



Механическое разворачивание гомополимерной глобулы: теория и моделирование

Смолякова Е. Е.

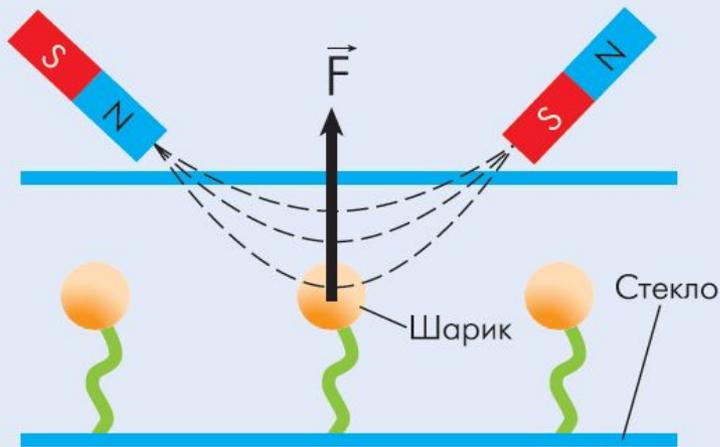
Полоцкий А.А.

Бирштейн Т.М.

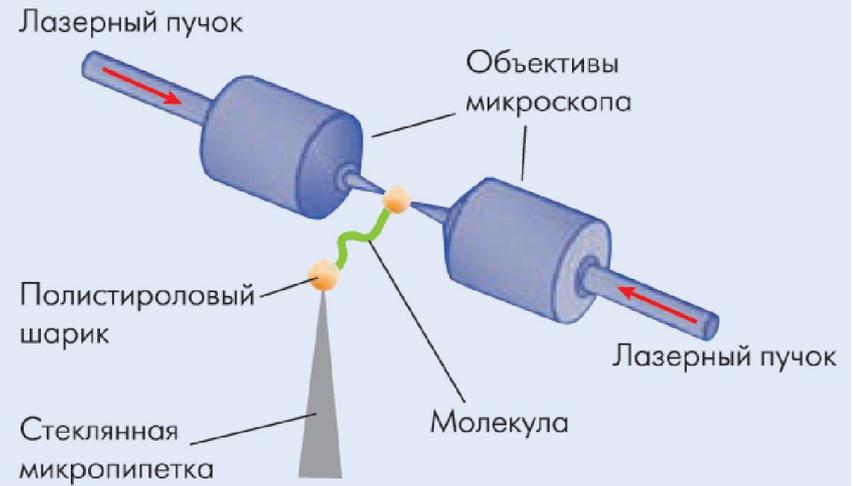
СПбГУ , 2012.

Растягивание макромолекул:

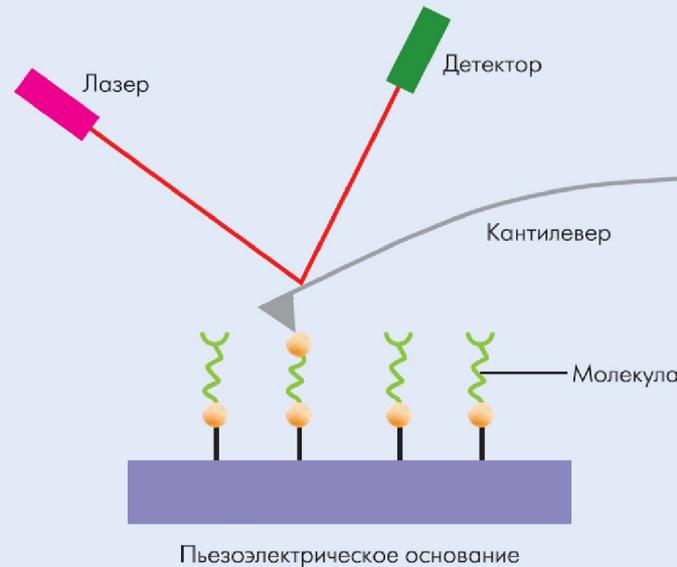
Магнитный пинцет



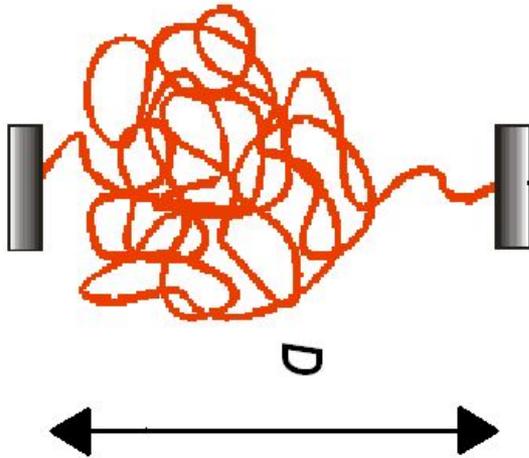
Оптический пинцет



Атомно-силовой микроскоп

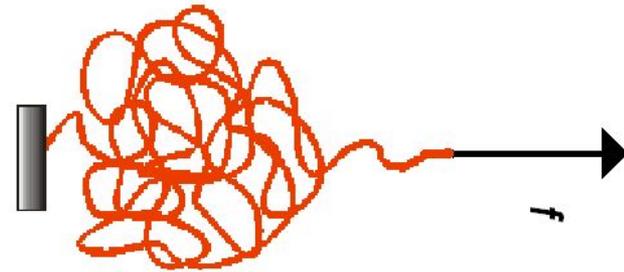


Два метода манипулирования:



