بهبودی بر نظریه خروج پلیمر نیمه انعطاف پذیر از نانوساختار کره

فرزانه معظمی-نرگس نیکوفرد

پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

مقدمه

در اکثر کارهای گذشته، خروج پلیمر انعطاف‌پذیر از کره به صورت شبیه‌سازی و نظری بررسی شده است [۱]. این در حالی است که زیست‌پلیمر شناخته شده، DNA دورشته‌ای، پلیمری نیمه‌انعطاف‌پذیر است. کارهای بسیاری در زمینه پلیمر نیمه‌انعطاف‌پذیر در نانوکره، به عنوان نمونه در مورد انرژی آزاد محدودسازی آن [۲] انجام شده است. خروج پلیمر نیمه‌انعطاف‌پذیر از کره نیز به صورت شبیه‌سازی بررسی شده است [۳]. سابقا از سوی نویسندگان، نظریه‌ای برای دینامیک خروج پلیمر نیمه‌انعطاف‌پذیر در محدوده وسیعی از طول‌ایستایی‌های پلیمر و اندازه‌های مختلف نانوکره ارائه شده است [۴]. در این کار، نیروی اتلاف وارد بر پلیمر بهبود بخشیده شده و مرحله نهایی خروج که فشار آنتروپی بر رفتار پلیمر حاکم نیست [۵]، بهتر فرمول‌بندی شده است.

تئوری

رژیمI :در فرمول‌بندی جدید، جمله اتلاف $T\dot{S}(t)\sim-\eta[\dot{L}(t)]^2 l$ می باشد که از برابر قرار دادن با مشتق انرژی و با استفاده از فرض τ_1 را به دست آورده . زمان پایان فرایند پیش رانده موقعی است که حباب داشته باشیم در این رژیم $\xi(\tau_2)\sim D$ که با جایگذاری در جمله فرض τ_{12} به دست می آید. از این لحظه به بعد نوع نیروی پیشران عوض می شود و نیروی اتصال داریم که ناشی از اتصال پلیمر به دیواره کره است: $F(t)\sim k_B T[(1-\acute{\gamma}_0)ln\frac{L(t)}{l}+(1-\acute{\gamma}_0\quad \ln\left(\frac{L_0-L(t)}{l}\right)-\frac{L(t)}{l}\Delta\mu_{io}$.از برابری مشتق این عبارت با جمله اتلاف و با استفاده از جمله فرض زمان مشخصه به دست می آید: $\tau_{a1}\sim\frac{{L_0}^2 l\,\tau_0}{b^3}$. این رژیم اتصال تا جایی ادامه دارد که طول پلیمر داخل کره به صفر برسد.در نهایت:

$$\tau\sim\tau_2+\tau_{a1}\sim\tau_0[2\left(\frac{lD^{10}}{b^{11}}\right)^{\frac{1}{3}}-\left(\frac{lD^{15}}{b^{15}L_0}\right)^{\frac{1}{4}}]$$

رژیم IV:در این رژیم با روشی مشلبه رژیم قبل τ_{1IV}را به دست آوردهفرآیند پیش رانده تا موقعی ادامه دارد که یک حباب داخل نی ب $L(\tau_2)\sim L_b\sim\frac{D^2}{l}$ سپس برابر با عبارت L(t) قرار می دهیم $L_0(1-\frac{\tau_2}{\tau_1})\sim\frac{D^2}{l}$ و $\tau_{12}\sim\tau_0\frac{D^4}{lb^3}$را به دست می آوریم.

از این لحظه به بعد نیروی اتصال داریم. همان روابطی که برای نما و زمان مشخصه در رژیم قبل بدست آمد، اینجا نیز صادق است .در نهایت:

$$\tau\sim\tau_{aIV}+\tau_2\sim\tau_0\left(\frac{D^4}{b^3 l}+\frac{D^2L_0}{b^3}-\frac{D^4}{lb^3}\right)=\tau_0\frac{D^2L_0}{b^3}$$

- رژیم V:از برابر قرار دادن جمله اتلاف با مشتق انرژی آزادعبارت $L(t)\sim L_0\left(1-\frac{t}{\tau_1}\right)$ به دست می آید که τ_1را می دهد.

