепи, в котором флуктуации концентрации звеньев малы: их радиус корреляции значительно меньше размера макромолекулы

# Растягивание макромолекулы в $D$ - ансамбле



# Постановка задачи

- Глобула растягивается **постоянной внешней силой  $f$** .
- $N$  – количество мономеров в макромолекуле.
- $\chi$  – параметр качества растворителя. (параметр Флори)

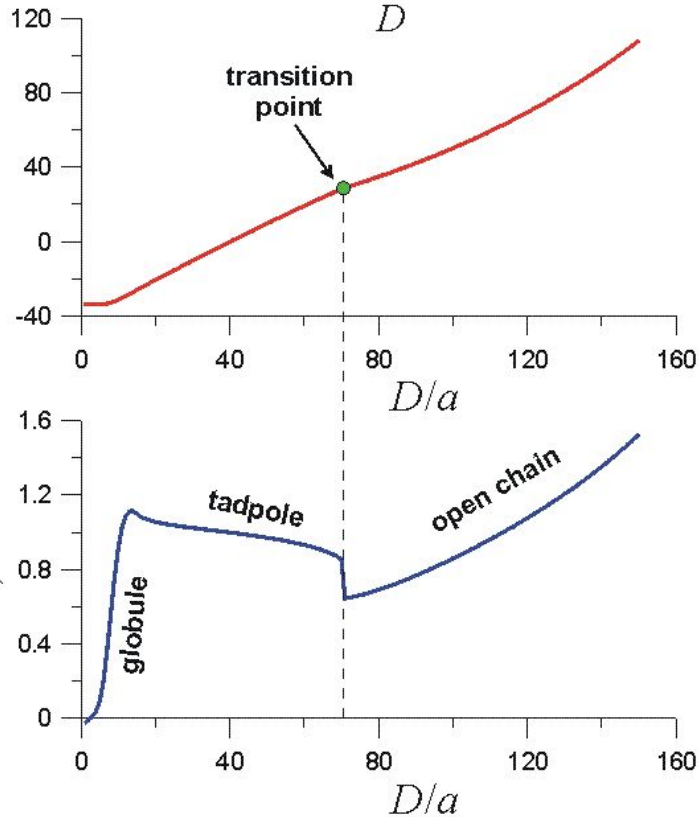
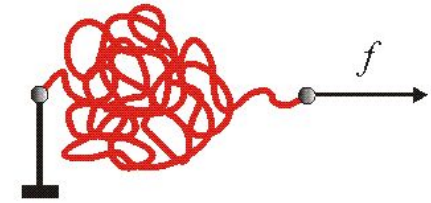
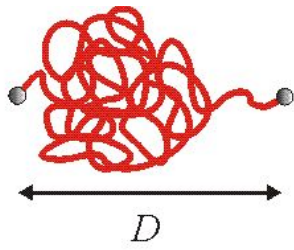


$$\chi = \frac{1}{k_B T} \left[ \varepsilon_{ps} - \frac{1}{2} (\varepsilon_{pp} + \varepsilon_{ss}) \right]$$

## ТРИ ЭТАПА РЕШЕНИЯ:

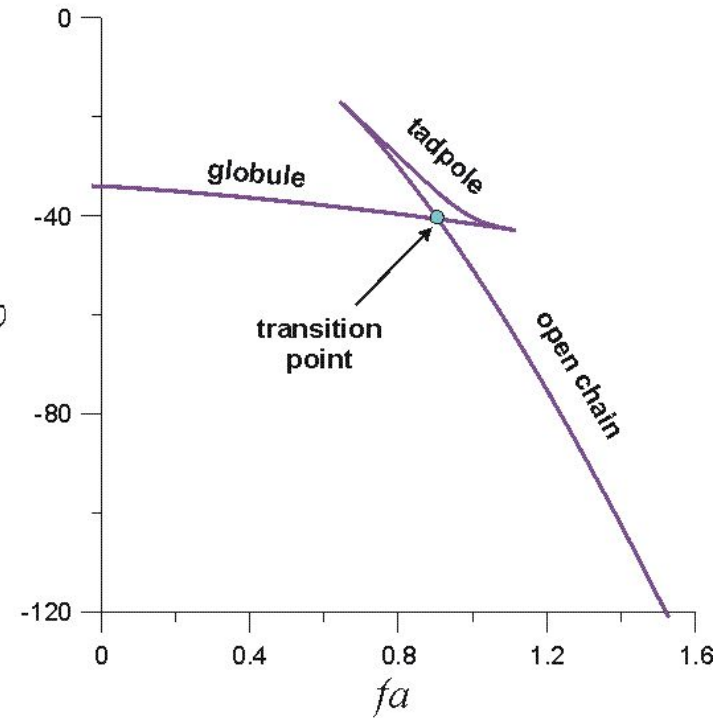
- Моделирование
- Аналитическая теория среднего поля
  - Флуктуационный подход