D задано, измеряется f

Свободная энергией
Гельмгольца F

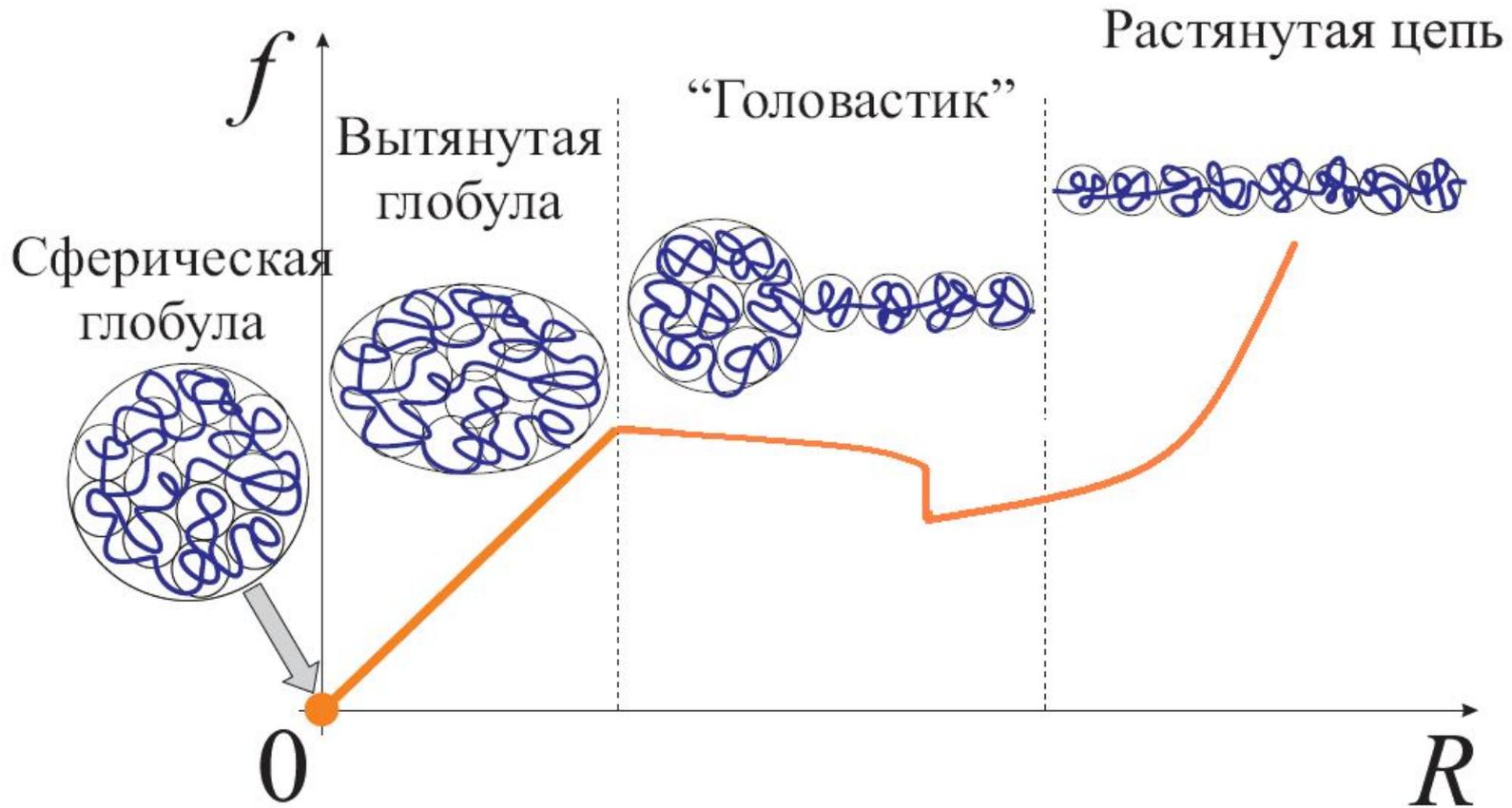


f задано, измеряется D

Свободная энергия
Гиббса G

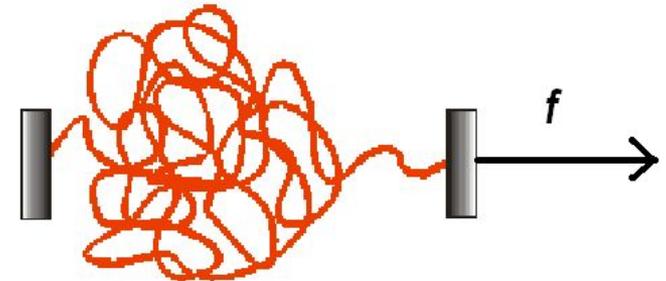
Глобула - состояние полимерной цепи, в котором флуктуации концентрации звеньев малы: их радиус корреляции значительно меньше размера макромолекулы

