ИНДЕКС 3649

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Препринт ЕФИ-1312(7)-91

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
YEREVAN PHYSICS INSTITUTE

В.Б.АРАКЕЛЯН

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА СЕЛЕКТИВНОГО ЦЕНТРА, РАСПОЛОЖЕННОГО ВБЛИЗИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО КАНАЛА

ЦНИИатоминформ
ЕРЕВАН - 1991

Նախնատիպ ԵրՖԻ-1312(7)-91

Վ.Բ.ԱՌԱՔԵԼՅԱՆ

ԳԼԱՆԱՁԵՎ ԿԱՆԱԼԻ ՄՈՏ ՏԵՂԱԿԱՅՎԱԾ ՍԵԼԵԿՏԻՎ ԿԵՆՏՐՈՆԻ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ՀԱՇՎՈՒՄԸ

Աշխատանքում մակրոսկոպիկ էլեկտրադինամիկայի շրջանակներում հաշվված է պոտենցիալը՝ անվերջ թաղանթի միջավայրը ներթափանցող գլանաձև կանալում: Պոտենցիալը պայմանավորված է լիցքերի և դիպոլների համակարգով, որոնք կամայականորեն տեղակայված են ինչպես թաղանթի, այնպես էլ իոնական-կանալ-թաղանթի փուլ բաժանման սահմանում:

Երևանի ֆիզիկայի ինստիտուտ
Երևան 1991

Транспорт ионов по ионным каналам существенным образом зависит от наличия селективного центра в области канала. Согласно общепринятым представлениям, селективный центр представляет собой лиганд, несущий или заряд, или дипольный момент [I] . Взаимодействие транспортируемой частицы с заданным селективным центром определяет, какой ион может проходить через канал. В основе селективности лежит электростатическое взаимодействие[2] При этом в простейшем случае взаимодействие селективного центра с ионом рассматривается без участия мембраны, то есть фактически в вакууме. В расчетах используется электрический потенциал иона и диполя в вакууме. Не рассматривается влияние материала мембраны и канала на потенциал селективного центра и соответственно на энергию взаимодействия иона с селективным центром. В данной работе в рамках макроскопической электродинамики вычисляется потенциал селективного центра с учетом диэлектрических характеристик материалов мембраны и канала. В качестве простейшей модели селективного центра примем точечный заряд , расположенный в мембране, вблизи цилиндрического ионного канала, пронизывающий бесконечную мембранную среду. Решение этой ключевой задачи позволяет рассматривать также селективный центр с произвольным числом зарядов, в частности и тот случай, когда селективный центр представляет собой диполь. Представим ионный канал в виде бесконечного цилиндра с радиусом b и диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_к$. Мембранная среда имеет диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_м$. Поскольку точечный заряд (q_i) находится в мембранной фазе, потенциал в мембране $\Phi_{мi}$ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta\Phi_{мi} = -\frac{q_i\,\delta(\rho-\rho_i)\,\delta(\varphi-\varphi_i)\,\delta(z-z_i)}{\varepsilon_0\varepsilon_м\,\rho}, \tag{I}$$

где ε_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума;

ρ_i, φ_i, z_i - цилиндрические координаты точки, где находится точечный заряд q_i. Так как в канале зарядов нет, потенциал в канале ($\Phi_{кi}$) удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\Delta\Phi_{кi} = 0. \tag{2}$$

К уравнениям (I-2) следует добавить условия непрерывности потенциала и нормальной составляющей электрической индукции на границе раздела "мембрана - ионный канал":

$$\Phi_{кi} = \Phi_{мi}, \qquad \rho = b, \tag{3}$$

$$\varepsilon_к\frac{\partial\Phi_{кi}}{\partial\rho} = \varepsilon_м\frac{\partial\Phi_{мi}}{\partial\rho}, \qquad \rho = b. \tag{4}$$

