

耗散粒子动力学研究双层膜线张力与抗弯刚度的关系*

刘源 梁好均**

(中国科学院软物质化学重点实验室 中国科学技术大学高分子科学与工程系 合肥 230026)

摘要 利用耗散力粒子动力学模拟方法研究了拉伸状态下双层膜的抗弯刚度与膜孔线张力之间的关系. 通过对双层膜在不同投影面积约束下的系统模拟, 观察到3个区域: 自由振动膜、伸展膜和穿孔膜. 由前两个区域的应力张量计算得到的膜的面张力(σ_s)与拟合膜波动性质得到的面张力(σ_{inc})吻合的很好, 除去在两区域的转变点附近 σ_{inc} 略大于 σ_s . 当考虑在经典 Helfrich 弹性膜模型中被忽略的膜厚度时, 线张力可以和抗弯刚度用一个简单的模型联系起来. 通过对穿孔膜区域的数据进行分析, 证明由本模型得到的抗弯刚度与拟合膜波动性质得到的抗弯刚度符合的很好. 由此提出一种简便的测量方法, 通过计算拉伸膜孔的面张力和统计膜厚度, 拟合这个简单模型来测量膜的抗弯刚度.

关键词 双层膜, 面张力, 线张力, 抗弯刚度

双层膜是由两亲性分子在水溶液中自组装而成的对称双层流体结构, 具有高弹性和高可变性, 同时又能够保持拓扑结构完整. 生命体中构成膜的主要物质是脂质体, 它们具有一个小的亲水端和一条疏水尾巴, 可以在溶液中组装成为各种结构, 典型的如胶束、双层膜以及囊泡. 为了研究膜的性质, 人们进行过大量的实验和理论研究, 其中最成功的模型是由 Helfrich 提出的弹性膜模型^[1]. 在这个模型中, 不考虑膜的厚度, 膜由面张力 σ 、自发曲率 c_0 、抗弯刚度 κ 以及高斯刚度 κ_G 等参数控制. 在欧阳钟灿等^[2]引入面积约束与体积约束后, 他们得到了轴对称的双凹碟形状解^[3], 解释了红细胞形状的成因. 对于一个不封闭的膜, 其边缘有长度变短的趋向, 表现为线张力 τ . 在实验中, 通过加入 talin 可以使囊泡打开, 形成多种不同的拓扑结构^[4], 如杯状(1个孔), 管状(2个孔), 多孔状甚至完全张开呈自由的膜. 涂等发展了自由边缘膜的理论模型^[5], 认为 talin 改变的是双层膜的线张力, 并将线张力处理为一个独立参数, 得到与实验吻合程度很高的数值解.

膜上的孔对于膜的融合、细胞内外的物质运输、信息传递等生命过程有着重要意义. 理论和模拟都对膜孔的线张力、自由能面等性质进行过研究^[6-11], 包括膜孔自由能随半径大小的变

化^[6,9-11], 膜孔边缘线张力的不同计算方法^[7], 以及膜孔的产生和闭合的动力学^[7,9]等. 理论研究和模拟都发现, 膜孔的线张力在孔半径较大时, 可以用简单的近似关系 $\tau = \sigma R$ 来描述, 但是当孔半径较小, 接近膜厚度时, 自由能会迅速下降, 需要引入复杂的几何模型加以描述^[6,10]. 多种不同空间尺度下膜的专门粒子模型也被建立, 包括粗粒化模型^[12-14]、耗散粒子动力学模型^[15,16]等. 但在这些模拟和理论工作中, 线张力与抗弯刚度关系的研究仍比较少. Chernomordik 等在研究单层膜融合^[17]时曾引入一个简化模型, 认为单层膜弯曲的曲率增加是导致膜融合的驱动力; Wohlerl 等的文章^[10]以及李剑锋的博士论文中^[18], 曾用相似的假设通过不同的方法计算膜孔的线张力并在孔半径较大时得到相同的结果. 但对于这个关系的定量模拟工作尚鲜见报道.