Растягивание макромолекулы в D - ансамбле



Постановка задачи

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

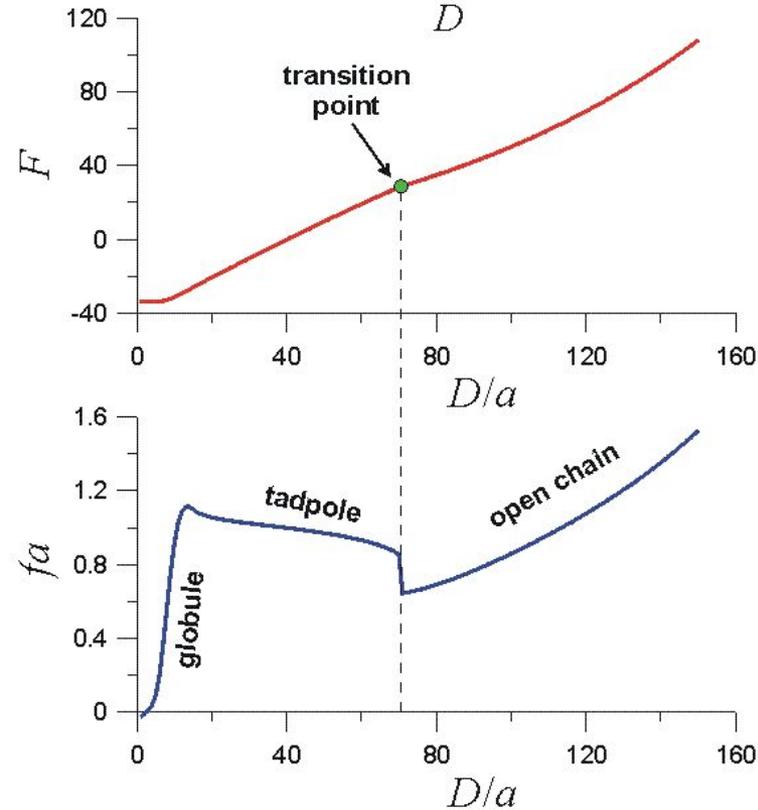
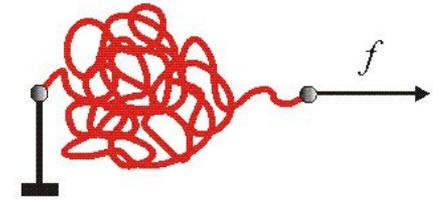
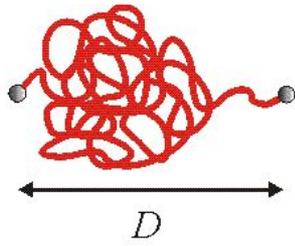


$$\chi = \frac{1}{k_B T} \left[\varepsilon_{ps} - \frac{1}{2} (\varepsilon_{pp} + \varepsilon_{ss}) \right]$$

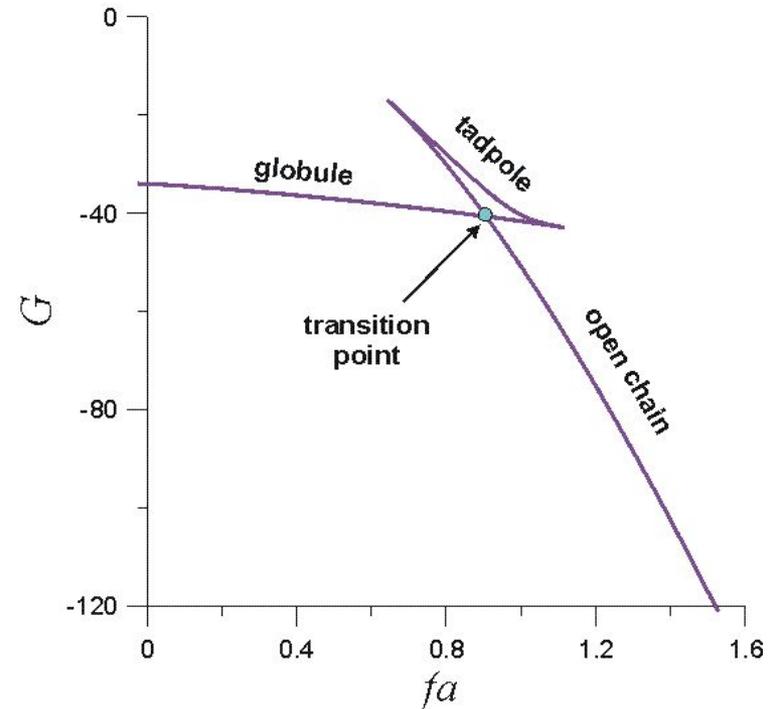
ТРИ ЭТАПА РЕШЕНИЯ:

- Моделирование
- Аналитическая теория среднего поля
 - Флуктуационный подход

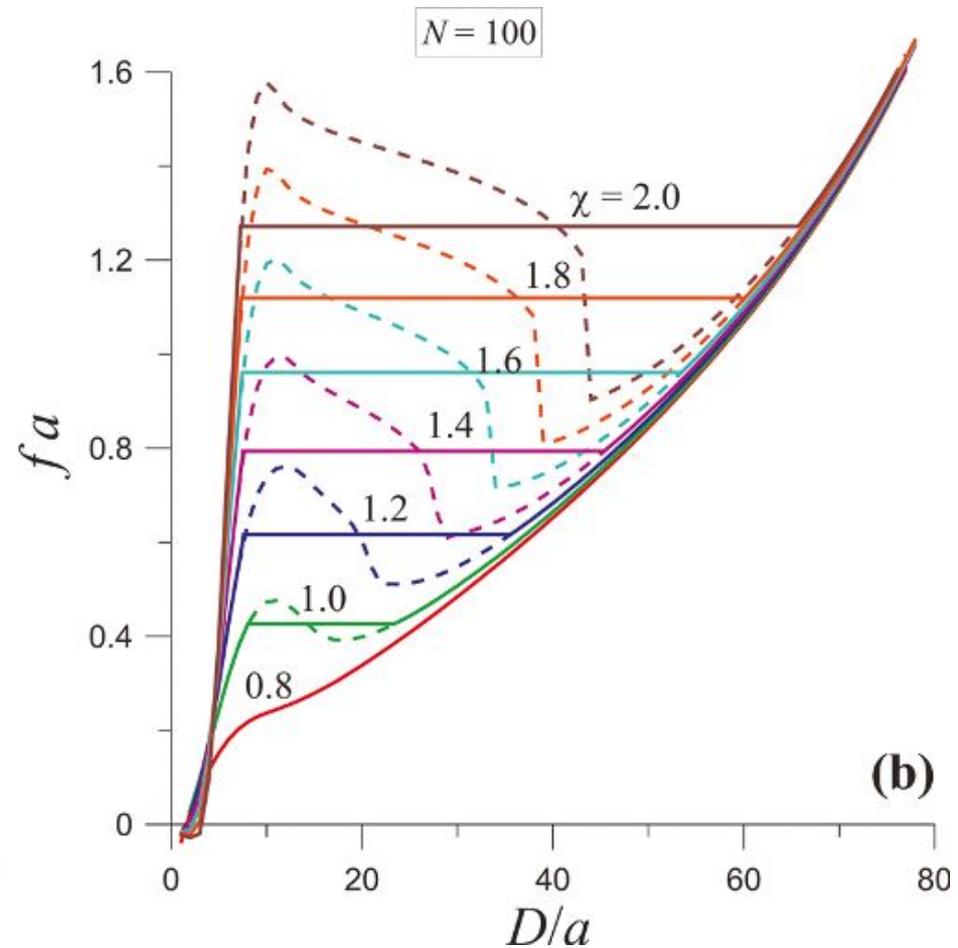
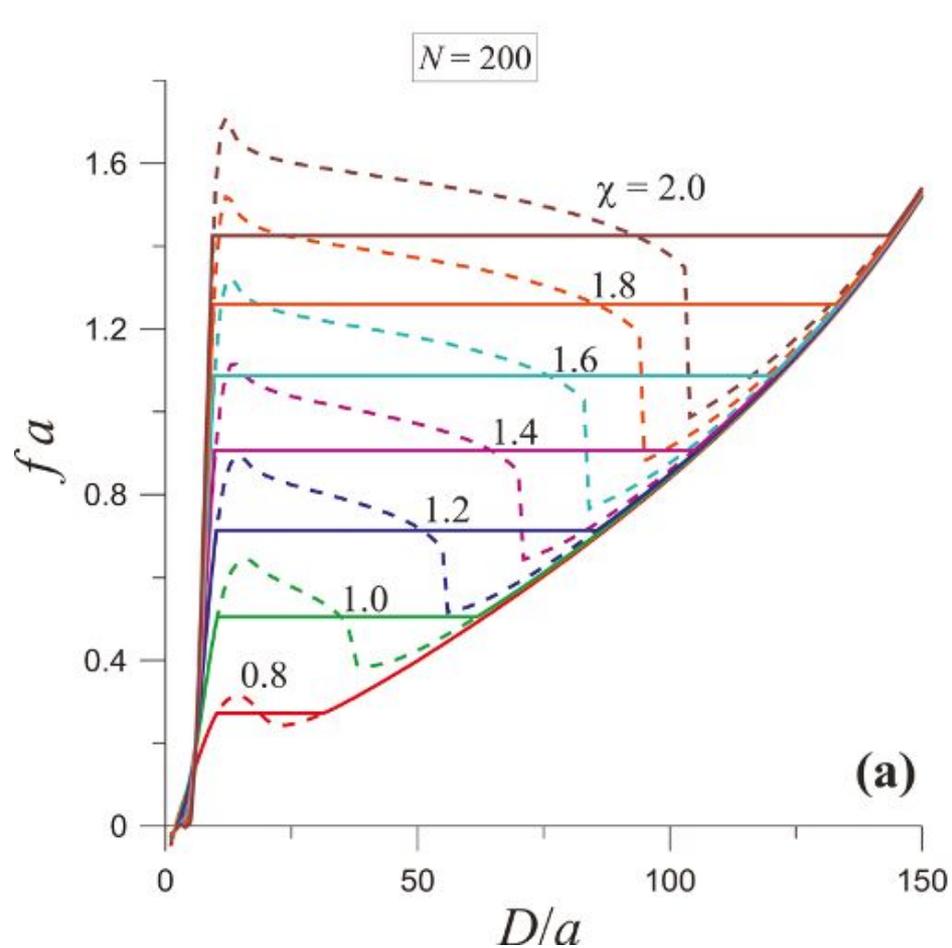
Пересчет полученных ранее результатов