# Пересчет полученных ранее результатов

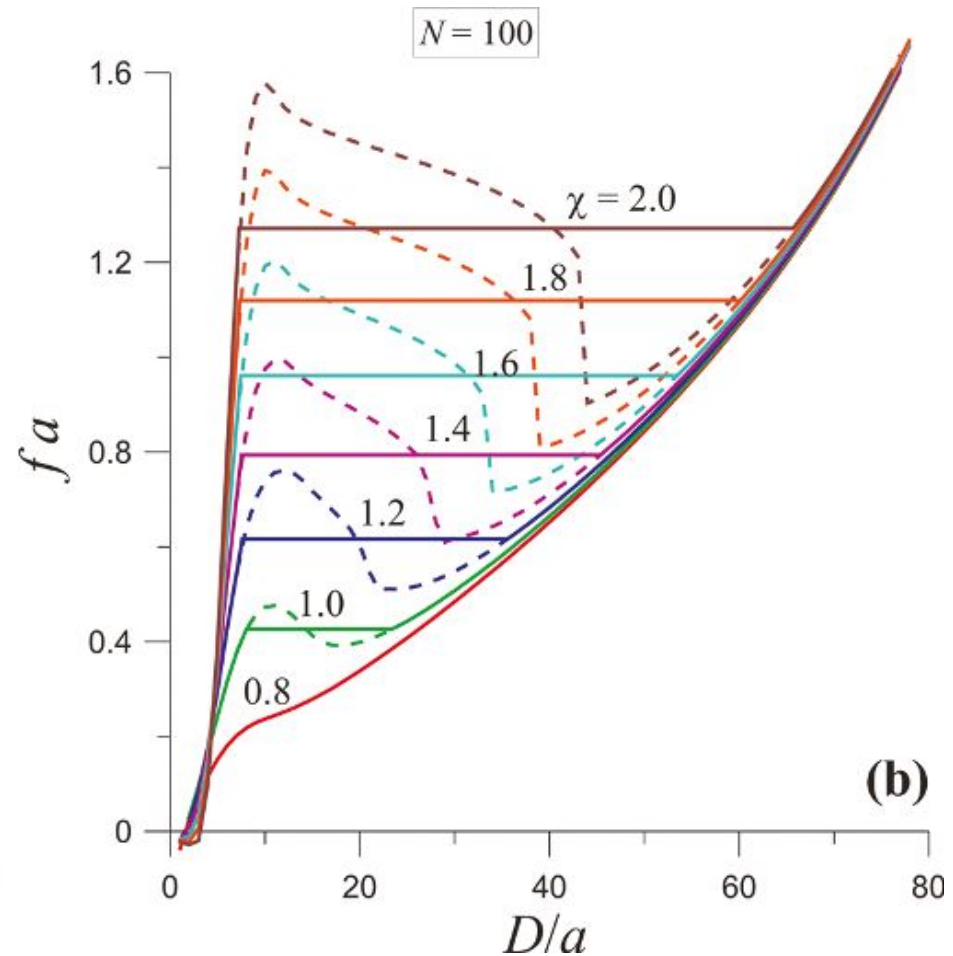