本文将把单层膜融合研究中的模型^[17], 应用到双层膜孔的线张力的计算中, 得到线张力与抗弯刚度的定量关系. 同时建立双层膜的耗散粒子动力学模型, 在较宽的投影面积范围对双层膜体系进行系统模拟, 覆盖涨落较大的褶皱膜、涨落较小的拉伸膜以及拉伸较大导致破裂的穿孔膜, 通过模拟数据和理论结果进行比较和讨论.

* 2012-10-25 收稿; 2012-12-13 修稿; 国家自然科学基金(基金号 20934004, 91127046)资助.

** 通讯联系人, E-mail: hjiang@ustc.edu.cn

1 模拟方法与理论模型

1.1 耗散粒子动力学方法

耗散粒子动力学 (dissipative particle dynamics 简称 DPD) 是一种在介观尺度模拟软物质流体体系的方法. Hoogerbrugge 等将流体中的分子集团行为用软球模拟, 大大提高了模拟的尺度和稳定性^[19]. Espanol 和 Warren 将涨落-耗散理论与之结合, 得到符合统计力学规律的 DPD 算法^[20], 新耗散力和随机力的引入使体系在正确的热浴中采样, 并能够保证动量守恒, 可以很好的研究热力学和流体力学作用. Groot 等进一步将 Flory-Huggins 理论引入 DPD 模拟^[21], 建立了两亲性相互作用参数 χ 与 DPD 排斥力参数之间的联系, 使 DPD 方法可以在介观尺度模拟高聚物的共混. 近些年, DPD 模拟被广泛用于各种高聚物自组装体系^[22,23], 还有高分子穿孔体系^[24,25]的研究中.

DPD 模拟中采用约化参数, 粒子的运动服从牛顿第二定律 $\dot{\vec{r}} = \vec{v}_i$, $\ddot{\vec{r}} = \vec{F}_i/m$. 其中 \vec{F}_i/m 为第 i 个粒子所受的力, 有如下形式:

$$\vec{F}_i = \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^D + \vec{F}_{ij}^R \quad (1)$$

可以看到粒子间的相互作用共分 3 类, 分别为保守力

$$\vec{F}_{ij}^C = a_{ij} \omega(r_{ij}) \vec{n}_{ij} \quad (2)$$

耗散力

$$\vec{F}_{ij}^D = -\gamma \omega^2(r_{ij}) (\vec{n}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}) \vec{n}_{ij} \quad (3)$$

和随机力

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma \omega(r_{ij}) \zeta \Delta t^{-1/2} \vec{n}_{ij} \quad (4)$$

其中 $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_i - \vec{v}_j$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$, $\vec{n}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$. 质量 m 取为 1. 参数 a_{ij} 为保守力强度, 和高分子两亲性有明确联系^[21]. 而 σ 和 γ 分别为耗散因子和黏性系数, 关系为:

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T \quad (5)$$

参数 ζ 为高斯分布的随机变量, 满足:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \langle \zeta(0) \zeta(t) \rangle = \delta(t) \quad (6)$$

权重函数 $\omega(r)$ 为一线性软势:

$$\omega(r) = \begin{cases} 1 - r/r_c & (r < r_c) \\ 0 & (r \geq r_c) \end{cases} \quad (7)$$

式中 r_c 为截断半径. 运动方程由 Velocity-Verlet 算法求解.