$$G = F - fD$$

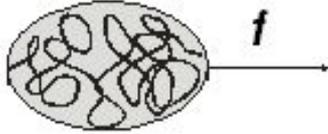


Кривые деформации: f - и D - ансамбли



Модель

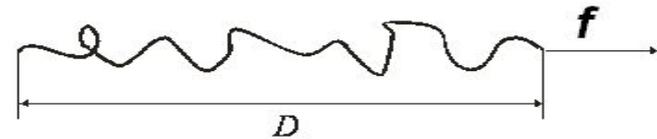
1. Слабо деформированная глобула



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

Аппроксимируем глобулу вытянутым эллипсоидом с постоянной плотностью

2. Растянутая цепь



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

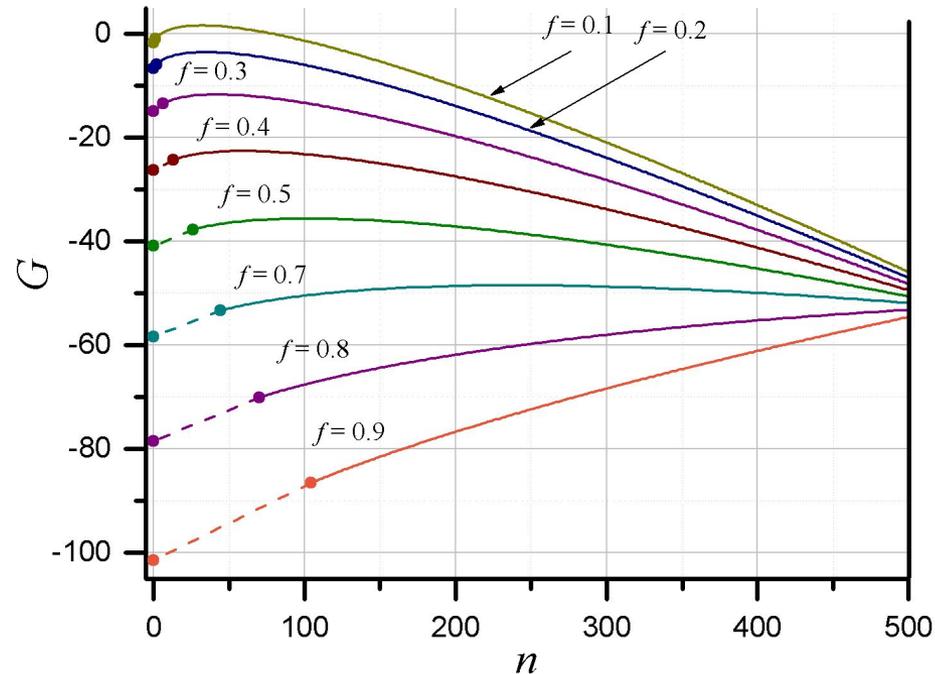
k – константа упругости (у нас $k = 3/4$)

3. «Головастик»

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

Свободная энергия как функция состава

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

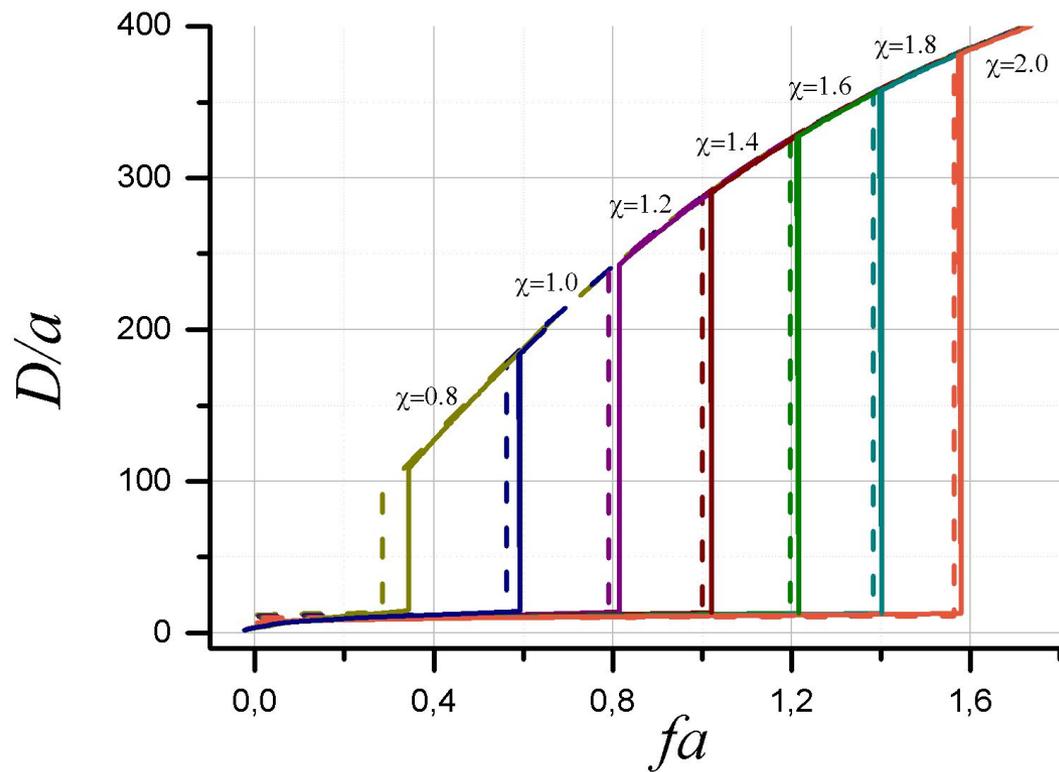
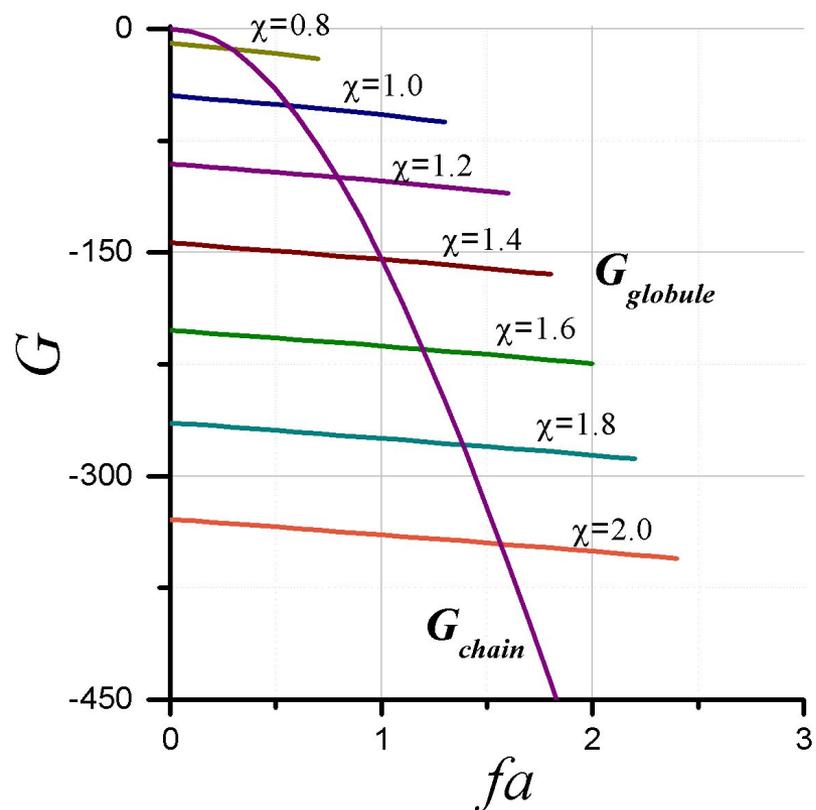


