

## پتانسیل الکتروستاتیک یک مولکول زیستی مارپیچی در رژیم دیبای- هوکل با در نظر گرفتن ناهمگنی دی الکتریک

امیر رضائی درشگی و فرشید محمدرضایی

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان

پست الکترونیکی: farshid@iasbs.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۱۱/۰۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۶/۱۲/۲۳)

### چکیده

درون سلول زنده، بسیاری از فرایندهای بنیادی، شامل تغییراتی در مولکولهای باردار مارپیچی و برهم کنشهای بین آنها است. رشتههای اکتین و DNA مهم ترین نمونهها از مولکولهای باردار مارپیچی هستند. در این مقاله یک مولکول باردار دو رشتهای واقع در محلول در نظر گرفته می شود. مطابق موارد موجود در طبیعت، ثابت دی الکتریک چنین مولکولهایی تفاوت قابل توجهی با ثابت دی الکتریک محیط پیرامون این مولکولها دارد. به منظور محاسبه پتانسیل الکتروستاتیک مسأله در رژیم دیبای- هوکل، تابع گرین دیبای- هوکل را به دست می آوریم و با استفاده از این تابع گرین، پتانسیل الکتروستاتیک دستگاه را محاسبه می کنیم. علاوه بر این، وابستگی پتانسیل الکتروستاتیک به ناهمگنی دی الکتریک، پارامترهای ساختاری و غلظت نمک را بررسی می کنیم. این مطالعه می تواند بیش از پیش نقش برهم کنشهای الکتروستاتیک را در بسیاری از فرایندهای بنیادی شامل مولکولهای باردار مارپیچی مانند DNA و رشتههای اکتین، روشن سازد.

**واژه های کلیدی:** مولکول زیستی، دی ان ای، تابع گرین، تقریب دیبای- هوکل، برهم کنش الکتروستاتیک، ناهمگنی ضریب دی الکتریک

### ۱. مقدمه

خلاء متفاوت است. نقطه شروع مطالعه این برهم کنشها معمولاً مدل های میدان متوسط پواسون- بولتزمن و شکل خطی شده آن، مدل دیبای- هوکل است [۲]. در سلول های زنده، بسیاری از فرایندهای حیاتی سلول شامل ماکرومولکول های مارپیچی باردار و برهم کنش بین آنها است. رشته های اکتین و مولکول های DNA دو مثال بسیار مهم از این مولکول های باردار مارپیچی هستند. مولکول DNA به عنوان یک پلیمر زیستی که حاوی اطلاعات ژنتیکی موجود زنده است، به صورت پکیده در سلول قرار دارد. این

برهم کنش های الکتروستاتیک در زیست شناسی بسیار مهم است، چرا که تمامی اسیدهای نوکلئیک که واحد سازنده رشته های DNA و RNA هستند، و اکثر پروتئین ها و گروه های موجود در غشاء در شرایط فیزیولوژیکی باردار هستند [۱]. در شرایط سلولی، ماکرومولکول ها در محلول آب و نمک و مولکول های کوچک زیستی قرار دارند. برهم کنش های الکتروستاتیک بین ماکرومولکول های باردار در محلول آب و نمک با برهم کنش های الکتروستاتیک در

که در مطالعات مربوط به سطوح و پلیمرهای باردار واقع در محلول یونی مورد توجه است. در این مورد هم به دلیل اثر پوششی و چگالش یون‌های با بار مخالف در دو رژیم جفت شدگی ضعیف و قوی به صورت توده‌ای از ابر یونی در مجاورت پلیمرهای باردار، پتانسیل الکتروستاتیکی محیط تعدیل می‌یابد [۱۶ و ۱۷].

مورد جالب توجه و تأثیر گذار دیگر مربوط به اثر ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک دستگاه مورد مطالعه است. در نظر گرفتن ماکرومولکول‌های باردار به عنوان یک عنصر دی‌الکتریک مجزا که دارای ضریب دی‌الکتریک متفاوت با محیط اطراف آن است، موضوعی است که در مطالعه برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک مورد توجه قرار می‌گیرد. اهمیت این موضوع از آن جهت است که به واسطه ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک محیط، تغییری در خطوط میدان حاکم در فضا ایجاد می‌شود که آن هم به نوبه خود برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک دستگاه را تحت تأثیر قرار می‌دهد [۱۸].

همان‌طور که در بالا نیز ذکر شد مولکول DNA و رشته اکتین به عنوان یک پلیمر زیستی از دو رشته باردار مارپیچی ساخته شده‌اند. باردار بودن و احاطه آنها توسط محلول یونی مؤید اهمیت برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک در ساختار نهایی و کارکردشان است. علاوه بر آن، به دلیل وجود گروه‌های آب‌گریز در ساختار شیمیایی آنها، ثابت دی‌الکتریک مؤثر آنها تفاوت چشمگیری با ثابت دی‌الکتریک محلول اطراف دارد. از این رو محاسبه پتانسیل الکتروستاتیک در اطراف پلیمرهای زیستی یاد شده با در نظر گرفتن اثرات یون‌های نمک در محلول و ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک بسیار مهم خواهد بود. در این مقاله، مولکول DNA یا رشته اکتین به صورت یک استوانه غیر قابل نفوذ در یک محلول نمک در نظر گرفته می‌شود. بارهای مولکول به صورت مارپیچی بر روی سطح خارجی استوانه قرار دارند. در ادامه مقاله با روند زیر ادامه خواهد یافت. در بخش ۲، مدل استفاده شده برای نمایش پلیمر باردار دو رشته‌ای با ساختار مارپیچی معرفی شده و تابع گرین و سپس پتانسیل الکتروستاتیک فضای