1.2 膜的建模与拉伸模拟

本文采用线形拓扑结构链来描述两亲性分

子. 亲水端 (H) 用两颗珠子表示, 疏水尾巴 (T) 用六颗珠子表示, 水用单颗珠子 (W) 表示, 3 种珠子之间的相互作用参数见表 1. 两亲性分子珠子之间用弹簧势相连, 弹性力参数为 $k = 100$, 平衡键长 $l_0 = 1.0$. 时间步长 $\Delta t = 0.04$, 黏性系数 $\gamma = 4.5$, 温度为 $k_B T = 1.0$, 由式 (5) 可知 $\sigma = 3.0$. 模拟中流体珠子数密度 $\rho = 3.0$, 初始盒子大小为 $20 \times 20 \times 36$. 在盒子中间宽为 6 的区间中随机放置 900 条两亲性分子组成膜层, 在其两侧随机放置 36000 个水珠子, 体系中共 43200 个珠子.

Table 1 Interaction parameters in DPD simulation

	H	T	W
H	25	80	25
T	80	25	80
W	25	80	25

在实验中, 膜一般被固定在一个框架 (frame) 内, 通过测量框架所受的拉力来测量膜的面张力, 通过控制框架所包围的面积来研究膜张力的变化. 模拟中为了模仿这一过程, 缓慢增加 (或减少) 盒子平行于膜方向的横截面积, 但随之减少 (或增加) 垂直方向的盒子长度, 使总体积不变, 这样在保证体系数密度的条件下, 膜的投影面积可以作为控制参数, 而面张力的改变可以通过应力张量计算得到.

经过 10^5 步预平衡得到初始结构后, 共进行四组模拟. 第一组模拟为膜的拉伸. 经过 4.8×10^6 步模拟, 盒子的横截面积由原来的 $20 \times 20 = 400$, 拉伸为 862; 同时盒子的高度由 36 减小为 16.9. 在此过程中, 发生膜的破裂. 第二组模拟为膜的压缩, 以第一组模拟的结果作为初始构象, 同样经过 4.8×10^6 步缓慢改变盒子形状使之恢复原始形状. 在此过程中发生的膜孔的闭合. 第三组模拟由第一和第二组模拟的轨迹, 每 10^5 步提取一个初始构象, 得到两组每组 49 个初始结构, 从每个结构出发进行平衡态模拟 2×10^5 步, 采用得到的轨迹计算不同拉伸状态下的应力张量. 第四组在没有破孔的区域, 等间隔选取 16 个构象进行 10^6 步平衡态模拟, 采用得到的轨迹计算膜的涨落. 从第一组模拟中提取 3 个示意构象见图 1 (a), 在投影面积为 496 时, 膜处于涨落很大的褶皱状态; 投影面积为 631 时, 膜处于拉伸状态, 结构较为平整涨落很小; 投影面积 847 时, 膜由于拉伸过大而破裂产生穿孔.

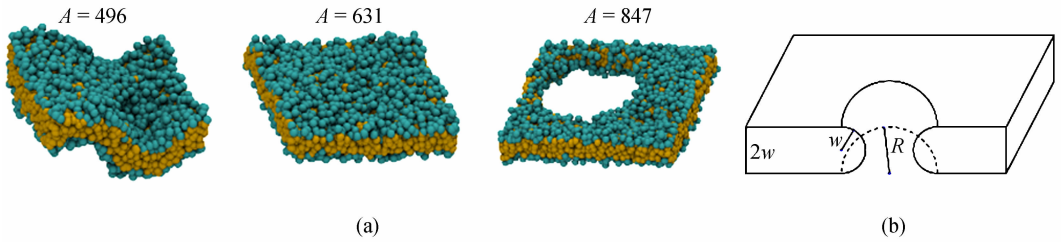


Fig. 1 (a) Snapshots of membranes with different projected areas ($A = 496, 631, 847$); (b) Schematic diagram of the pore in the membrane

1.3 单层膜线张力模型

Helfrich 得到的弹性膜能量模型^[1]为研究膜弹性行为的连续模型的基础

$$F = \oint \left[\sigma + \frac{\kappa}{2}(c_1 + c_2 - c_0)^2 + \frac{\kappa_G}{2}c_1c_2 \right] dA \quad (8)$$