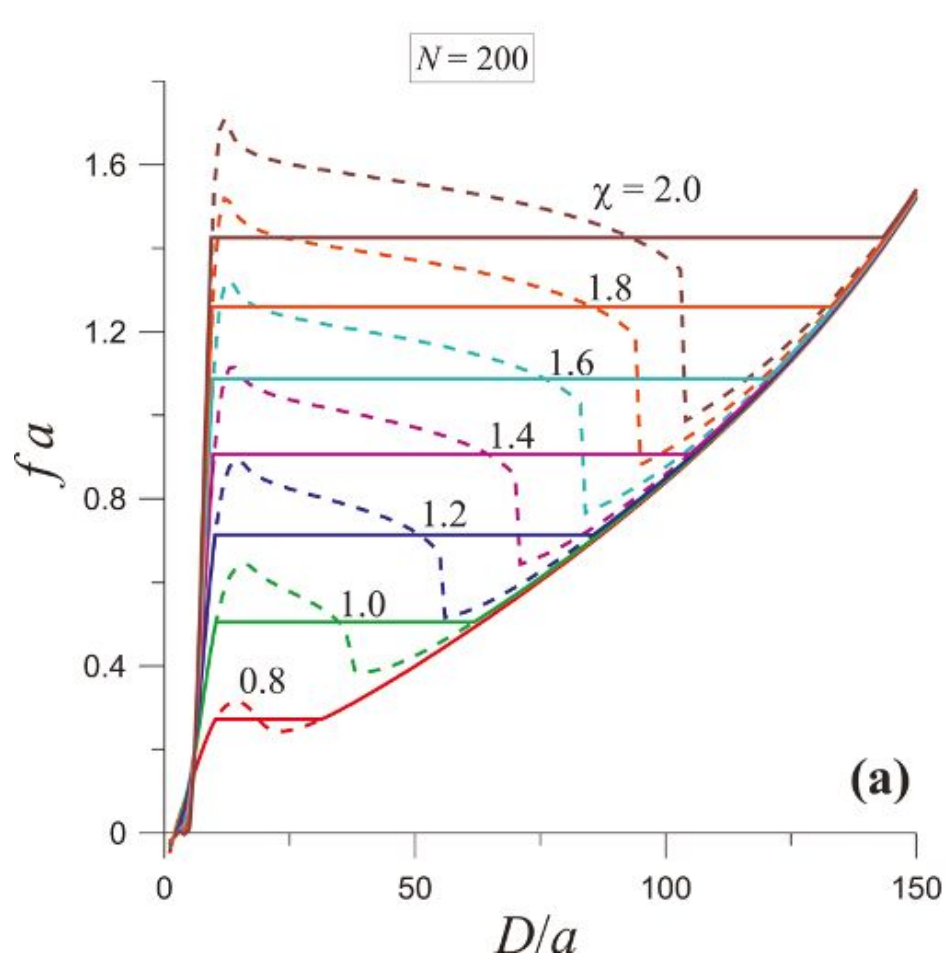