مولکول نقش مهمی در حیات سلول داشته و در فرایندهای سلولی مهمی مانند رونویسی، ترجمه و تکثیر دخیل است. در شرایط فیزیولوژیکی سلول زنده، DNA عموماً ساختار B-DNA را به خود می‌گیرد که می‌توان آن را به صورت یک مارپیچ دورشته‌ای با شعاع ۲ نانومتر و پای پیچ ۳/۴ نانومتر در نظر گرفت. در شرایط زیستی، مولکول DNA دارای

چگالی بار خطی  $\frac{-2e}{3.4 \text{ \AA}}$  است [۳]. رشته اکتین به عنوان

یکی دیگر از پلیمرهای زیستی تأثیرگذار در حیات سلولی است که در استحکام و حرکت سلول نقش مهمی دارد. می‌توان رشته اکتین را به صورت یک مارپیچ دو رشته‌ای با شعاع ۳/۸ نانومتر و پای پیچ ۷۲ نانومتر در نظر گرفت که

دارای چگالی بار خطی  $\frac{-1e}{2.7 \text{ \AA}}$  است [۴].

باردار بودن این مولکول‌ها از یک طرف و قرار گرفتن آنها در محیط سلولی که به صورت یک محلول نمکی و شامل یون‌های نمک تجزیه شده است از طرف دیگر، باعث می‌شود که برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک در تشکیل ساختار نهایی این ماکرومولکول‌های باردار و همچنین در برهم‌کنش آنها با ماکرومولکول‌ها و موتور پروتئین‌های دیگر در محیط سلولی مهم باشد. اثر پوششی ایجاد شده توسط یون‌های موجود در محلول در اطراف DNA و رشته‌های اکتین، تأثیر بسزایی در پتانسیل الکتریکی و در نتیجه در برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک در دستگاه دارد. به عنوان مثال، تأثیر غلظت یون‌های محیط در سختی خمشی پلی‌الکترولیت‌های مختلف، از لحاظ نظری [۵-۷]، تجربی [۸-۱۰] و شبیه‌سازی [۱۱] و [۱۲] به تناوب بررسی شده است. چنین مطالعاتی در زمینه سختی پیچشی پلیمرهای زیستی نیز مورد توجه بوده است [۱۳-۱۵]. شایان ذکر است که تغییر غلظت یون‌های محیط و تغییر پتانسیل و برهم‌کنش‌های الکتروستاتیکی ناشی از آن، منجر به تغییر سختی خمشی و پیچشی پلیمرهای باردار شده که در نهایت آن هم باعث تغییر ساختار نهایی پلیمرها می‌گردد. پدیده جذب بارهای هم‌نام موضوع دیگری است

مشاهده کرد. فرض بر این است که استوانه‌ی دی‌الکتریک با شعاع  $a$  نسبت به یون‌های محیط نفوذناپذیر است. همان طور که در این شکل نیز مشخص است ضریب دی‌الکتریک بیرون و درون استوانه به ترتیب برابر  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  است. با توجه به اینکه مسئله دارای تقارن استوانه‌ای است، چگالی حجمی بار مارپیچی در مختصات استوانه‌ای  $(\rho, \varphi, Z)$  به صورت زیر نوشته می‌شود،

$$\sigma_f(\vec{r}) = \left( \frac{-Pe}{\sqrt{\pi}ab} \right) \delta(\rho-a) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[ \delta\left(z-nP-\frac{P\varphi}{2\pi}\right) + \delta\left(z-nP-\xi-\frac{P\varphi}{2\pi}\right) \right], \quad (1)$$

که در رابطه بالا،  $P$  نشانگر پای پیچ،  $-e$  بار یک الکترون،  $b$  فاصله عمودی دو بار مجاور هم بر روی یک رشته و  $n$  شمارنده پای پیچ‌ها است. زیرنویس  $f$  به ثابت بودن بارها بر روی مولکول تأکید دارد.

با توجه به این که ماکرومولکول مورد نظر در یک محیط حاوی محلول نمک قرار گرفته است، لذا برای محاسبه پتانسیل الکتروستاتیک معادله پواسون به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\epsilon_1 \epsilon_2 \nabla^2 \Phi(\vec{r}) = -(\sigma_f(\vec{r}) + \sigma_m(\vec{r})), \quad (2)$$

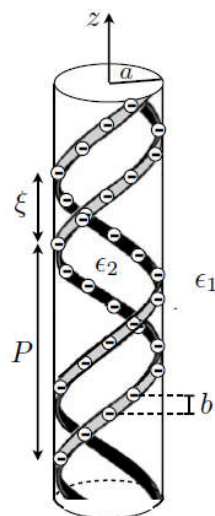
که در آن زیرنویس  $m$  بارهای موجود در محلول را نشان می‌دهد. توجه داریم که این بارها به دلیل حل شدن نمک در محلول به وجود می‌آیند و می‌توانند در محلول افت و خیز حرارتی انجام دهند و ذاتاً متحرک هستند.

اگر فرض کنیم که محلول نمک شامل  $N$  نوع بار الکتریکی با بار  $q_j$  باشد، در این صورت چگالی بارهای متحرک را می‌توان به صورت زیر نوشت،

$$\sigma_m(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N q_j C_j(\vec{r}), \quad (3)$$

در این رابطه  $j$  شمارنده انواع یون‌ها و  $C_j(\vec{r})$  غلظت یون  $j$ ام را نشان می‌دهد.