其中 c_1 和 c_2 为膜的主曲率, c_0 为自发曲率, κ 为抗弯刚度, κ_G 为高斯刚度. 本工作中不考虑高斯项的影响, 且认为膜的两侧对称, 即 $c_0 = 0$. 如果将线张力的来源考虑成膜在边缘处的曲率增加所导致的能量上升, 并视膜孔的形状为如图 1(b) 所示规整的圆环内侧, 则膜孔表面的主曲率分别为 $c_1 = 1/w$ 及 $c_2 = 1/R$, 其中 w 为单层膜厚度, R 为膜孔半径. 可以得到膜孔的能量表达式

$$E_{\text{pore}} = \kappa_s \left(\frac{1}{w} + \frac{1}{R} \right)^2 S_{\text{pore}} = \kappa_s \left(\frac{1}{w} + \frac{1}{R} \right)^2 \pi w (2\pi R) \quad (9)$$

这里 κ_s 为单层膜的抗弯刚度, 有 $\kappa = 2\kappa_s$. 此式要求 $R > w$ 才有意义.

线张力定义为膜孔能量对其周长的导数 $\tau = dE_{\text{pore}}/dl$, 而 $l = 2\pi R$, 整理可得

$$\tau = \pi \kappa_s w \left(\frac{1}{w^2} - \frac{1}{R^2} \right) \quad (10)$$

这个关系通过引入膜厚度把线张力和抗弯刚度联系起来. 可以看出, 当 R 远大于 w 时, 有 $\tau = \pi \kappa_s / w$, 这个极限与文献[10]与文献[18]中的结果一致.

对于拉伸条件下稳定存在的膜孔, 膜孔能量与膜拉伸的能量竞争达到平衡, 即 $\tau \cdot dl = \sigma \cdot dS$, 其中 $S = \pi R^2$, 整理得到

$$\tau = \sigma R \quad (11)$$

进一步可以建立面张力与抗弯模量的联系, 当 R 远大于 w 时

$$\sigma = \frac{\pi \kappa_s}{wR} \quad (12)$$

1.4 由应力张量计算面张力

膜体系的面张力有多种方式可以计算, 其中最常用的是由 Kirkwood-Buff 公式^[26,27]得到的利用应力张量主元计算面张力的公式

$$\sigma_{\Sigma} = \frac{L_z}{A} \left(p_{zz} - \frac{p_{xx} + p_{yy}}{2} \right) \quad (13)$$

其中 L_z 为体系在 z 方向上的宽度, A 为体系在 $x-y$ 平面的截面积, 即 $A = L_x L_y$, p_{xx} , p_{yy} , p_{zz} 为应力张量的主元, 体系压强可以由它们计算得到 $p = (p_{xx} + p_{yy} + p_{zz})/3$.

1.5 由膜涨落拟合面张力和抗弯刚度

当膜被视为只在平衡位置附近振动时, 可以使用蒙日描述 (Monge representation)^[28], 将膜的形状写为 $h(x, y)$, 意为在坐标 (x, y) 点膜的偏移量. 当涨落不太大时, 公式(8)可以写为

$$F = \sigma A_p + \int_{A_p} dx dy \left[\frac{\sigma}{2} (\nabla h)^2 + \frac{\kappa}{2} (\Delta h)^2 \right] \quad (14)$$

如果对 $h(x, y)$ 做傅里叶变换

$$\bar{h}_{\vec{q}} = \frac{1}{A_p} \int_{A_p} dx dy \exp(i \vec{r} \cdot \vec{q}) h(x, y) \quad (15)$$

则能量可以改写为

$$F = \sigma A_p + \frac{1}{2L^2} \sum_{\vec{q}} (\sigma q^2 + \kappa q^4) |\bar{h}_{\vec{q}}|^2 \quad (16)$$