$$G = F - fD$$

$G$

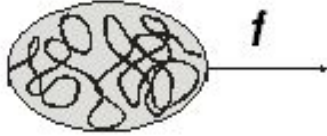


# Кривые деформации: $f$ - и $D$ - ансамбли



# Модель

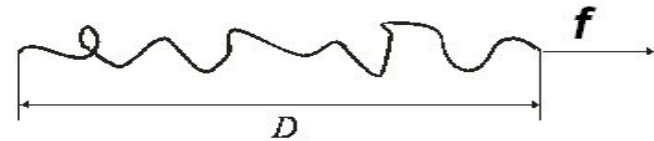
## 1. Слабо деформированная глобула



$$G_{globule} = \mu N + \gamma S_{globule} - fD$$

Аппроксимируем глобулу вытянутым эллипсоидом с постоянной плотностью

## 2. Растянутая цепь



$$G_{chain} = -N \log \left[ 1 + \frac{\cosh f - 1}{2k} \right]$$

$k$  – константа упругости (у нас  $k = 3/4$ )

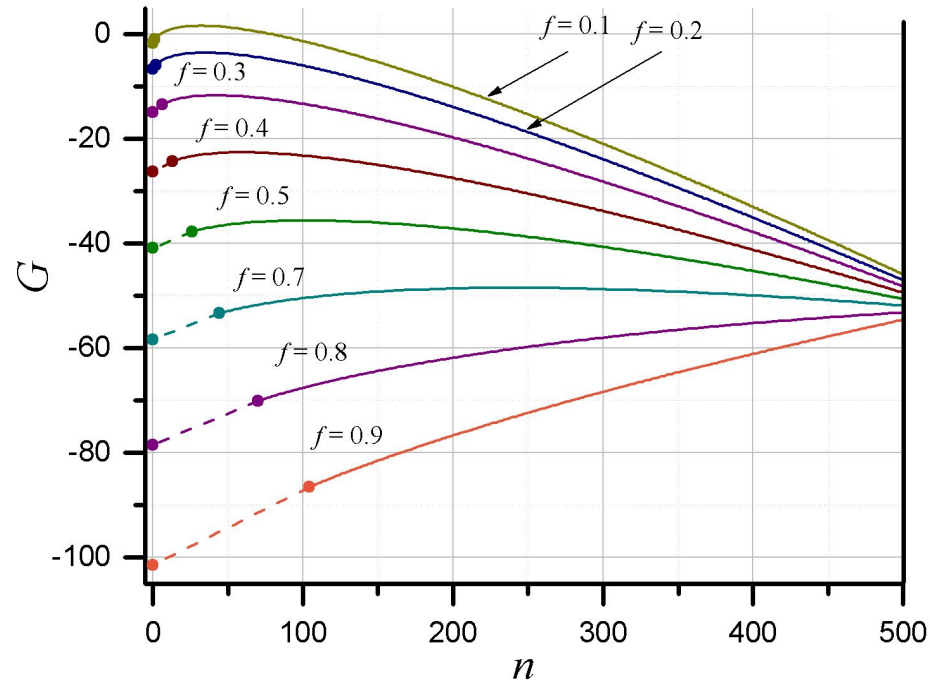
## 3. «Головастик»

$$G_{tadpole} = G_{globule}(n) + G_{chain}(N - n)$$



# Свободная энергия как функция состава

$$G_{tadpole} = G_{globule}(n) + G_{chain}(N - n)$$

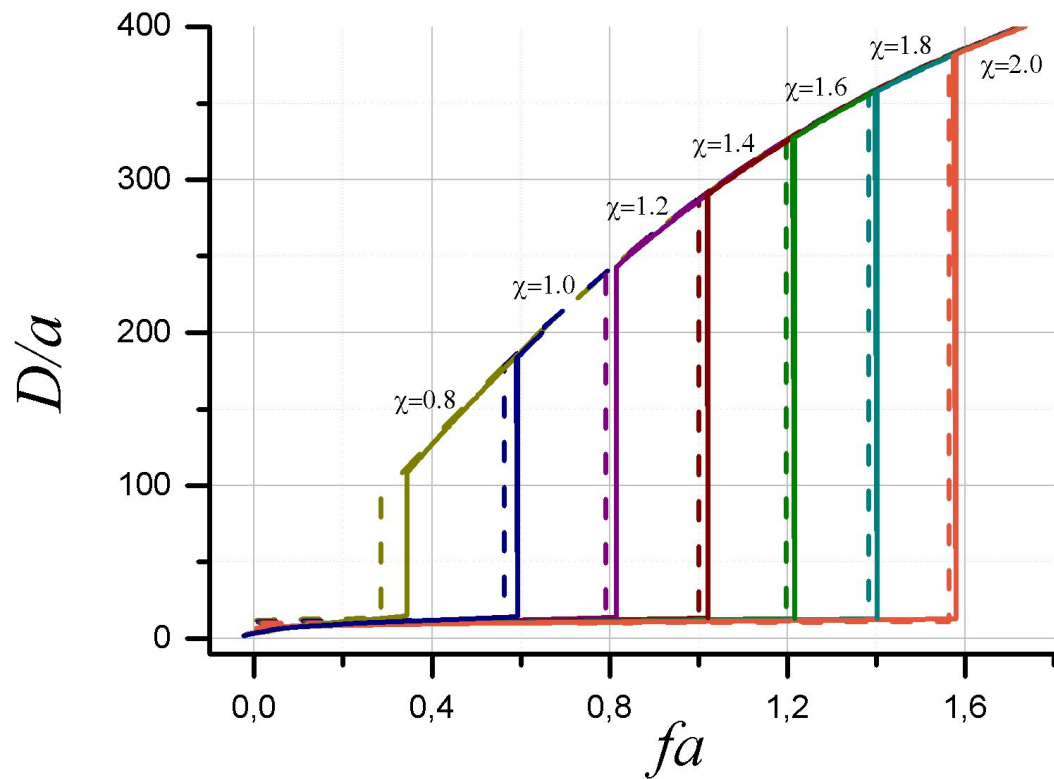
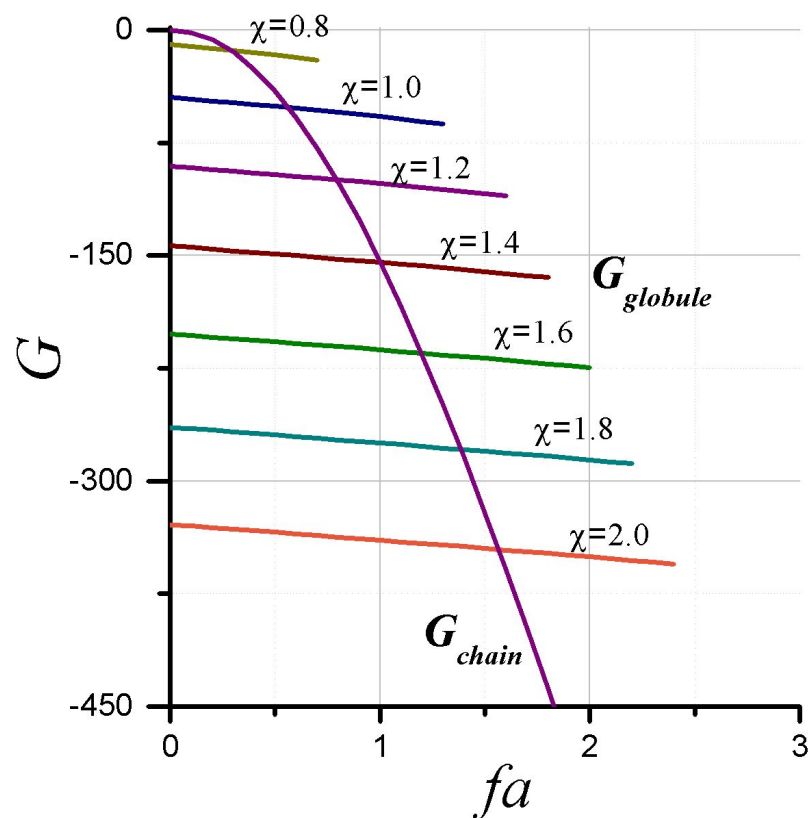


