分子马达单向梯跳运动的偏压涨落模型

包景东 卓益忠^④

(北京气象学院基础科学系, 北京 100081; ④中国原子能科学研究院, 北京 102413)

摘要 提出了一个研究分子马达单向梯跳运动的含色噪声的偏压涨落模型. 在绝热近似下给出了几率速流的表达式. 用 Monte Carlo 方法模拟了马达分子的力与速度关系和梯跳运动.

关键词 分子马达 梯跳运动 偏压 色噪声 Langevin 方程

近来的实验已经能够去研究单个蛋白分子的运动情况. 结果表明, 蛋白分子就像一个小马达, 可将三磷酸腺苷(ATP)水解释放出的化学能转化为机械能, 使之产生定向协调运动^[1]. 进一步对动蛋白分子的实验研究显示^[2, 3]: 它是沿着微管运动且呈单向梯跳式, 每一跳跃的距离是 8 nm, 恰好与微管的每一单元长度相等. 目前, 人们提出了一些工作模型^[4]用以解释 Brown 粒子在周期势场中如何产生净扩散. 但这些理论所预期的粒子的几率速流过小, 且也不能给出分子马达梯跳运动的图象.

在本文中, 我们将 ATP 的水解反应看作是一个可以诱发蛋白分子定向运动的色噪声源, 同时考虑到动蛋白分子跳跃每相邻单元节所需时间远大于其他微观特征时间, 因此又有一个不对称周期偏压力 $F(t)$ 加在系统上. 因为依靠 ATP 的水解去推动分子马达移动, 是局部的而不会产生净宏观力, 则 $F(t)$ 在一个时间周期内的平均值为零. 故我们提出了一个非平衡偏压涨落模型, 并用合理的参数来研究上述重要现象以及分子速度与负载力的关系.

建立如下的过阻尼 Langevin 方程来描述分子马达的运动过程:

$$\beta \dot{x}(t) = - \frac{\partial}{\partial x} [V(x) + xF(t)] - \lambda + \sqrt{D} \eta(t) + \sqrt{Q} \varepsilon(t), \quad (1)$$

这里 β , λ 分别是系统阻尼系数和外加负载力, $V(x)$ 为由于蛋白分子与微管之间的库仑电相互作用所给出的一个不对称周期锯齿势^[5], $\eta(t)$ 是强度为 $D = k_B T$ (T 为温度) 的白噪声, 它来自环境对粒子的无规碰撞, 而 $\varepsilon(t)$ 是一个指数关联型色噪声, 满足

$$\langle \varepsilon(t) \rangle = 0, \quad \langle \varepsilon(t) \varepsilon(t') \rangle = \frac{1}{\tau} \exp \left| - \frac{|t - t'|}{\tau} \right|,$$

其中 Q 和 τ 为色噪声强度和关联时间.

为了能对几率速流进行解析计算, 需要写出近似的 Fokker-Planck 方程. 本文结合跨越理论^[6]和内插处理^[7]的方法, 将(1)式转化为含乘性白噪声的随机微分方程, 即

$$\dot{x}(t) = - \beta^{-1} [V'(x) + F(t) + \lambda] + \sqrt{D(x, \tau)} \eta(t), \quad (2)$$

式中 $\eta(t)$ 及下面的 η_1 和 η_2 皆为均值为零, 方差是 2 的白噪声, 而有效扩散系数 D 写作

$$D(x, \tau) = \frac{k_B T}{\beta} + \frac{Q}{\beta^2} \frac{1 + c \tau \beta^{-1} V''(x)}{1 + c(\tau \beta^{-1} V''(x))^2}, \quad (3)$$

这里 c 是一个在 0.1 与 0.9 之间变化的无量纲可调参数. 通过这一参数的引入, 既可以提高结果的精确性, 又能使理论所预期的速流公式适用于较宽范围内的色噪声参数 Q 和 τ .

现在方程(2)两端同除以 $\sqrt{D}$ ^[8], 可进一步将乘性 Langevin 方程变换成加性 Langevin 方

程,从而在绝热近似下引入一个时间有关的有效势:

$$\Phi(x, t, \tau) = \int^x \frac{[V'(x') + F(t) + \lambda]}{\beta D(x', \tau)} dx'. \quad \text{利用 Fokker-Planck 方程的分布函数的周期和归一性, 经过求解, 本文给出如下的近似流公式:}$$

期和归一性, 经过求解, 本文给出如下的近似流公式:

$$S(t) = \frac{1 - \exp\left[-\int_0^L \Phi(x, t, \tau) dx\right]}{\int_0^L \exp(-\Phi(x, t, \tau)) dx \int_x^{x+L} D^{-1}(x', \tau) \exp(\Phi(x', t, \tau)) dx'}, \quad (4)$$

这里 L 是势场 $V(x)$ 的周期长度.