定义 $S(q) = |\bar{h}_{\vec{q}}|^2$, 则可以由下式来拟合表面张力和抗弯模量

$$S(q) = \frac{k_B T}{A_p (\sigma_{\text{fluc}} q^2 + \kappa q^4)} \quad (17)$$

2 结果与讨论

2.1 由应力张量计算面张力

使用第 1.4 节中的方法对第三组模拟的 98 条轨迹进行计算, 可以得到如图 2 所示膜的面张力随投影面积变化的曲线, 图中存在 3 个不同的状态区间. 在投影面积 $A_p < 529$ 的区域, 膜的张力基本不变, 拟合得到 $\sigma_r = -0.47$, 在此区域膜不

受任何拉伸,可以自由振动.在投影面积 $529 < A_p < 650$ 的区域,三角点表示完整膜的面张力,可以看到随着投影面积增加,面张力线性增加,线性关系拟合为

$$\sigma_{\Sigma} = 0.02664 \times A_{\text{mem}} - 14.578 \quad (18)$$

这里 A_{mem} 为膜的面积.在投影面积 $A_p > 626$ 的区域方形点表示穿孔膜的面张力,由于线张力的存在,膜仍然受到一定程度拉伸,面张力随着投影面积增加缓慢下降.

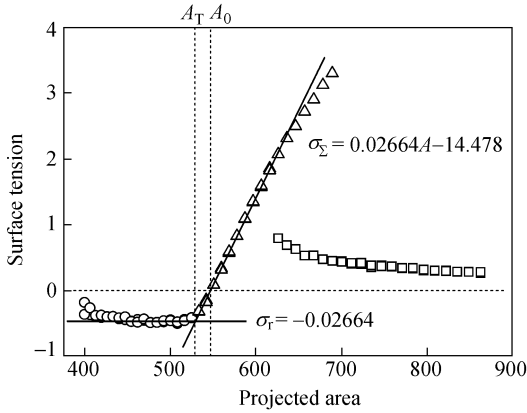


Fig. 2 The surface tension on the bilayer membrane plotted against the projected area

2.2 由完整膜的涨落数据拟合面张力和抗弯刚度

对于完整膜的数据,将膜在 $x-y$ 平面内分成 16×16 的网格,统计每个格子中两亲性分子珠子的 z 坐标并求平均得到 $h(x, y)$,对其做离散二维傅里叶变换,并由公式(17)拟合,可以得到面张力和抗弯刚度.图3中给出拟合得到面张力(方点)并和上一节通过应力张量得到的面张力结果(三角点)进行比较.在投影面积 $A_p < 450$ 的区域,两种方法的结果偏差很大且有较大的涨落误差,说明在此区间由于膜的涨落过大,2种模型都已经失效.在 $450 < A_p < 500$ 区间, σ_{Σ} 与 σ_{fluc} 的结果非常一致,都为稳定的常数.在 $500 < A_p < 550$ 区间,面张力由常数向线性增加过渡,在这个过程中 σ_{fluc} 略大于 σ_{Σ} .近年的研究工作^[29]指出,对于这一现象前人的研究存在争议,取 σ_{Σ} 作为实验中膜对框架作用力 σ_f 的表征,Farago 等^[30]认为 $\sigma_{\text{fluc}} = \sigma_f$,而 Imparato 等^[28]的模拟结果以及 Fournier 等^[31]的理论工作支持 $\sigma_{\text{fluc}} > \sigma_f$.我们的系统模拟结果暗示,争议的产生可能来源于不同的工作所研究的拉伸程度不同,即在整个拉伸区间,2种面张力都比较吻合,而仅在膜从拉伸状态向松弛状

态过渡的一段小区域有 $\sigma_{\text{fluc}} > \sigma_f$.

