ИНДЕКС 3649

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Препринт ЕФИ-1187(64)-89

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE

В.Б.АРАКЕЛЯН

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖДУ КЛЕТКАМИ С УЧЕТОМ ДИСКРЕТНОСТИ ЗАРЯДА

ЦНИИатоминформ
ЕРЕВАН - 1989

Նախնատիպ ԵՖԻ - II87(64)-89

Վ.Բ.ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

ԲՋԻՋՆԵՐԻ ՄԻՋԵՎ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ԲԱՇԽՈՒՄԸ՝ ԼԻՑՔԻ ԴԻՍԿՐԵՏՈՒԹՅՈՒՆԸ ՀԱՇՎԻ ԱՌՆԵԼՈՎ

Աշխատանքում հաշված է պոտենցիալը երկու բջիջների միջև՝ հաշվի առնելով ֆիքսված լիցքի դիսկրետությունը ինչպես էլեկտրոլիտի ծավալում, այնպես էլ բջիջների մակերեսի վրա։ Ստացված է նաև պոտենցիալի համար մոտավոր արտահայտություն, որը հարմար է թվական հաշվումների համար։

Երևանի ֆիզիկայի ինստիտուտ
Երևան 1989

При взаимодействии клеток важно знать распределение потенциала между клетками [I,2]. Обычно для вычисления потенциала задают плотность распределения зарядов у поверхности клеток, а потенциал определяется из решения соответствующих уравнений электростатики и с учетом необходимых граничных условий. Как правило, плотность зарядов задают в виде непрерывной функции от расстояния до плоскости мембраны [3,4] . Однако очевидно, что если плотность зарядов мала, то следует учитывать дискретность заряда. Для учета дискретности заряда решим следующую ключевую задачу. Поместим точечный заряд (q) в точку $\vec{r}_i$ в растворе электролита между клетками I и 2. Поверхность первой клетки совпадает с координатной плоскостью xy , а поверхность второй клетки отстоит от первой на расстоянии a . Ось z направлена перпендикулярно поверхностям клеток. Таким образом, задача сводится к решению системы уравнений: линеаризованного уравнения Пуассона-Больцмана в области $0 < z < a$

$$\Delta\Phi_i = \text{æ}^2\Phi_i - \frac{q\delta(\vec{r}-\vec{r}_i)}{\varepsilon_o\varepsilon_s} \qquad (I)$$

и уравнений Лапласа для потенциалов Φ_1 и Φ_2 в мембранах клеток

I и 2 (из-за низкого значения диэлектрической проницаемости мембраны ($\varepsilon_m \simeq 2$) заряды в мембране отсутствуют)

$$\Delta\phi_1 = 0, \tag{2}$$

$$\Delta\phi_2 = 0, \tag{3}$$

где $\varkappa^{-1}$ - дебаевская длина в растворе; ε_o и ε_s - диэлектрические проницаемости вакуума и раствора соответственно. Примем, что мембраны клеток представляют собой полубесконечные фазы, так что $\phi_1(z=-\infty)=0$ и $\phi_2(z=+\infty)=0$. На границах раздела фаз имеем обычные условия непрерывности потенциала и нормальной составляющей электрической индукции

$$\phi_1 = \phi_i \qquad (z=0), \tag{4}$$

$$\varepsilon_m \frac{\partial\phi_1}{\partial z} = \varepsilon_s \frac{\partial\phi_i}{\partial z} \qquad (z=0), \tag{5}$$

$$\phi_i = \phi_2 \qquad (z=a), \tag{6}$$

$$\varepsilon_s \frac{\partial\phi_i}{\partial z} = \varepsilon_m \frac{\partial\phi_2}{\partial z} \qquad (z=a). \tag{7}$$

Решения ϕ_i, ϕ_1 и ϕ_2 ищем в виде

$$\phi_i = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o\varepsilon_s}\int_0^\infty\left(\frac{k\exp(-|z-z_i|\sqrt{k^2+\varkappa^2})}{\sqrt{k^2+\varkappa^2}} + V(k)\exp(-z\sqrt{k^2+\varkappa^2}) + \mathcal{D}(k)\exp(z\sqrt{k^2+\varkappa^2})\right)J_0(k|\vec{\rho}-\vec{\rho}_i|)\,dk, \tag{8}$$

$$\phi_1 = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o\varepsilon_m}\int_0^\infty U(k)\exp(kz)J_0(k|\vec{\rho}-\vec{\rho}_i|)\,dk, \tag{9}$$

$$\phi_2 = \frac{q}{4\pi\varepsilon_o\varepsilon_m}\int_0^\infty C(k)\exp(-kz)J_0(k|\vec{\rho}-\vec{\rho}|)\,dk,$$

$$|\vec{\rho}-\vec{\rho}_i| = ((x-x_i)^2+(y-y_i)^2)^{1/2}, \tag{10}$$

где $V(k)$, $\mathcal{D}(k)$, $U(k)$, $C(k)$ - неизвестные функции, которые определяются из системы уравнений (4) - (7) после подстановки в них функций (8) - (10). После несложных, но довольно громоздких вычислений имеем