我们考虑下面的光滑锯齿型势场和不对称矩形波的偏压力:

$V(x) = -V_0[\sin(2\pi x/L) + 0.25\sin(4\pi x/L)]$ 和 $F(t) = F_1$, 当 $0 < t \leq t_1$; $F(t) = F_2$, 当 $t_1 < t \leq t_1 + t_2$, 以及 $F_1 t_1 + F_2 t_2 = 0$, $F_1 > 0$ 和 $F_2 < 0$.

由于本问题存在小 τ 和 Stiff 困难, 所以我们发展了一个求解含色与白两噪声的随机微分方程的闭合积分算法, 去数值模拟扩散流的暂态过程, 其无量纲化后的迭代式简写为

$$\begin{aligned} x(t + \Delta t) = & x(t) - \frac{f(x(t)) - F(t) - \lambda}{f'(x(t))} \{1 - \exp[f'(x(t)) \Delta t]\} \\ & + \frac{\tau \exp[f'(x(t)) \Delta t]}{1 + \tau f'(x(t))} \{1 - \exp[-(f'(x(t)) + \tau^{-1}) \Delta t]\} \varepsilon(t) + \sqrt{D} \omega_0 \\ & + \frac{\sqrt{Q}}{\tau} \omega_1, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\varepsilon(t + \Delta t) = \exp(-\Delta t / \tau) \varepsilon(t) + \sqrt{Q} / \tau \int_t^{t+\Delta t} \exp[(s - t - \Delta t) / \tau] \eta_2(s) ds, \quad (6)$$

式中

$$\omega_0 = \int_t^{t+\Delta t} \exp[f'(x(t))(t + \Delta t - s)] \eta_1(s) ds, \quad (7a)$$

$$\omega_1 = \int_t^{t+\Delta t} \exp[f'(x(t))(t + \Delta t - s)] ds \int_t^s \exp\left[\frac{s' - s}{\tau}\right] \eta_2(s') ds', \quad (7b)$$

这里 $f = -V'$. ω_0 , ω_1 及 (6) 式右边第二项, 可求出它们的二次和关联矩, 然后用几个独立的 Gauss 随机数来模拟它们^[9, 10].

计算中采用了由实验抽取的合理参数^[2, 5]: $L = 8$ nm, 势垒高度 $V_b = 10 k_B T$, 环境温度为室温 $T = 300$ K, $\beta = 10^{-5}$ Ns/m, $\tau = 0.02$ s, $t_1 = 2.0$ s, $t_2 = 0.2$ s, $F_1 = 1.2$ pN, $F_2 = -12$ pN 和 $Q = 0.5 D$. 图 1 为分子马达的平均速度 $v = \frac{L}{t_1 + t_2} \int_{t_1}^{t_1+t_2} S(t') dt'$ 随负载力 λ 的变化关系, 其中虚线带方点是数值结果, 实线是解析值($c = 0.45$). 由此可见, 分子的速度依负载力的增加而线性地降低, 当外加负载力 λ 达到 5.2 pN 时, 速度为零即分子宏观上停止运动. 这与 Svoboda 等人的实验结果^[11]较好地符合.

研究表明: 当力 F 和 λ 不存在时, 色噪声 ε 所激励的势场 V 中的 Brown 粒子的平均速度为正, 即系统向右作净扩散, 这是由于非平衡涨落源破坏了细致平衡条件. 若加入正 F 力, 则会使总的势场向上倾斜, 促使粒子向左运动, 与色噪声效应相反. 如果参数选择得合适, 便会使系统的扩散流 $S(t) = 0$, 也就是粒子的平均速度为零, 宏观上表现为粒子在势能的某一局域

极小处做振荡. 若加入负 F 力, 那么总势场向下倾斜, 促使粒子向右运动, 与色噪声效应相同, 从而系统存在一个正的平均几率速流. 粒子便可能从一个势阱翻越位垒而运动到下一个势阱, 完成一次梯跳. 选择合适的 F_1 和 F_2 , 可使得粒子在 $0.2 \text{ s}^{[2]}$ 间隔内的跳跃距离恰好是势场的一个 8 nm 的周期长度. 图 2 是用 Monte_Carlo 方法所模拟的一个 Brown 粒子在高负载力 $\lambda = 4.4 \text{ pN}$ 和其他参数与图 1 相同的情况下的运动轨道.