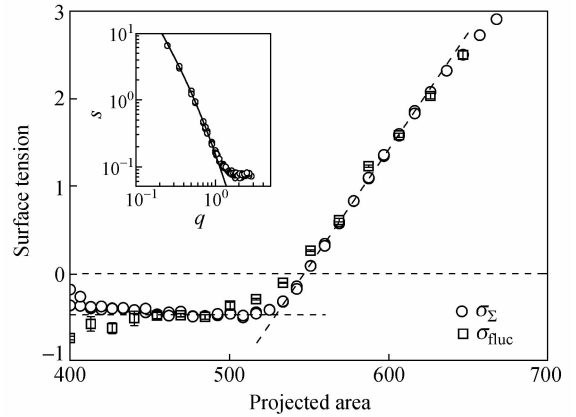


Fig. 3 The surface tension calculated by stress tensor (circle) and fluctuation (square) against projected area. Inset shows an example fitting curve at $A_p = 626$.

在区间 $450 < A_p < 650$,如图4所示,抗弯刚度 κ 的值比较稳定,松弛膜和拉伸膜之间的抗弯刚度没有显著差异,拟合得到 $\kappa = 4.6 \pm 0.3$.在 $A_p < 450$ 的区间 κ 值产生了较大的涨落,也暗示蒙日模型已经失效.

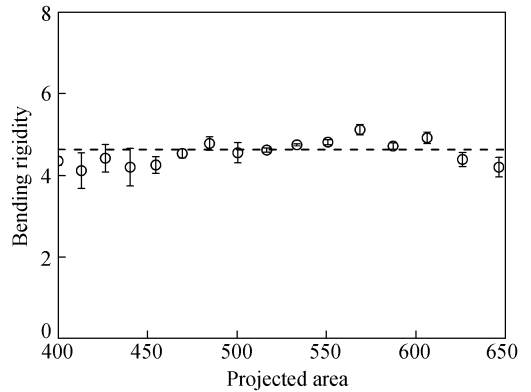


Fig. 4 The bending rigidity against projected area

2.3 由膜孔数据拟合抗弯刚度

对于穿孔膜,投影面积 A_p 为膜的面积 A_{mem} 与膜孔面积 A_{pore} 之和.膜的面积可以由公式(18)得到,而孔的面积为 $A_{\text{pore}} = \pi R^2$,于是我们可以计算膜孔半径的倒数 $1/R$.将面张力 σ_{Σ} 与 $1/R$ 线性拟合,如图5,由公式(12)可知

$$\pi \kappa_s / w = 3.37 \pm 0.06 \quad (19)$$

要计算单层膜抗弯刚度还需要知道膜厚 w .图6中给出了不同面张力下的两亲性分子亲水端在 z 方向的分布,可以看到其峰值随着面张力的增加没有明显变化,我们得到单层膜的厚度为 $w = 1.95 \pm 0.01$.由公式(19)算得 $\kappa_s = 2.1 \pm 0.1$,

于是可以得到双层膜的抗弯刚度 $\kappa = 4.2 \pm 0.2$, 与通过拟合膜涨落得到的结果符合的很好.

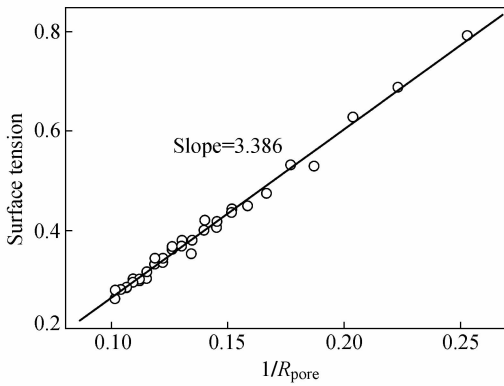


Fig. 5 The surface tension against the reciprocal of pore radius

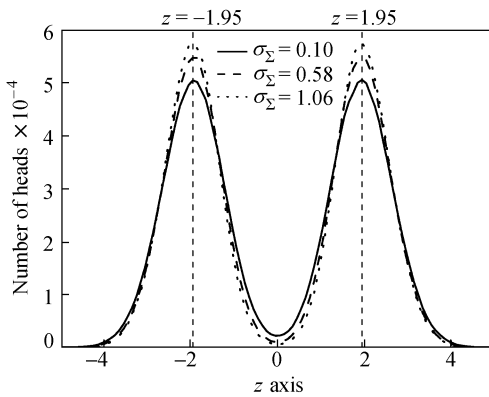


Fig. 6 The distribution of head beads against the z -axis with different surface tension 0.10 (solid line), 0.58 (dashed line) and 1.06 (dot line)