**Два подхода:**

$$G = \min\{G_{globule}, G_{chain}\}$$

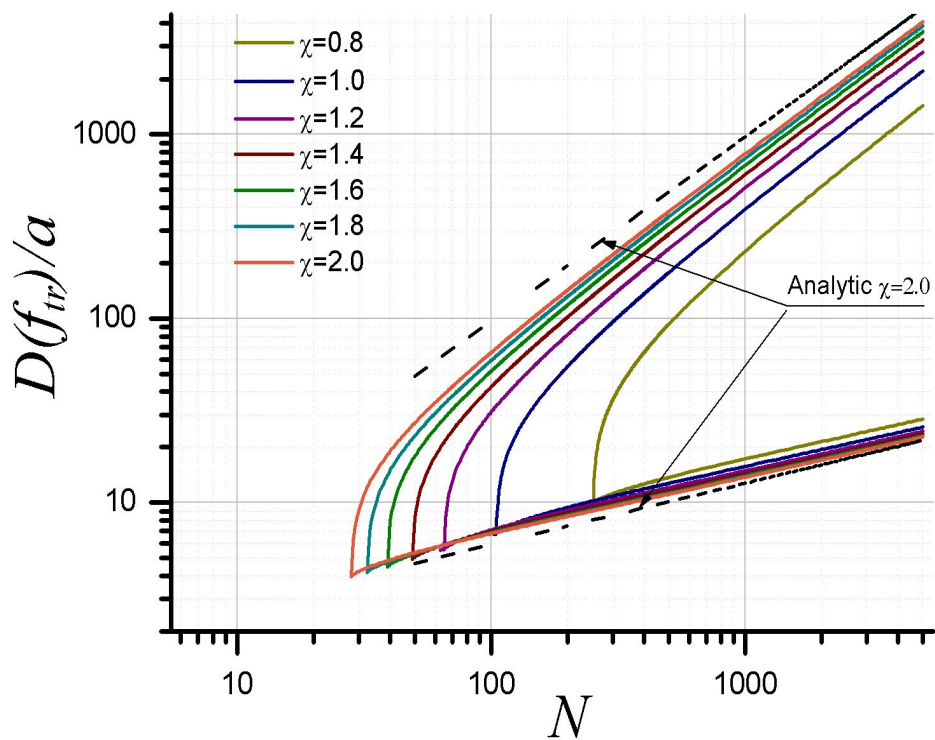
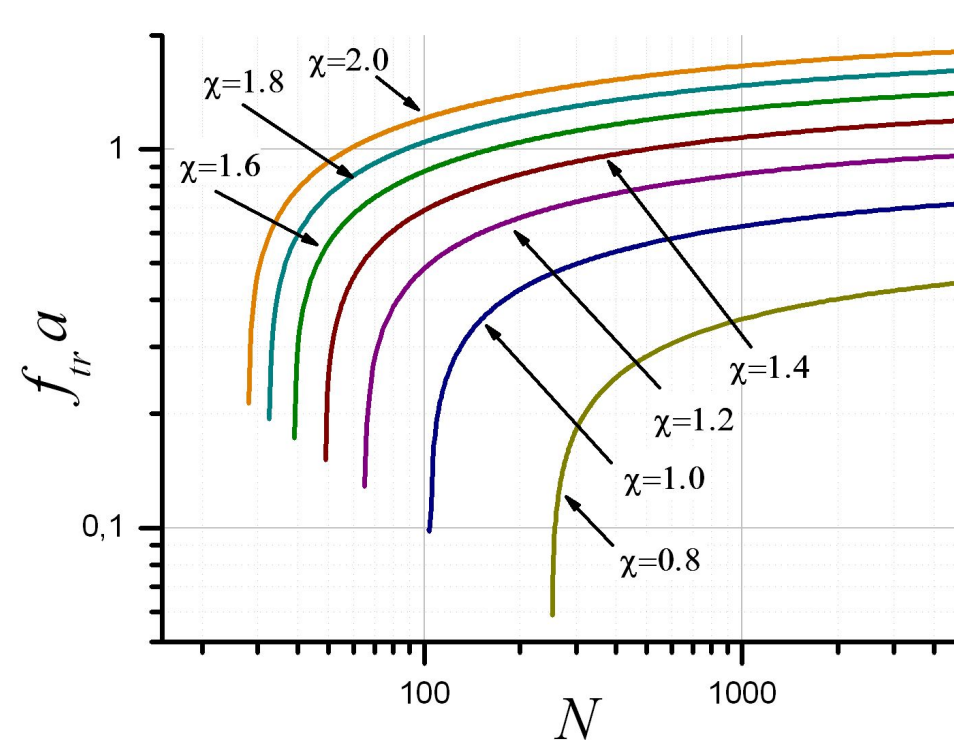
$$G = -\log Z$$