با فرض این که دستگاه در حالت تعادل گرمایی در دمای  $T$  است، می‌توان غلظت  $C_j(\vec{r})$  را به عنوان یک میانگین آنسامبلی و پتانسیل  $\Phi(\vec{r})$  را یک کمیت میدان متوسط آنسامبلی در نظر گرفت. بنابراین می‌توان غلظت  $C_j(\vec{r})$  را با



شکل ۱. طرح‌واره‌ای از یک مولکول دورشته‌ای مارپیچی باردار پارامترهای هندسی و فیزیکی مربوط به مولکول مشخص شده است. شعاع استوانه،  $P$  پای پیچ مارپیچ،  $b$  کوتاه‌ترین فاصله عمودی بین دو رشته و  $b$  فاصله عمودی دو بار الکتریکی مجاور هم بر روی یک رشته است. ضریب دی‌الکتریک بیرون و درون استوانه به ترتیب برابر  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  می‌باشد.

بیرونی استوانه در رژیم دیبای- هوکل به دست خواهد آمد. در بخش ۳، نتایج مربوط به پتانسیل الکتروستاتیک در شرایط مختلف فیزیکی و در در راستاها و زوایای مختلف اطراف استوانه‌ی باردار ارائه می‌شود. بخش ۴ نیز مربوط به بحث و نتیجه‌گیری کارهای انجام گرفته خواهد بود.

## ۲. مدل

همان طور که در بالا نیز بدان اشاره شد هدف این مقاله، نمایش پتانسیل حاصل از یک ماکرومولکول پلی‌الکترولیتی با توزیع بار مارپیچی دو رشته‌ای واقع در محلول نمک با در نظر گرفتن ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک است. در حالت کلی چنین مولکولی می‌تواند یک پلیمر زیستی مانند DNA و رشته اکتین و یا یک پلی‌الکترولیت مصنوعی باشد. برای مدل کردن چنین مولکولی می‌توان فرض کرد که دو رشته‌ی باردار موازی به دور یک استوانه‌ی دی‌الکتریک پیچیده شده‌اند. طرح‌واره‌ای از این توزیع بار الکتریکی را در شکل ۱ می‌توان

استفاده از تابع توزیع بولتزمن به صورت زیر نوشت،

$$C_j(\vec{r}) = C_j^{(0)} \exp\left(-\frac{q_j \Phi(\vec{r})}{k_B T}\right), \quad (4)$$

در رابطه بالا  $C_j^{(0)}$  غلظت متوسط بار نوع  $j$  ام است. با قرار دادن روابط (۳) و (۴) در معادله پواسون (۲) به نتیجه زیر که معادله پواسون-بولتزمن نامیده می شود، می رسیم [۲]

$$\varepsilon_r \varepsilon_0 \nabla^2 \Phi(\vec{r}) = -\sigma_f(\vec{r}) - \sum_{j=1}^N q_j C_j^{(0)} \exp\left(-\frac{q_j \Phi(\vec{r})}{k_B T}\right), \quad (5)$$

این یک معادله دیفرانسیل غیرخطی و غیرهمگن است. در شرایط خاص می توان این معادله دیفرانسیلی را ساده تر کرد. در صورتی که انرژی گرمایی دستگاه خیلی بزرگ تر از انرژی پتانسیل الکتروستاتیک باشد، در این صورت می توان با بسط دادن جمله نمایی در معادله پواسون-بولتزمن، رابطه (۵)، شکل خطی شده معادله پواسون-بولتزمن را که معادله دیبای-هوکل نامیده می شود، به دست آورد. از آنجا که بارهای متحرک در مسأله از حل شدن نمک در محیط به وجود می آیند، محلول از نظر الکتریکی خنثی است، یعنی  $\sum_{j=1}^N q_j C_j^{(0)} = 0$ . طول پوششی دیبای،  $\lambda_D$ ، به صورت زیر تعریف می شود [۱۹]

$$\lambda_D^{-2} \equiv \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0 k_B T}{\sum_{j=1}^N C_j^{(0)} q_j^2}. \quad (6)$$

با استفاده از این تعریف، معادله دیبای-هوکل که همان شکل خطی شده معادله پواسون-بولتزمن است به صورت زیر نوشته می شود،

$$(\nabla^2 - \kappa^2) \Phi(\vec{r}) = -\frac{\sigma_f(\vec{r})}{\varepsilon_r \varepsilon_0}, \quad (7)$$

که در آن، پارامتر  $\kappa \equiv \frac{1}{\lambda_D}$  برابر با عکس طول دیبای تعریف شده است.

تابع چگالی بار مربوط به مولکول ماریپیچی، رابطه (۱)، به صورت یک تابع تناوبی نسبت به دو متغیر  $z$  و  $\varphi$  است، به طوری که داریم،

چگالی بار را در فضای فوریه به صورت زیر نوشت،

$$\sigma_f(\vec{r}) = \sum_{u,v=-\infty}^{\infty} \delta(\rho-a) \sigma_{uv} e^{i\left(\frac{\gamma\pi}{P}uz + v\varphi\right)}, \quad (8)$$

که در آن عبارت  $\sigma_{uv}$ ، به صورت زیر به دست می آید،

$$\sigma_{uv} = -\frac{e}{\gamma\pi ab} \delta_{u,-v} \left(1 + e^{i v \omega_s \xi}\right). \quad (9)$$

در رابطه بالا،  $\omega_s$  پیچش ذاتی مولکول ماریپیچی را نشان می دهد که عبارت است از  $\omega_s \equiv \frac{\gamma\pi}{P}$ .