$$V(k) = \frac{k\mu_1\left(\exp(\sqrt{k^2+\varkappa^2}(a-z_i))\mu_2 + \exp(-\sqrt{k^2+\varkappa^2}(a-z_i))\mu_1\right)}{\sqrt{k^2+\varkappa^2}\left(\exp(\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,a)\mu_2^2 - \exp(-\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,a)\mu_1^2\right)} \tag{11}$$

$$\mathcal{D}(k) = \frac{k\exp(-\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,a)\mu_1\left(\exp(\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,z_i)\mu_2 + \exp(-\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,z_i)\mu_1\right)}{\sqrt{k^2+\varkappa^2}\left(\exp(\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,a)\mu_2^2 - \exp(-\sqrt{k^2+\varkappa^2}\,a)\mu_1^2\right)} \tag{12}$$

$$U(k)=\frac{2k\left(\exp\left(\sqrt{k^2+æ^2}\,(a-z_i)\right)\mu_2+\exp\left(-\sqrt{k^2+æ^2}\,(a-z_i)\right)\mu_1\right)}{\exp\left(\sqrt{k^2+æ^2}\,a\right)\mu_2^2-\exp\left(-\sqrt{k^2+æ^2}\,a\right)\mu_1^2} \quad (13)$$

$$C(k)=\frac{2k\left(\exp\left(\sqrt{k^2+æ^2}\,(a-z_i)\right)\mu_1+\exp\left(\sqrt{k^2+æ^2}\,(a+z_i)\right)\mu_2\right)}{\exp\left(\sqrt{k^2+æ^2}\,a\right)\mu_2^2-\exp\left(-\sqrt{k^2+æ^2}\,a\right)\mu_1^2}\,*$$

$$(14)$$

$$*\exp\left(-a\left(\sqrt{k^2+æ^2}-k\right)\right),$$

$$\mu_1=\xi\sqrt{k^2+æ^2}-k\,,\quad \mu_2=\xi\sqrt{k^2+æ^2}+k\,,\quad \xi=\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_m}\,.$$

Полученное выражение потенциала (8) с учетом (11) и (12) позволяет определить потенциал между клетками при произвольном числе фиксированных зарядов. Для этого следует суммировать вклады от отдельных зарядов.

Для численных расчетов формула (8) не удобна, поскольку содержит интегралы. Выражение для потенциала (8) можно упростить, использовав условие $\varepsilon_m \ll \varepsilon_s$, которое соблюдается на границе мембрана ($\varepsilon_m \simeq 2$) - раствор электролита ($\varepsilon_s \approx 80$). Принимая, что $\varepsilon_m/\varepsilon_s \ll 1$ из (8) после несложных вычислений получим

$$\phi_i \simeq \frac{q}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_s}\left(\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{\exp\left(-æ\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z-z_i-2\ell a)^2}\right)}{\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z-z_i-2\ell a)^2}}+\right.$$

$$+\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{\exp\left(-æ\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z+z_i+2\ell a)^2}\right)}{\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z+z_i+2\ell a)^2}}+$$

$$+\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{\exp\left(-æ\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z-z_i+2\ell a)^2}\right)}{\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z-z_i+2\ell a)^2}}+$$

$$\left.+\sum_{\ell=1}^{\infty}\frac{\exp\left(-æ\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z+z_i-2\ell a)^2}\right)}{\sqrt{(\rho-\rho_i)^2+(z+z_i-2\ell a)^2}}\right).$$

Потенциал (15), содержащий ряды по экспонентам, быстро сходится и удобен для численных расчетов. Заметим, что полученные выражения для потенциалов (8) и (15) позволяют учитывать дискретность фиксированного заряда не только в объеме электролита, но и на поверхностях клеток, для этого следует в формулах поставить значение z_i , равное нулю (поверхность первой клетки), или же z_i , равное a (поверхность второй клетки).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Donath E., Voigt A. Effect of thick fixed-charge layers on electrostatic interaction - a theoretical approach. Colloid Polym. Sci., 1988, vol. 266, pp. 1024-1030.
2. Lerche D. A Biophysical Model for Interaction of Cells with a Surface Coat (Glycocalyx). I. Electrostatic Interaction Profile. J. Theor. Biol., 1983, vol.104, pp.231-248.
3. Donath E., Pastushenko V. Electropheretical Study of Cell Surface Properties. The Influence of the Surface Coat on the Electric Potential Distribution and on General Electrakinetic Properties of Animal Cells. J. Electroanal. Chem., 1979, vol.104, pp.543-554.
4. Donath E., Pastoshenko V. Electrophoretic Study of Cell Surface Properties Theory and Experimental Applicability. J. Electroanal. Chem., 1980, vol.116, pp.31-40.

Рукопись поступила 27 июля 1989 г.

В.Б.АРАКЕЛЯН
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖДУ КЛЕТКАМИ С УЧЕТОМ ДИСКРЕТНОСТИ ЗАРЯДА
Редактор Л.П.Мукаян
Технический редактор А.С.Абрамян

Подписано в печать 24/УШ-89г. ВФ-02281 Формат 60х84/16
Офсетная печать. Уч.изд.л.0,5 Тираж 2999 экз. Ц. 8 к.
Зак.тип.№ 1384 Индекс 3649

Отпечатано в Ереванском физическом институте
Ереван 36, ул.Братьев Алиханян , 2