# Свободная энергия & Кривые деформации



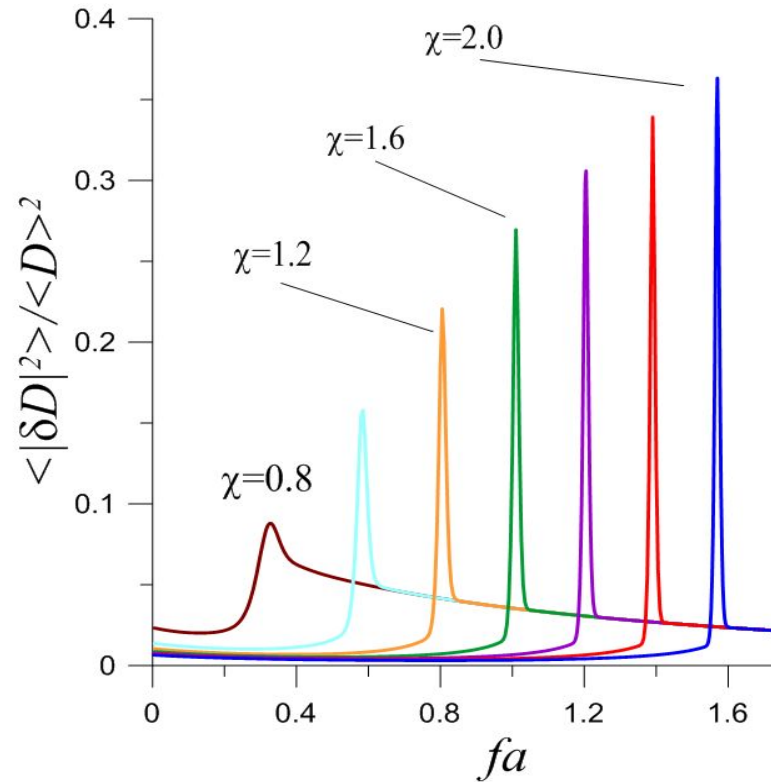
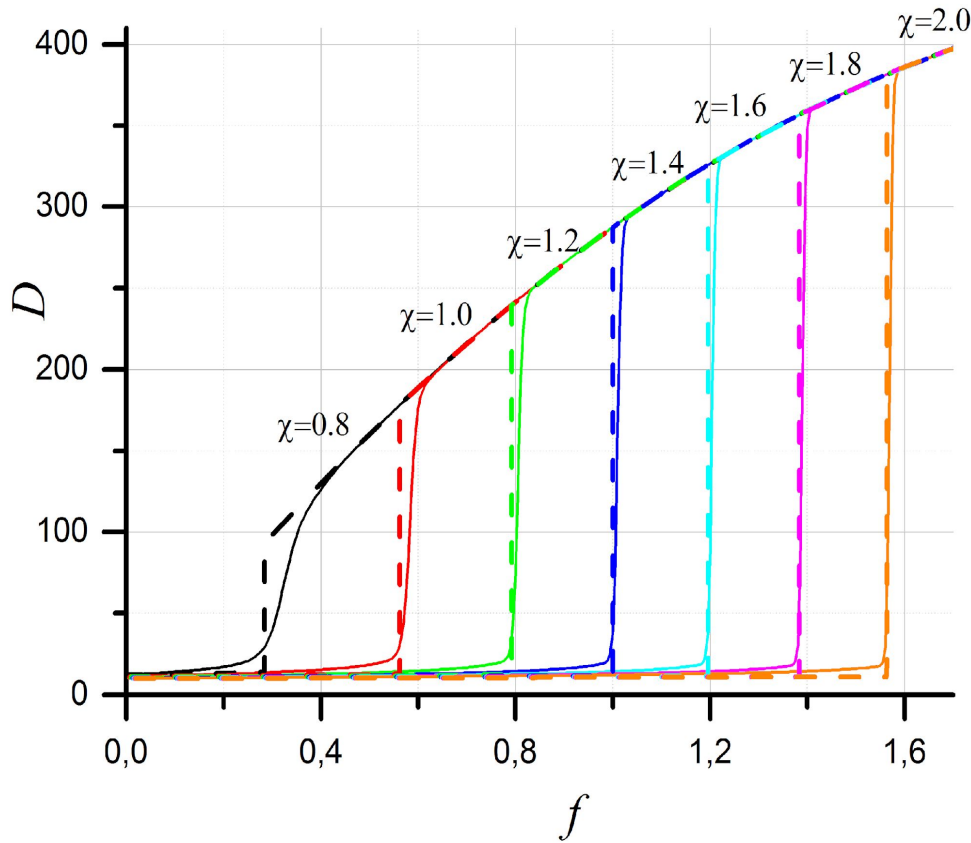
Чем больше параметр Флори, тем больше критическая сила раскрытия и тем больше скачок расстояния между концами глобулы в точке перехода.