با قرار دادن عبارت مربوط به چگالی بار مولکول ماریپیچی در رابطه (۷) و حل معادله دیفرانسیل، می توان پتانسیل الکتریکی فضای اطراف ماکرومولکول استوانه ای با توزیع بار ماریپیچی دورشته ای را به دست آورد. برای حل معادله دیفرانسیل از روش تابع گرین استفاده می کنیم. تابع گرین بیرون و داخل استوانه به ترتیب با  $G_1$  و  $G_2$  نشان داده می شوند که در معادلات زیر صدق می کنند،

$$(\nabla^2 - \kappa^2) G_1(\vec{r}, \vec{r}') = -\gamma\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (10)$$

$$\nabla^2 G_2(\vec{r}, \vec{r}') = -\gamma\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

با توجه به هندسه مسأله که دارای تقارن محوری است، محاسبات مربوط به تابع گرین را در مختصات استوانه ای ادامه می دهیم. شرایط مرزی حاکم بر مسأله به قرار زیر است،

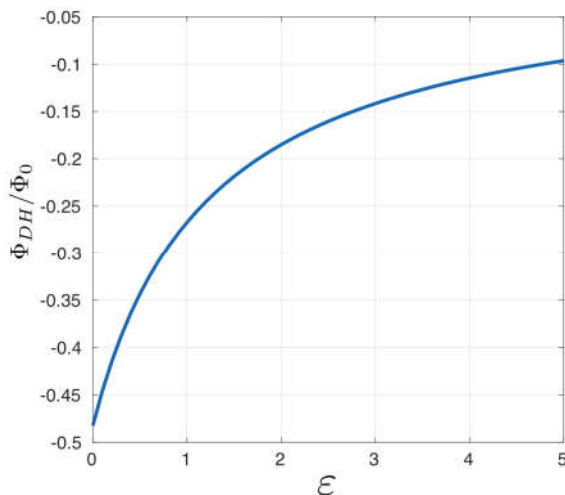
$$G_1(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\rho=a} = G_2(\vec{r}, \vec{r}') \Big|_{\rho=a}, \quad (11)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial G_1(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \rho} \Big|_{\rho=a} = \varepsilon_r \frac{\partial G_2(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial \rho} \Big|_{\rho=a}.$$

بعد از محاسبات لازم، تابع گرین بیرون استوانه به صورت زیر به دست می آید،

$$G_1(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{\gamma}{\pi} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int d\varphi e^{im(\varphi-\varphi')} \cos[k(z-z')] I_m(\gamma\rho_<) K_m(\gamma\rho_>) [1 + F_m], \quad (12)$$

که در آن،  $I_m$  و  $K_m$  توابع تعدیل یافته بسل را نشان می دهند و  $\gamma \equiv \sqrt{k^2 + \kappa^2}$  در رابطه فوق،  $\rho_<$  و  $\rho_>$  متناظر با مقادیر کوچک تر و بزرگ تر بین  $\rho$  و  $\rho'$  است. رابطه مربوط



شکل ۲. تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  برحسب پارامتر بدون بعد  $\epsilon \equiv \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}$ . این نمودار در مختصات  $\rho/a = 1$ ،  $\varphi = 0$  و  $z/a = 0$  رسم شده است. نمودار متناظر با پارامترهای  $a\omega_0 = 1.85$ ،  $a\kappa = 1$  و  $\xi\omega_0 = 2.1$  است.

است خواهیم پرداخت. با تعریف ثابت  $\Phi_0 = \frac{ze}{\pi\epsilon_0\epsilon_1 b}$ ، رفتار کمیت بدون بعد  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  را به ازای مقادیر مختلف پارامترهای فیزیکی مسأله و در مختصات استوانه‌ای مطالعه می‌کنیم.

در شکل ۲، رفتار پتانسیل نسبی  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  نسبت به تغییرات کمیت بدون بعد  $\epsilon \equiv \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}$  که بیانگر نسبت ضریب دی‌الکتریک درون به بیرون استوانه است، نشان داده شده است. همان طور که در شکل نیز مشخص است، با افزایش مقدار  $\epsilon$ ، که متناظر با افزایش ضریب دی‌الکتریک درون استوانه  $\epsilon_2$  نسبت به ضریب دی‌الکتریک بیرون استوانه  $\epsilon_1$  می‌باشد، عبارت  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  از مقادیر منفی بزرگ به سمت مقادیر منفی کوچک و صفر میل می‌کند. به عبارتی با افزایش  $\epsilon$  قدر مطلق عبارت  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  کاهش می‌یابد.

در شکل‌های ۳، ۴ و ۵ رفتار پتانسیل الکتریکی نسبت به

به تابع  $F_m$  هم به صورت زیر تعریف می‌شود

$$F_m = -\left(\frac{K_m(\gamma\rho_<)}{I_m(\gamma\rho_<)}\right) \quad (13)$$

$$\frac{\gamma a I'_m(\alpha\gamma) I_m(ak) - \epsilon k a I_m(\alpha\gamma) I'_m(ak)}{\gamma a K'_m(\alpha\gamma) I_m(ak) - \epsilon k a K_m(\alpha\gamma) I'_m(ak)}$$

در این رابطه  $\epsilon \equiv \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}$  و علامت پریم بر روی توابع بسل نشان دهنده مشتق اول نسبت به آرگمان آن است.