总之, 本文根据最近的对单个动蛋白分子运动的实验研究结果, 建立了一个 Brown 粒子扩散的非平衡偏压涨落模型. 基于跨越理论和内插处理相结合的方法, 给出了不对称周期势中的粒子的几率速流

图 1 分子的平均速度随负载力的变化

图 2 一个粒子的运动轨道

的解析表达式. 研究了速度与负载力的关系曲线, 同时还用 Monte_Carlo 方法模拟了马达分子的单向梯跳运动过程.

致谢 本工作为国家自然科学基金(批准号: 19605002)资助项目.

<https://engine.scichina.com/doi/10.1360/csb1998-43-14-1493>

参 考 文 献

- 1 Astumian R D. Thermodynamics and kinetics of a Brownian motor. *Science*, 1997, 276: 917~ 922
- 2 Svoboda K, Schmidt C F, Schnapp B J, et al. Direct observation of kinesin stepping by optical trapping interferometry. *Nature*, 1993, 365: 721~ 727
- 3 Levi B G. Measured steps advance the understanding of molecular motors. *Physics Today*, April, 1995, 17
- 4 Hanggi P, Bartussek R. Nonlinear Physics of Complex Systems. In: Parisi J, ed. *Lecture Notes in Physics*, Vol 476. Berlin: Springer, 1996. 294~ 308
- 5 Astumian R D, Bier M. Mechanochemical coupling of the motion of molecular motors to ATP hydrolysis. *Biophys J*, 1996, 70: 637~ 653
- 6 Madureira A J R, Hanggi P. Escape from a fluctuating double well. *Phys Rev*, 1995, E 52: 3 849~ 3 861
- 7 Castro F, Wio H S, Sanchez. Colored_noise problem: a Markovian interpolation procedure. *Phys Rev*, 1995, E75: 1 691
- 8 Bao J D, Zhuo Y Z, Wu X Z. Effects of multiplicative noise on fluctuation_induced transport. *Phys Lett*, 1996, A217: 241
- 9 Mannella R, Palleschi V. Fast and precise algorithm for computer simulation of stochastic differential equations. *Phys Rev*, 1989, A40: 3 381
- 10 包景东. 周期势场中定向扩散流的 Monte_Carlo 计算. *计算物理*, 1997, 14: 463~ 464
- 11 Svoboda K, Block S M. Force and velocity measured for single kinesin molecules. *Cell*, 1994, 77: 773~ 784

(1997_08_07 收稿)

锌盐与 L-蛋氨酸配合行为的研究

高胜利 刘建睿 冀 棉 杨旭武 张逢星 李仲谨^④

(西北大学化学系, 西安 710069; ④西北轻工业学院化工系, 咸阳 712000)

摘要 用相平衡法研究了 $\text{ZnCl}_2/\text{ZnAc}_2/\text{ZnSO}_4\text{-Met-H}_2\text{O}$ 在 25℃及全浓度范围内的溶度性质. 结果表明, ZnAc_2 和 ZnSO_4 2 个体系为简单体系, 没有新的化合物生成: 在 ZnCl_2 体系中形成 2 种配合物: Zn(Met)Cl_2 和 $\text{Zn(Met)}_2\text{Cl}_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$. 在相平衡结果指导下, 在水中制备了这 2 种化合物, 并用化学分析、红外光谱、X_粉末衍射对它们进行了表征. 用 RBC_1 型转动弹热量计测定了 2 种配合物的燃烧能, 计算了它们的标准生成焓分别为 (-828.32 ± 3.00) 和 $(-1117.08 \pm 6.15) \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

关键词 锌盐 L-蛋氨酸 相平衡 配合物 生成焓

α -氨基酸锌作为添加剂在药物、食品和化妆品中有广阔的应用前景^[1,2]. 文献中报道蛋氨酸锌的制备方法有: () ZnO , Zn(OH)_2 或 ZnCO_3 与 Met 以 1:2 摩尔比水溶液 40~50℃反应 2h, 以乙醇处理, 静置到产生沉淀^[1,3,4]; () 乙醇钠存在下, 锌盐与 Met 以 1:2 摩尔比的乙醇溶液反应, 产生沉淀^[5,6]; () $\text{ZnSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 与 Met 以 1:1 摩尔比混合, 水浴上加热成糊状, 90℃干燥 20h^[1]; () $\text{ZnSO}_4\cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 和 Met 以 1:1 摩尔比水中反应后用定量丙酮处理, 搅拌得沉淀^[1]; () 0℃下, Met 与 ZnAc_2 的甲醇溶液反应 3h, 分离沉淀, 干燥^[2]; () 锌盐与 Met 的水溶液分放两极室, 特种半透膜相隔, 在一定电压和电流下电解得产物, 并放出 H_2 ^[7]. 但这