Два подхода:

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

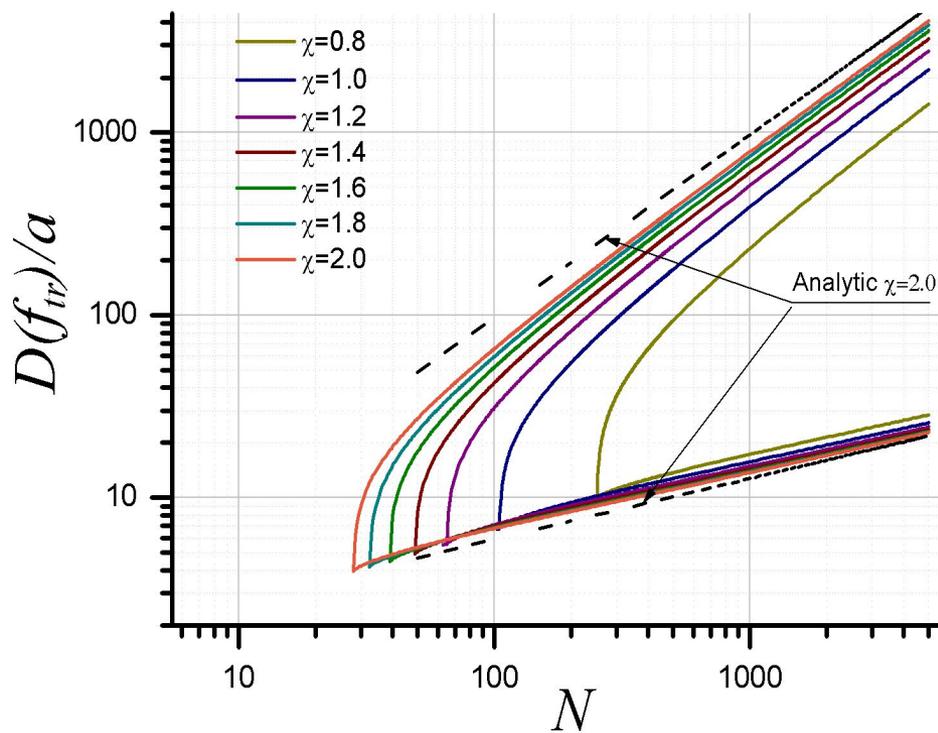
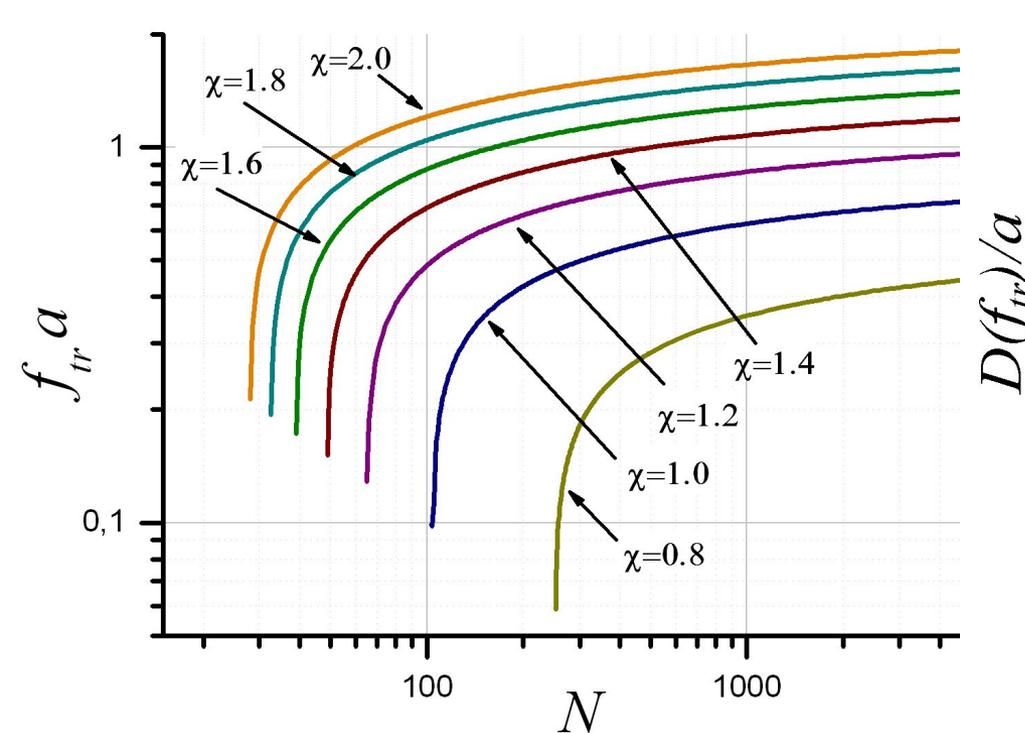
$$G = -\log Z$$