به کمک تابع گرین به دست آمده، می‌توان پتانسیل فضای

اطراف مولکول را با استفاده از رابطه زیر محاسبه کرد [۱۸]

$$\Phi_{DH}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1} \int \sigma_f(\vec{r}') G_1(\vec{r}, \vec{r}') d^3r'. \quad (14)$$

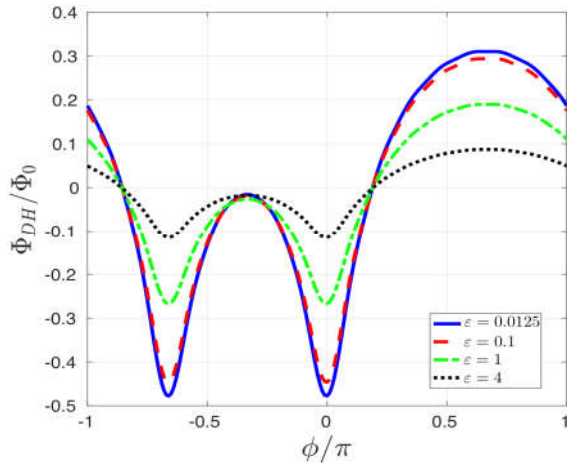
توجه داریم که اثر بارهای موجود در محلول در محاسبه تابع گرین وارد شده است و در رابطه فوق، تنها باید چگالی بارهای ثابت را در محاسبه پتانسیل وارد کرد. شایان ذکر است که پتانسیل به دست آمده از رابطه بالا، در رژیم دیبای- هوکل بوده و زیرنویس  $DH$  هم بیانگر این موضوع است. پس از انتگرال‌گیری در رابطه بالا، پتانسیل بیرون استوانه به صورت زیر به دست می‌آید،

$$\Phi_{DH}(\vec{r}) = \frac{-ze}{\pi\epsilon_0\epsilon_1 b} \sum_{m=1}^{m_c} I_m \left( a \sqrt{(m\omega_0)^2 + \kappa^2} \right) K_m \left( a \sqrt{(m\omega_0)^2 + \kappa^2} \right) [1 + F_m]_{k=m\omega_0} \times \left\{ \cos[m(\varphi - z\omega_0)] + \cos[m(\varphi - (z - \xi)\omega_0)] \right\}. \quad (15)$$

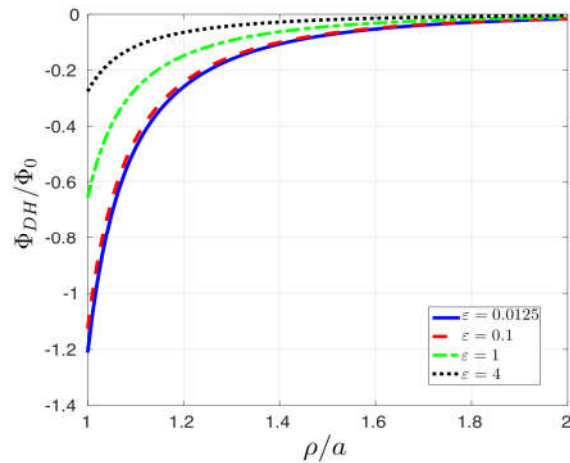
از آنجا که پهنای هر رشته در طبیعت صفر نیست و در حد چند آنگستروم است، حد بالای جمع در رابطه فوق به صورت  $m_c = \frac{\gamma\pi a}{w}$  تعیین می‌شود که در آن  $w$  نشان دهنده پهنای هر رشته است. در ادامه مقاله، با در نظر گرفتن پارامترهای ساختاری DNA،  $a = 1$  nm و  $w = 4-5$  Å،  $m_c = 15$  به دست می‌آید.

### ۳. نتایج

در ادامه به بررسی پتانسیل به دست آمده در رابطه (۱۵) که مربوط به یک پلیمر باردار دو رشته‌ای با ساختار مارپیچی

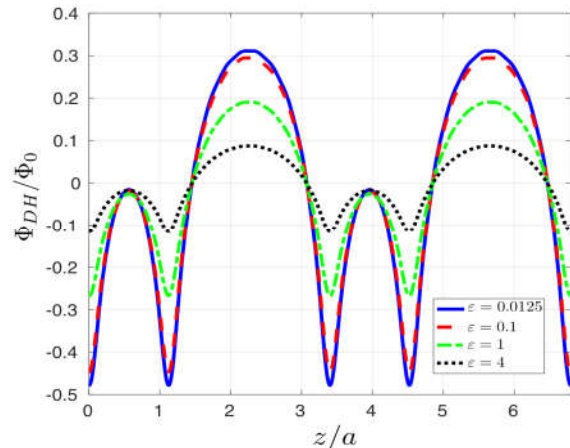


شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  بر حسب مختصه زاویه‌ای سمتی  $\varphi$ . این نمودار در مختصات  $\rho/a = 1/1$  و  $z/a = 0$  رسم شده است. نمودار متناظر با پارامترهای  $aK = 1$ ،  $a\omega_0 = 1/85$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$  است.



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  بر حسب مختصه شعاعی  $\rho$ . این نمودار در مختصات  $\varphi = 0$  و  $z/a = 0$  رسم شده است. نمودار متناظر با پارامترهای  $aK = 1$ ،  $a\omega_0 = 1/85$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$  است.