فرآیند پیش رانده تا موقعی ادامه دارد که $L(\tau_2)\sim\lambda\sim(D^2 l)^{\frac{1}{3}}$که با جایگذاری در L(t)، $\tau_{12}\sim\tau_0\frac{D^{\frac{8}{3}}l^{\frac{1}{3}}}{b^3}$به دست می آید. همان روابطی که برای نما و زمان مشخصه در رژیم قبل بدست آمد، اینجا نیز صادق است با تفاوت در L_0.در نهایت داریم:

$$\tau\sim\tau_{aV}+\tau_2\sim\tau_0\left(\frac{D^{\frac{4}{3}}l^{\frac{5}{3}}}{b^3}+\frac{D^2L_0}{b^3}-\frac{D^{\frac{8}{3}}l^{\frac{1}{3}}}{L_0 b^3}\right)$$

رژیم II:در این رژیم بعد از به دست آوردن τ_1 دو حالت داریم در حالت اول اگر D مساوی با $l(\frac{L}{b})^{\frac{1}{3}}$ شود وارد رژیم I می شویم که داریم:

$$\tau\sim\tau_{3II}+\tau_{a1}\sim-\tau_{1I}-\tau_{2II}+\tau_0\left(\frac{lD^{10}}{b^{11}}\right)^{\frac{1}{3}}+\tau_{a1}\sim-\tau_0\frac{lD^3}{b^4}-\tau_0\frac{D^3 l}{b^4}\log\left(\frac{L_0}{b}\left(\frac{l}{D}\right)^3\right)+2\tau_0\left(\frac{lD^{10}}{b^{11}}\right)^{\frac{1}{3}}$$

در حالت دوم اگر $D\sim L(t)\frac{b}{l}$ شود وارد رژیم IV می شویم و در نهایت داریم:

$$\tau\sim2\tau_0\left(\frac{D^{10}l}{b^{11}}\right)^{\frac{1}{3}}+2\tau_0\frac{D^3 l}{b^4}\left[-1+\log\frac{l}{b}\right]+\tau_0\frac{l^2L_0}{b^3}$$

نتایج

در این رابطه، نظریه‌ای برای خروج پلیمر نیمه‌انعطاف‌پذیر از کره ارائه شد. نتایج نظری با شبیه‌سازی‌های موجود [۳] سازگاری نسبی دارد. در این شبیه‌سازی، نمای وابستگی زمان خروج به طول پلیمر در رژیم V حدود ۱.۴بدست آمده است. نظریه ما نمای وابستگی زمان خروج در محدوده مطالعه شده در مرجع [۳] را تقریبا۱.۵ می‌دهد. یکی از مشکلات نظریه پیشین این بود که رابطه زمان خروج با طول ایستایی را به صورت کاهشی پیش‌بینی می‌کرد. اما نظریه جدید نشان می‌دهد که زمان خروج با طول ایستایی افزایش پیدا می‌کند که این با نتایج شبیه‌سازی [۴] منطبق است.

مراجع

- [۱]Huang, H. C., & Hsiao, P. Y. (2019). Scaling Behaviors of a Polymer Ejected from a Cavity through a Small Pore. Physical Review Letters, 123(26), 267801.
- [۲]T. Sakaue; "Semiflexible Polymer Confined in Closed Spaces." *Macromolecules* **40**, No. 14 (2007) 5206-5211.
- [۳]R. P. Linna, P. M. Suhonen, and J. Piili; "Rigidity-Induced Scale Invariance in Polymer Ejection from Capsid"; *Physical Review E* **96**, No. 5 (2017) 052402.

[۴] فرزانه معظمی،نرگس نیکوفرد،مقاله خروج پلیمر نیمه انعطاف پذیر از نانو ساختار کروی،یازدهمین کنفرانس فیزیک آماری،ماده چگال نرم وسیستم های پیچیده،بهمن ۱۳۹۹ ،دانشگاه شهید بهشتی

[۵] Hao-Chun Huang and Pai-Yi Hsiao.Scaling Behaviors of a Polymer Ejected from a Cavity through a Small Pore Received 20 September 2019; published 30 December 2019