Свободная энергия & Кривые деформации



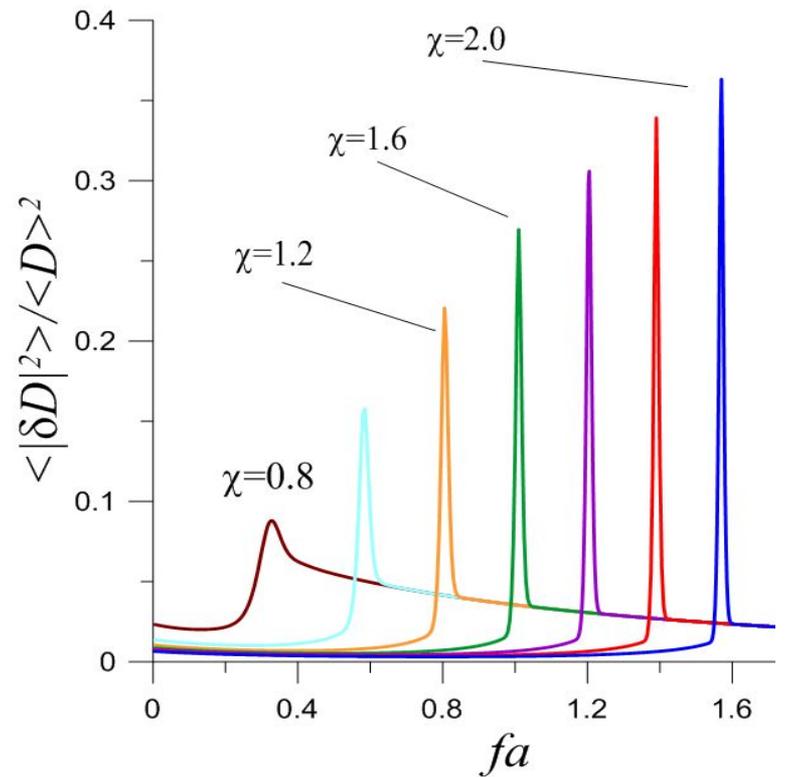
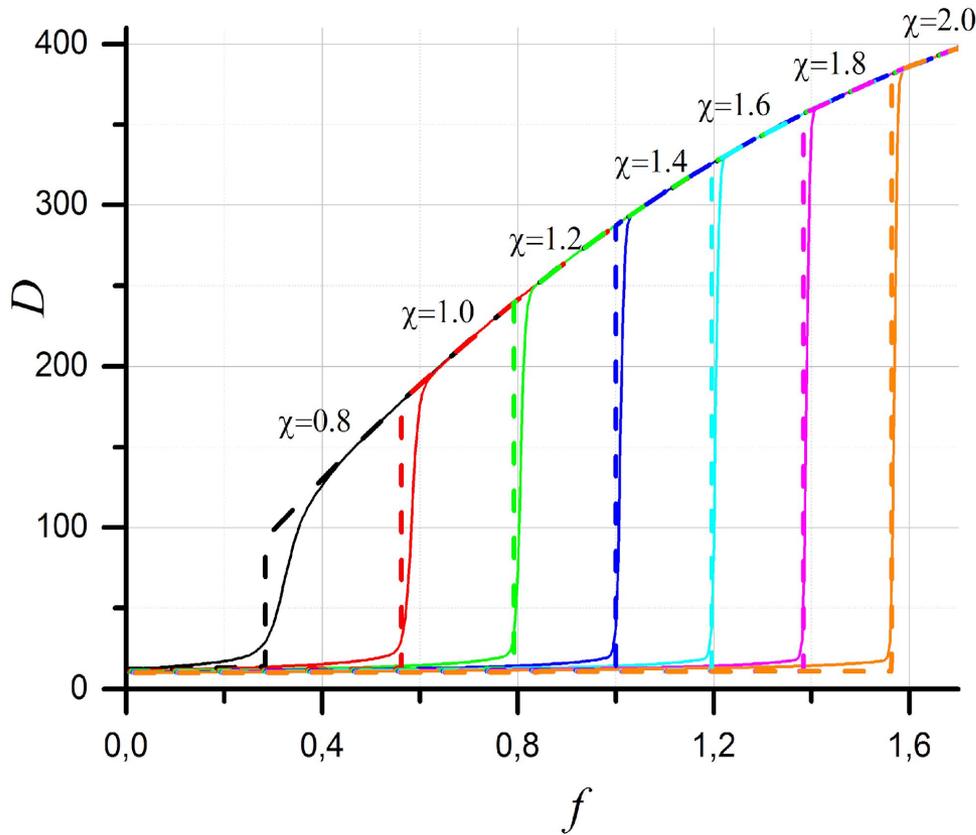
Чем больше параметр Флори, тем больше критическая сила раскрытия и тем больше скачок расстояния между концами глобулы в точке перехода.