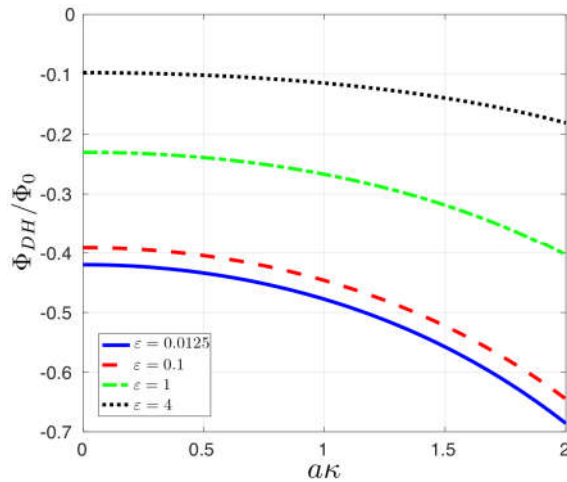
همان طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، در مختصات  $\varphi = 0$  و  $z = 0$  به ازای تمامی  $\varepsilon$  ها با فاصله گرفتن از سطح مولکول و با افزایش مختصه شعاعی  $\rho$ ، مقدار  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  از مقادیر منفی به سمت صفر میل کرده و اندازه آن کوچک تر می شود. علاوه بر آن، با افزایش  $\varepsilon$ ، کمینه مقدار  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  که در سطح استوانه یعنی  $\rho = a$  قرار دارد، افزایش یافته و با آهنگ کمتر به سمت صفر میل می کند. مورد دیگری که این نمودار بیان می کند، مهم بودن تغییرات پتانسیل به ازای  $\rho$  در  $\varepsilon$  های کوچک به ویژه در  $\varepsilon \leq 1$  است.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  بر حسب مختصه  $z/a$ . این نمودار در مختصات  $\rho/a = 1/1$  و  $\varphi = 0$  رسم شده است. نمودار متناظر با پارامترهای  $aK = 1$ ،  $a\omega_0 = 1/85$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$  است.

رفتار پتانسیل نسبی  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  نسبت به مختصه زاویه‌ای سمتی  $\varphi$ ، در مختصات  $\rho/a = 1/1$  و  $z = 0$  در شکل ۴ نشان داده می شود. همان طور که در این شکل مشخص است، اطراف نقاط  $\varphi = 0$  و  $\varphi = -\frac{2\pi\xi}{P} \approx -\frac{2\pi}{3}$  (به ازای پارامترهای مربوط به DNA،  $DNA$ ،  $\xi = 1/13$  nm و  $P = 3/4$  nm) پتانسیل نسبی  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  دارای مقدار منفی بوده و در این نقاط دارای کمینه مقدار خود است. با توجه به توزیع بار در سطح استوانه،

مختصه‌های استوانه‌ای  $\rho$ ،  $\varphi$  و  $z$  به نمایش درآمده است. در تمامی این نمودارها رفتار  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  نسبت به هر کدام از مختصه‌ها به ازای چهار مقدار  $\varepsilon = 0.0125$ ،  $\varepsilon = 0.1$ ،  $\varepsilon = 1$  و  $\varepsilon = 4$  بررسی شده است.

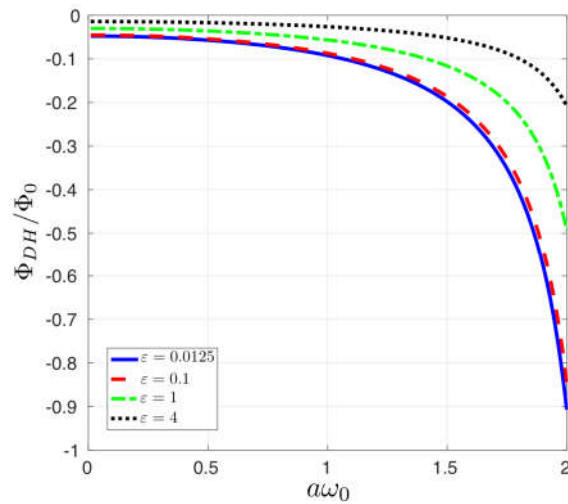


شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  برحسب کمیت بدون بعد  $ak$ . این نمودار در مختصات  $\rho/a = 1/1$ ،  $\varphi = 0$  و  $z = 0$  رسم شده است. نمودار متناظر با پارامترهای  $ak = 1/85$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$  است.

حاصل از این مولکول مارپیچی را نسبت به پارامترهای بدون بعد  $ak$  و  $a\omega_0$ ، در مختصات  $\rho/a = 1/1$ ،  $\varphi = 0$  و  $z = 0$  بررسی می‌کنیم.

در شکل ۶، تأثیر تغییرات پیچش ذاتی مولکول مارپیچی بر پتانسیل نسبی  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  نشان داده شده است. با توجه به شکل که متناظر با پارامترهای  $ak = 1$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$  است، در بازه  $1 \leq a\omega_0 \leq 10$ ، تغییرات پتانسیل نسبی به ازای  $\varepsilon$  های مختلف جزئی بوده و مقادیر نزدیک به هم دارند. برای مقادیر بزرگ‌تر  $a\omega_0$  یعنی  $a\omega_0 > 1$ ، تغییرات پتانسیل نسبی به ازای  $\varepsilon$  های مختلف قابل توجه و شدیدتر است، به طوری که هر چه مقدار  $\varepsilon$  کاهش می‌یابد، این تغییر شدیدتر می‌شود.