# Точка перехода глобула – «открытая» цепь

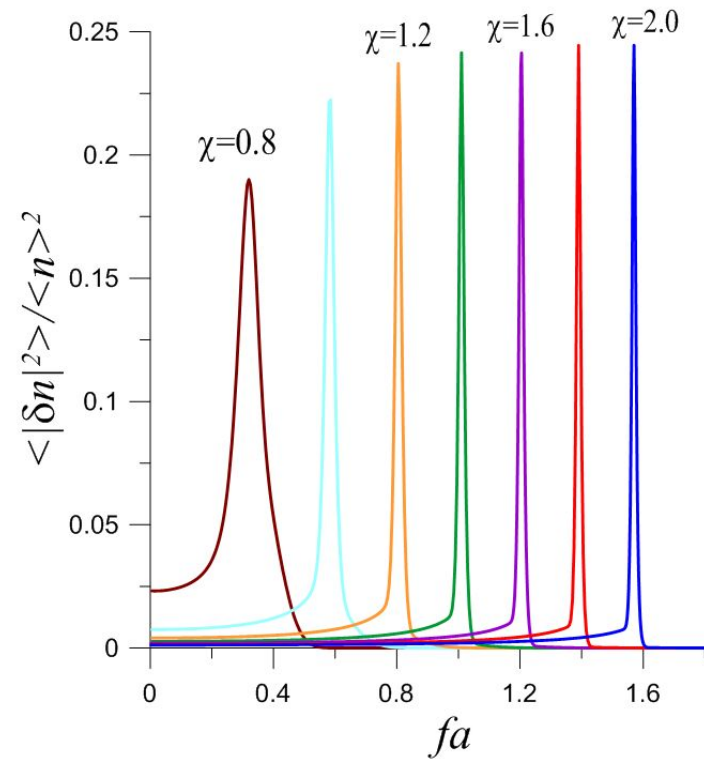
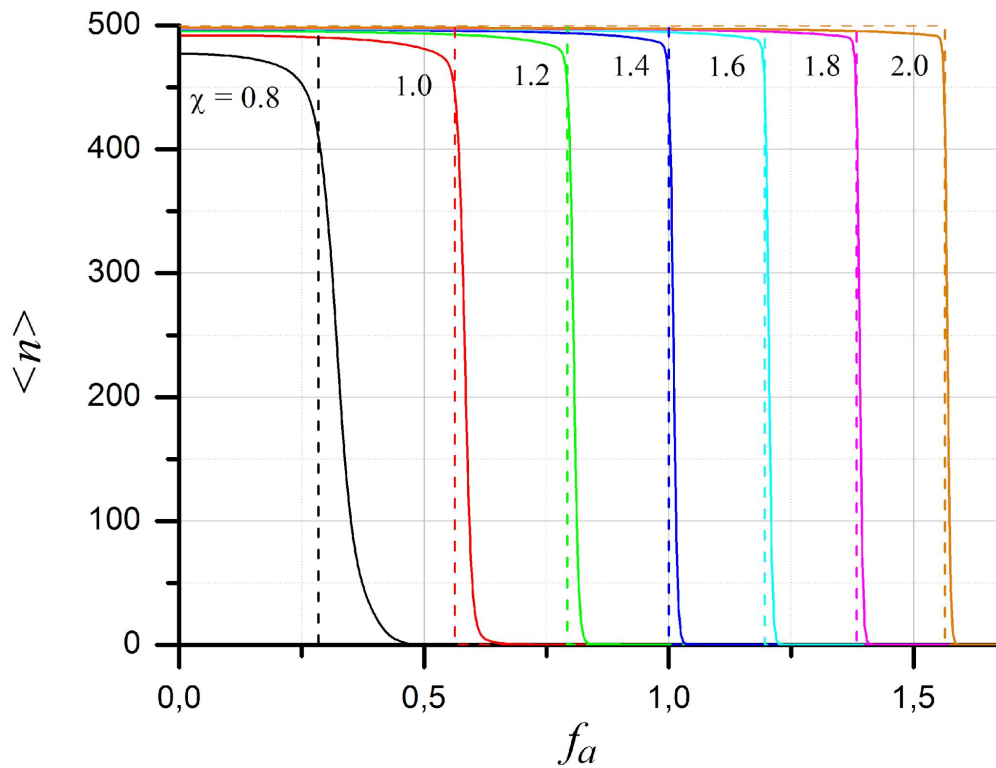


С ростом  $N$  увеличивается и критическая сила перехода, и расстояние между концами макромолекулы в точке перехода.

# Учет флуктуаций: среднее расстояние между концами



# Учет флуктуаций: среднее число мономеров в «ГОЛОВЕ»



# Заключение

- Увеличение растягивающей силы приводит к разворачиванию глобулы. В теории среднего поля это скачкообразный переход, без промежуточного состояния «головастика», учет флуктуаций приводит к «размытию» скачка.
- С увеличением  $N$  и/или  $\chi$  :
  - ✓ увеличивается значение критической силы  $f_{tr}$  (положение точки перехода)
  - ✓ размер скачка в расстоянии между концами в точке перехода увеличивается
- С увеличением  $\chi$  и / или  $N$  различия между результатами **ССП**, **ТСП** и **ФТ** уменьшаются