Точка перехода глобула – «открытая» цепь

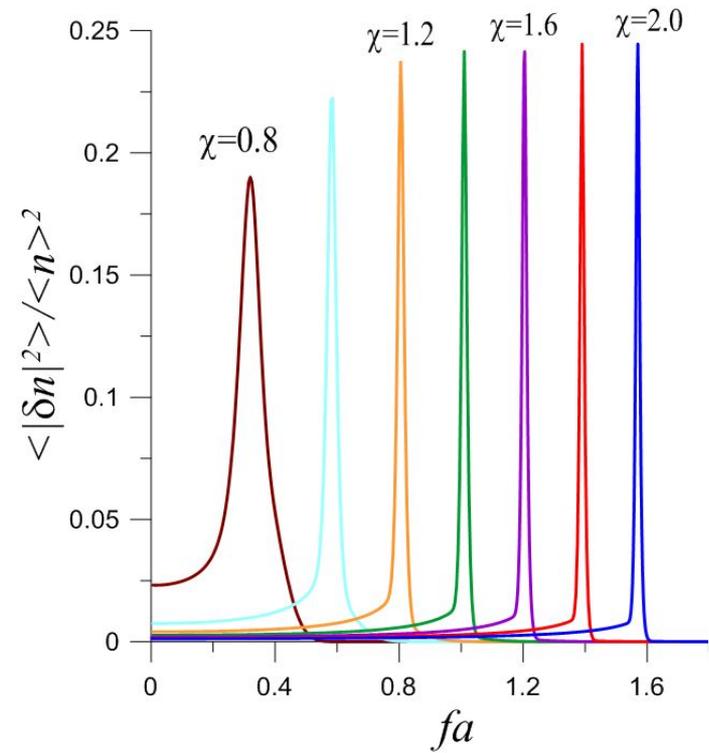
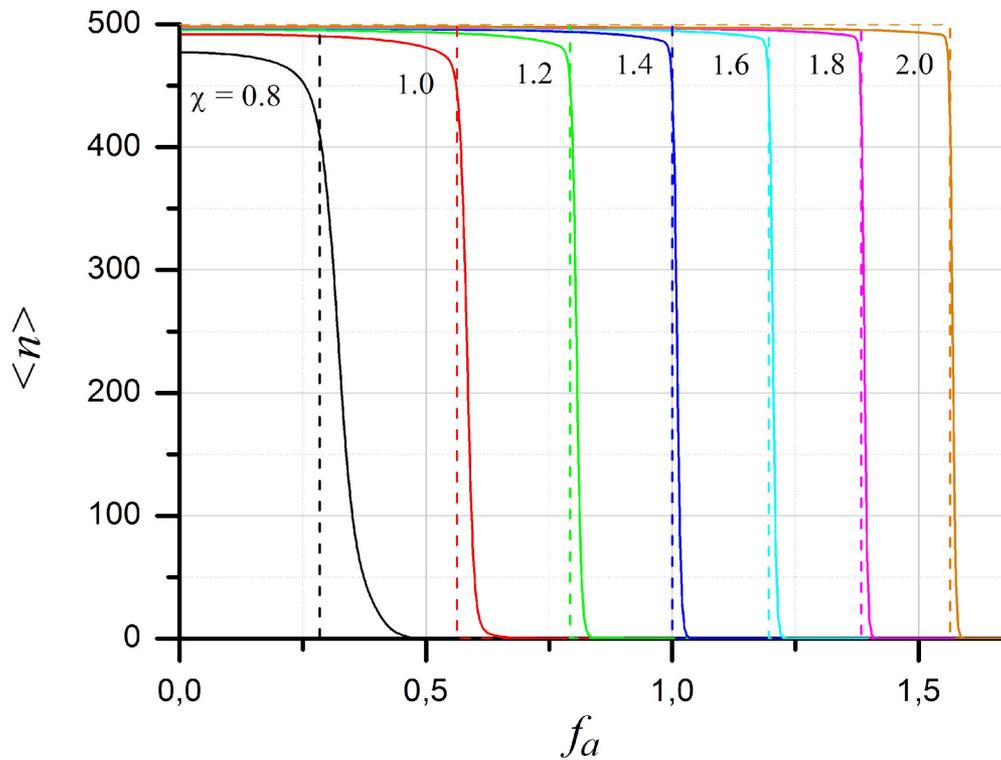


С ростом N увеличивается и критическая сила перехода, и расстояние между концами макромолекулы в точке перехода.

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 χ :
 - ✓ увеличивается значение критической силы f_{tr} (положение точки перехода)
 - ✓ размер скачка в расстоянии между концами в точке перехода увеличивается
- С увеличением χ и / или N различия между результатами **ССП**, **ТСП** и **ФТ** уменьшаются