در شکل ۷، به ازای پارامترهای  $a\omega_0 = 1/85$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$ ، وابستگی رفتار  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  به تغییرات غلظت نمک محیط، با معرفی کمیت بدون بعد  $ak$  بررسی شده است. آنچه می‌توان گفت این است که در حالت کلی با افزایش غلظت نمک که طبق رابطه (۶)، معادل افزایش مقدار  $k$  است، مقدار نسبی پتانسیل به سمت مقادیر منفی با اندازه



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  برحسب کمیت بدون بعد  $a\omega_0$ . این نمودار در مختصات  $\rho/a = 1/1$ ،  $\varphi = 0$  و  $z = 0$  رسم شده است. نمودار متناظر با پارامترهای  $ak = 1$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$  است.

رابطه (۱)، این نقاط متناظر با زوایای مربوط به توزیع بار الکتریکی در سطح استوانه و در صفحه  $z = 0$  است. همچنین با افزایش مقدار  $\varepsilon$  اختلاف بین مقادیر کمینه و بیشینه پتانسیل نسبی کاهش می‌یابد، به طوری که این اختلاف در مقادیر کوچک  $\varepsilon$  به خصوص در مقادیر  $\varepsilon \leq 1$  قابل توجه است.

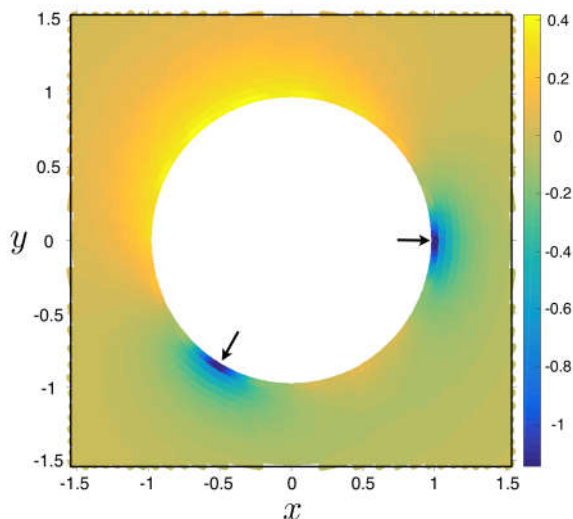
در شکل ۵، تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  نسبت به مختصه  $z$  در مختصات  $\rho/a = 1/1$  و  $\varphi = 0$  نشان داده شده است. با توجه به این نمودار می‌توان ساختار تناوبی توزیع بار مارپیچی را با پای پیچ  $P = 3/4$  nm مشاهده کرد. وجود کمینه‌هایی در نقاط  $z = nP$  و  $z = \xi + nP$  (به ازای  $\xi = 1/13$  nm و  $P = 3/4$  nm)، نیز مؤید وجود بارهای الکتریکی در این نقاط است که منطبق با رابطه مربوط به توزیع بار مارپیچی، رابطه (۱) می‌باشد. همانند موارد قبل، اختلاف بین مقادیر کمینه و بیشینه پتانسیل نسبی در  $\varepsilon \leq 1$  قابل توجه‌تر است. با توجه به پارامترهای ساختاری مولکول و طول پوششی دیبای، می‌توان چندین کمیت بدون بعد در مسأله تعریف کرد. در ادامه و در شکل‌های ۶ و ۷، وابستگی پتانسیل الکتریکی

رشته‌ای باردار با ساختار مارپیچی واقع در محلول نمک با توجه به وجود ناهمگنی دی‌الکتریکی بین درون و بیرون آن مورد بررسی قرار گرفته است. مطالعه چنین پلیمری از آن رو مورد توجه است که تعدادی از ماکرومولکول‌های زیستی، مانند DNA و رشته اکتین، که نقش بنیادی در کارکرد سلول زنده دارند را می‌توان به صورت یک پلیمر باردار با ساختار مارپیچ دوگانه در نظر گرفت. به منظور احتساب اثر یون‌های محیط، مسأله در تقریب دی‌ای-هوکل با در نظر گرفتن ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک حل شده و پتانسیل الکتروستاتیک بر حسب پارامترهای فیزیکی به دست آمده است.

همان طور که در شکل‌های ۴ و ۵ دیده می‌شود، در نزدیکی سطح مولکول و در مکان‌هایی که بارهای مولکول قرار دارند، پتانسیل الکتروستاتیک قوی‌تر است و با دور شدن از سطح مولکول، به دلیل پدیده پوششی، برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک به صفر میل می‌کند. این پدیده با زیاد کردن غلظت نمک که متناظر با کوچک کردن طول پوششی است، به خوبی خود را نشان می‌دهد.

در زیست‌شناسی در فرایندهای مختلف زیستی، DNA با پروتئین‌های مختلف برهم‌کنش می‌کند. همچنین رشته‌های اکتین در فرایندهای مختلف با یکدیگر و یا با موتور پروتئین‌های موجود در محیط ارتباط داشته و برهم‌کنش‌های موضعی پیش می‌آید [۱]. در تمامی این برهم‌کنش‌ها، به دلیل باردار بودن این رشته‌ها، برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک می‌توانند نقش به‌سزایی داشته باشند. از آنجا که فاصله نوعی مولکول‌ها در این برهم‌کنش‌ها کم است، تأثیر ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک در رفتار پتانسیل الکتروستاتیک می‌تواند نقش مهمی داشته باشد. همان طور که در شکل ۲ نیز دیده می‌شود، پتانسیل الکتروستاتیک در نزدیکی سطح استوانه، در حالتی که ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک بسیار بزرگ است ( $\epsilon \ll 1$ )، نسبت به حالت تقریباً همگن ( $\epsilon = 1$ )، بیش از ۵۰ درصد تغییر می‌کند.