比较这两种方法,通过膜涨落数据拟合,需要更长的平衡时间来得到收敛的结果.而拟合膜孔数据,可以用很短的模拟轨迹得到很好的收敛结果而且数据的线性关系很好.

Deserno 等^[32] 还曾提出过一种利用拉伸膜管计算抗弯刚度的巧妙方案,但这个方案的缺点是模拟中构造膜管技术上比较麻烦而且并没有考虑管内外的对称性影响.

综上,我们得到了一个简便的计算双层膜抗弯刚度方法.先计算单层膜厚度,然后利用 1.3 节中的简单模型,拟合拉伸膜孔的面张力数据,即可通过公式(19)计算单层膜的抗弯刚度进而得到双层膜抗弯刚度 κ . 以往的两种方法比较,本方法具有操作简便,结果稳定收敛迅速的优点.

3 结论

通过对双层膜在不同投影面积下的 DPD 模拟,由应力张量计算了膜的面张力 σ_s ,并拟合膜的涨落数据得到面张力 σ_{fluc} 和抗弯刚度 κ . σ_s 与 σ_{fluc} 在大部分模拟区间都非常吻合,除了在褶皱程度很大的区间 ($A_p < 450$) 模型失效,以及在膜从拉伸状态向松弛状态转变时 σ_{fluc} 略大于 σ_s ,这一结果验证了近年的理论模拟工作.我们用简单模型推导了膜孔半径较大时线张力与抗弯刚度的关系,并得到模拟数据很好的验证,通过拟合不同膜孔半径数据得到的抗弯刚度与 κ 可以很好的符合.由此本文提出一种简单的方法计算双层膜抗弯刚度并与传统方法进行了比较讨论.

REFERENCES

- 1 Helfrich W. Z Naturforsch C, 1973, 28(11): 693 ~ 703
- 2 Ou-Yang Z, Helfrich W. Phys Rev Lett, 1987, 59(21): 2486 ~ 2488
- 3 Naito H, Okuda M, Ou-Yang Z. Phys Rev E, 1993, 48(3): 2304 ~ 2307
- 4 Saitoh A, Takiguchi K, Tanaka Y, Hotani H. Proc Natl Acad Sci USA, 1998, 95(3): 1026 ~ 1031
- 5 Tu Z, Ou-Yang Z. Phys Rev E, 2003, 68(6): 1 ~ 7
- 6 Tolpekina T, den Otter W, Briels W. J Chem Phys, 2004, 121(23): 12060 ~ 12066
- 7 Tolpekina T, den Otter W, Briels W. J Chem Phys, 2004, 121(16): 8014 ~ 8020
- 8 Farago O, Santangelo C. J Chem Phys, 2005, 122(4): 44901
- 9 Wang Z, Frenkel D. J Chem Phys, 2005, 123(15): 154701
- 10 Wohlert J, den Otter W, Edholm O, Briels W. J Chem Phys, 2006, 124(15): 154905
- 11 den Otter W. J Chem Phys, 2009, 131(20): 205101
- 12 Marrink S, Vries A, Mark A. J Phys Chem B, 2004, 108(2): 750 ~ 760
- 13 Cooke I, Deserno M. J Chem Phys, 2005, 123(22): 224710
- 14 Cooke I, Kremer K, Deserno M. Phys Rev E, 2005, 72(1): 011506
- 15 Allen M. J Phys Chem B, 2006, 110(8): 3823 ~ 3830