Надо учитывать то обстоятельство, что потенциал на оси канала имеет конечное значение, а в глубине мембранной фазы потенциал равен нулю, то есть $\Phi_{мi}(\rho=\infty)=0$. Учитывая это, решения уравнений (I-2) ищем в виде

$$\Phi_{мi} = \frac{q_i}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_м\,|\vec{r}-\vec{r}_i|} + \frac{q_i}{2\pi^2\varepsilon_0\varepsilon_м}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\exp(jm(\varphi-\varphi_i))\int_0^{\infty}A_m K_m(k\rho)\cos k(z-z_i)\,dk, \tag{5}$$

$$\Phi_{кi} = \frac{q_i}{2\pi^2\varepsilon_0\varepsilon_к}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\exp(jm(\varphi-\varphi_i))\int_0^{\infty}\mathcal{D}_m I_m(k\rho)\cos k(z-z_i)\,dk, \tag{6}$$

где $|\vec{r}-\vec{r}_i|$ - расстояние между точечным зарядом и местом, где определяется потенциал; K_m, I_m - модифицированные функции Бесселя; A_m, $\mathcal{D}_m$ - неизвестные коэффициенты, которые определяются из уравнений (3-4) после подстановки в них потенциалов (5,6). При подстановке (5) в (3) и (4) нужно воспользоваться известным выражением [3]

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}_i|} = \frac{2}{\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\exp(jm(\varphi-\varphi_i))\int_0^{\infty}I_m(k\rho_<)\times \tag{7}$$

$$K_m(k\rho_>)\cos k(z-z_i)\,dk\,,$$

где $\rho_<$ и $\rho_>$ – соответственно меньшая и большая из величин ρ и ρ_i. Из системы уравнений (3–4) определяются следующие значения для A_m и $\mathcal{D}_m$:

$$A_m=\frac{kb(R-1)I_m'(kb)\,I_m(kb)\,K_m(k\rho_i)}{1-kb(R-1)\,K_m'(kb)\,I_m(kb)}\,, \tag{8}$$

$$\mathcal{D}_m=\frac{K_m(k\rho_i)}{1-kb(R-1)\,K_m'(kb)\,I_m(kb)}\,, \tag{9}$$

где $R=\varepsilon_м/\varepsilon_к$. Легко показать, что, как и следовало ожидать, результаты данной работы совпадают с результатами работы [4] при условии, что заряд расположен на границе раздела "мембрана-ионный канал", т.е. в точке $\rho_i=b$. Если селективный центр имеет несколько зарядов, то потенциал, созданный такой системой зарядов, можно получить простым суммированием по координатам, где расположены заряды. Рассмотрим практически важный случай, когда селективный центр представляет собой систему из двух разноименных зарядов, расположенных на небольшом расстоянии друг от друга, т.е. некоторый эффективный диполь. Для вычисления потенциала от такой системы зарядов воспользуемся решением приведенной выше ключевой задачи. Ввиду громоздкости выражений здесь определим потенциал в канале, поскольку для вычисления энергии взаимодействия иона с селективным центром нужно

но знать значение именно этого потенциала. Использовав (6), вычислим потенциал диполя в канале ϕ^d_{ki} при наличии селективного дипольного центра в мембране в точке с координатами ρ_i , φ_i , z_i по формуле

$$\phi^d_{ki}=\lim_{\substack{\Delta\rho_i\to 0,\ \Delta\varphi_i\to 0\\ \Delta z_i\to 0}}\Big(\phi^{(+)}_{ki}(\rho_i+\Delta\rho_i,\ \varphi_i+\Delta\varphi_i,\ z_i+\Delta z_i)+ \phi^{(-)}_{ki}(\rho_i-\Delta\rho_i,\ \varphi_i-\Delta\varphi_i,\ z_i-\Delta z_i)\Big), \tag{10}$$

где верхние индексы (+) и (–) у потенциалов указывают на то, каким зарядом (положительным или отрицательным) создан потенциал в канале. После подстановки в (10) выражения (6) с учетом знаков зарядов получим следующее окончательное выражение для потенциала внутри канала, обусловленного наличием дипольного селективного центра в мембране вблизи канала.