برای برآورد تأثیر ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک، در مورد ماکرومولکول مهم DNA بحث می‌کنیم. در شرایط



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  در صفحه  $z=0$ . دو پیکان کوچک محل قرارگیری بار الکترونیکی بر سطح مولکول را نشان می‌دهد. نمودار متناظر با پارامترهای  $a\kappa=1$ ،  $a\omega_0=1/85$  و  $\xi_0=2/1$  است.

بزرگ میل می‌کند. وابستگی  $\frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0}$  به  $a\kappa$  به ازای  $\epsilon \leq 1$  بیشتر از مورد  $\epsilon > 1$  است، به طوری که در بازه  $a\kappa \leq 1$  پتانسیل نسبی به ازای  $\epsilon > 1$  تقریباً ثابت می‌ماند.

در پایان، رفتار پتانسیل الکتروستاتیک متناظر با پارامترهای  $a\kappa=1$ ،  $a\omega_0=1/85$  و  $\xi_0=2/1$  در صفحه  $z=0$  در شکل ۸، نشان داده می‌شود. نقاطی که با دو پیکان کوچک نشان داده شده‌اند، محل قرارگیری بار مربوط به دو رشته بر روی سطح مولکول است ( $\varphi=0$ ) و  $\varphi = -\frac{2\pi\xi_0}{P} \approx -\frac{2\pi}{3}$ ، به ازای پارامترهای مربوط به DNA،  $\xi_0=1/3$  nm و  $P=3/4$  nm. شدت رنگ متناظر با اندازه پتانسیل الکتروستاتیک است. همان طور که انتظار می‌رود، در مجاورت دو بار پتانسیل کمترین مقدار خود را داشته و در فاصله‌های دور از مولکول، پتانسیل به صفر میل می‌کند.

#### ۴. بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله پتانسیل الکتروستاتیک حاصل از یک پلیمر دو



خواهد بود. این در حالی است که در صورت نادیده گرفتن ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک، این پتانسیل حدود  $\left| \frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0} \right| \approx 0.25$  می‌شود. شایان ذکر است که رفتار مشابهی برای مولکول اکتین نیز به دست می‌آید.

### تشکر

از آقای دکتر محمد خرمی به خاطر بحث‌های مفیدی که داشتیم، تشکر می‌کنیم.

فیزیولوژیک، طول پوششی دیبای حدود ۱ نانومتر است و ثابت دی‌الکتریک داخل این مولکول‌ها حدود ۱ و ثابت دی‌الکتریک محیط آبی حدود ۸۰ است. بنابراین ناهمگنی ضریب دی‌الکتریک حدود  $\epsilon \approx 0.125$  خواهد بود. با توجه به پارامترهای ساختاری B-DNA، پارامترهای بدون بعد چنین به دست می‌آیند:  $a\omega_0 = 1/85$ ،  $a\kappa = 1$  و  $\xi\omega_0 = 2/1$ . بنابراین در نزدیکی سطح مولکول و در جایی که بار نقطه‌ای قرار دارد، پتانسیل الکتروستاتیک حدود  $\left| \frac{\Phi_{DH}}{\Phi_0} \right| \approx 0.4$

### مراجع

- Bustamante, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **94** (1997) 6185.
- K Wagner, E Keyes, T W Kephart, and G Edwards, *Biophys. J.* **73** (1997) 21.
- A Noy, and R Golestanian, *J. Phys. Chem. B* **114** (2010) 8022.
- W H Taylor and P J Hagerman, *J. Mol. Biol.* **212** (1990) 363.
- F Mohammad-Rafiee and R Golestanian, *Phys. Rev. E* **69** (2004) 061919.
- A Rezaie-Dereshgi and F Mohammad-Rafiee, *J. Chem. Phys.* **148** (2018) 135101.
- W Pezeshkian, N Nikoofard, D Norouzi, F Mohammad-Rafiee, and H Fazli, *Phys. Rev. E* **85** (2012) 061925.
- A Naji, D S Dean, J Sarabadani, R R Horgan, and R Podgornik, *Phys. Rev. L* **104** (2010) 060601.
- J D Jackson, “*Classical Electrodynamics*”, 3rd ed. John Wiley and Sons, (2007).
- J L Barrat and J F Joanny, *Adv. Chem. Phys.* **94** (1996) 1.
- H Lodish *et al.*, “*Molecular Cell Biology*”, 5th ed. Freeman, New York (2000).
- J N Israelachvili, “*Intermolecular and Surface Forces*”, 3rd ed. Academic Press (2011).
- V A Bloomfield, D M Crothers, and I Tinco Jr., “*Nucleic Acids: Structure, Properties, and Functions*”, University Science Books, Sausalito, CA (2000).
- J Howard, “*Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton*”, Sinauer Associates, Sunderland, MA, (2001).
- T Odijk, *J. Polym. Sci. Polym. Phys. Ed.* **15** (1977) 477.
- M Fixman and J Skolnick, *J. Phys. Chem. B* **114** (1977) 3185.
- G S Manning, *Biophys. J.* **91** (2006) 3607.
- P J Hagerman, *Biopolymers* **22** (1983) 811.
- M D Wang, H Yin, R Landick, J Gelles, and S M Block, *Biophys. J.* **72** (1997) 1335.
- C G Baumann, S B Smith, V A Bloomfield, and C