- 16 Meyer F, Smit B. Proc Natl Acad Sci USA, 2009, 106(10):3654 ~ 3658
- 17 Chernomordik L, Kozlov M, Melikyan G, et al. Biophysica Acta, 1985, 812(3):643 ~ 655
- 18 Li Jianfeng (李剑锋). Theoretical Modeling and Simulations of the Dformation and Phase Separation of Membranes(膜的形变与相分离的理论和模拟研究). Doctoral Dissertation of Fudan University(复旦大学博士论文), 2009
- 19 Schlijper A, Hoogerbrugge P, Manke C. J Rheol, 1995, 39(3):567 ~ 579
- 20 Espanol P, Warren P. Europhys Lett, 1995, 30(4):191 ~ 196
- 21 Groot R, Warren P. J Chem Phys, 1997, 107(11):4423 ~ 4435
- 22 Li Xuejin(李学进). Multiscale Modeling of Polymeric Systems: From the Atomistic to the Mesoscopic Scales and Bridging the Gap(聚合物微观和介观及多尺度贯通的粒子模拟研究). Doctoral Dissertation of University of Science and Technology of China(中国科学技术大学博士论文), 2009
- 23 Wang Yonglei(王永雷), Li Zhanwei(李占伟), Liu Hong(刘鸿), Lü Zhongyuan(吕中元). Progress in Physics(物理学进展), 2011, 31(1):1 ~ 21
- 24 Guo Jiayi(郭佳意), Li Xuejin(李学进), Liang Haojun(梁好均). Acta Polymerica Sinica(高分子学报), 2012, (2):160 ~ 167
- 25 Zhou Luwen(周吕文), Liu Moubin(刘谋斌), Chang Jianzhong(常建忠). Acta Polymerica Sinica(高分子学报), 2012, (7):720 ~ 727
- 26 Kirkwood J, Buff F. J Chem Phys, 1949, 17(3):338 ~ 343
- 27 Stecki J. J Phys Chem B, 2008, 112(14):4246 ~ 4252
- 28 Imparato A. J Chem Phys, 2006, 124(15):154714
- 29 Schmid F. Europhys Lett, 2011, 95(2):28008
- 30 Farago O, Pincus P. Eur Phys J E, 2003, 11(4):399 ~ 408
- 31 Fournier J, Barbeta C. Phys Rev Lett, 2008, 100(7):1 ~ 4
- 32 Vagelis H, Markus D. J Chem Phys, 2006, 125(20):204905

DISSIPATIVE PARTICLE DYNAMICS SIMULATION ON THE EFFECT OF LINE TENSION ON BENDING RIGIDITY OF BILAYER MEMBRANES

Yuan Liu, Hao-jun Liang

(CAS Key Laboratory of Soft Matter Chemistry, Department of Polymer Science and Engineering,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

Abstract The relationship between line tension and bending rigidity of extended bilayer membrane is studied in this paper. Extensive simulations of bilayer membrane with different projected areas were performed, and three regions have been found, *i. e.*, freely fluctuating membrane, extended membrane and extended membrane with a pore. Surface tension (σ_{Σ}) calculated from stress tensor is in good agreement with that (σ_{fluc}) calculated by fitting the membrane fluctuation data in freely fluctuating region and extended region except that at the transition point σ_{fluc} is a little higher than σ_{Σ} . By introducing a very simple model, line tension of the pore can be calculated from bending rigidity and membrane thickness which is ignored in the classical Helfrich model, on the other hand, bending rigidity can be determined by line tension and membrane thickness. The results in the pore region show that the bending rigidity got from the simple model is in good agreement with the bending rigidity calculated by fitting the membrane fluctuation data in the freely fluctuating region and extended region. A convenient method for measuring the bending rigidity of bilayer membranes is then proposed.

Keywords Bilayer membrane, Surface tension, Line tension, Bending rigidity