$$\phi^d_{ki}=\frac{d_{\rho i}}{2\pi^2\varepsilon_0\varepsilon_к}\int_0^\infty\Big(\alpha_0 I_0(k\rho)\,\frac{\partial K_0(k\rho_i)}{\partial(k\rho_i)}+ 2\sum_{m=1}^{\infty}\cos(m(\varphi-\varphi_i))\,\alpha_m I_m(k\rho)\,\frac{\partial K_m(k\rho_i)}{\partial(k\rho_i)}\Big)\times k\cos(k(z-z_i))\,dk+\frac{d_{zi}}{2\pi^2\varepsilon_0\varepsilon_к}\int_0^\infty\Big(I_0(k\rho)\,\mathcal{D}_0+ \tag{11}$$

$$+2\sum_{m=1}^{\infty}\cos(m(\varphi-\varphi_i))\, I_m(k\rho)\,\mathcal{D}_m)\, k\sin(k(z-z_i))\,dk\, +$$

$$+\frac{d_{\varphi i}}{\pi^2\varepsilon_0\varepsilon_K}\int_0^{\infty}\cos(k(z-z_i))\sum_{m=1}^{\infty}\frac{m}{\rho_i}\sin(m(\varphi-\varphi_i))\, I_m(k\rho)\,\mathcal{D}_m\, dk,$$

$$\alpha_m^{-1} = 1-kb(R-1)\,K'_m(kb)\,I_m(kb),$$

$$\mathcal{D}_m = K_m(k\rho_i)\,\alpha_m\,,$$

где $d_{\rho i}, d_{z i}, d_{\varphi i}$ – составляющие дипольного момента в цилиндрической системе координат. Формула (II) определяет потенциал в канале при произвольной ориентации дипольного селективного центра в мембране. В частном случае, если ось диполя ориентирована параллельно оси канала, в (II) нужно оставить только z – составляющую дипольного момента.

Таким образом, формулы (6) и (II) задают выражения для потенциалов от точечных заряда и диполя, расположенных в мембране вблизи цилиндрического канала. Если же селективный центр имеет более сложную структуру, а именно, состоит из системы зарядов и диполей, то для определения потенциала в канале следует суммировать вклады от отдельных зарядов (6) и диполей (II). Имеем

$$\Phi_K = \sum_{i=1}^{N}\Phi_{Ki} + \sum_{i=1}^{N'}\Phi^{g}_{Ki}\,, \qquad (I2)$$

где Φ_{Ki} – потенциал, созданный точечным зарядом $q_i(6)$; Φ^{g}_{Ki} – потенциал, созданный точечным диполем $\vec{d}_i(d_{\rho i}, d_{zi}, d_{\varphi i})$; N и N' – полное число зарядов и диполей. Заметим, что в (I2) входят не только заряды и диполи, расположенные в мембранной фазе, но также заряды и диполи, расположенные на границе раздела "ионный канал – мембранная фаза". Для учета последних в (I2) нужно поставить $\rho_i = b$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ходоров Б.И. Общая физиология возбудимых мембран. М.: Наука. 1975.
2. Eisenman G. On the elementary atomic origin of equilibrium ionic specificity. In: Membrane transport and metabolism. Praque, 1961, 163-179.
3. Джексон Дж. Классическая электродинамика, М.: Мир, 1965.
4. Аракелян В.Б., Аракелян С.Б. Радиальный профиль энергии иона в ионном канале мембраны. Изв. АН АрмССР, Физика, 1985, т.20 вып.1, с.28-32.

Рукопись поступила 21 января 1991 г.

В.Б.АРАКЕЛЯН

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА СЕЛЕКТИВНОГО ЦЕНТРА, РАСПОЛОЖЕННОГО ВБЛИЗИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО КАНАЛА

Редактор Л.П.Мукаян
Технический редактор А.С.Абрамян

Подписано в печать — Формат 60x84/16
Офсетная печать. Уч.изд.л. 0,5 — Тираж 299 экз. — Ц. 8 к.
Зак.тип.№ 016 — Индекс 3649

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

The address for requests:
Information Department
Yerevan Physics Institute
Alikhanian Brothers 2,
Yrevan, 375036
Armenia, USSR