

Membrantransport

Julia Gatzek
Jörg Sauter
Betreuung: Tanja Mues

13.07.2010

Gliederung

1 Erinnerung

2 Erweiterungen

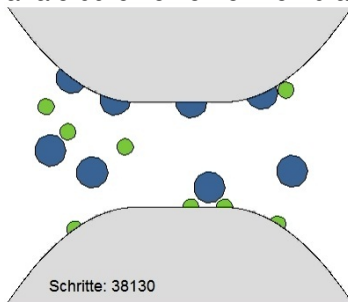
3 Ergebnisse

Lineares Potential

Quadratisches Potential

Tangens Hyperbolicus Potential

Wir betrachten den Transport von Ionen Na^+ und Cl^- über Kanäle durch eine Zellmembran.



- Jedes Teilchen, im Kanal hat die Energie:

$$E = z_i V(x_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (F_M(p_i, p_j) + F_C(p_i, p_j)),$$

- V ist das von außen auf das Ion wirkende Potential.
- F_M beschreibt die Wechselwirkungsenergie zwischen den einzelnen Ionen als Ionen-Ionen Potential

$$F_M(p_i, p_j) = U_{ij}^0 \left(\left(\frac{R_{ij}^c}{r_{ij}} \right)^9 - \exp \left(\frac{R_{ij}^h - r_{ij}}{c_e} \right) \cos \left(2\pi \frac{R_{ij}^h - r_{ij}}{c_w} \right) \right).$$

- F_C ist propotional zum Coulomb Potential $F_C = \frac{c}{r_{ij}}$

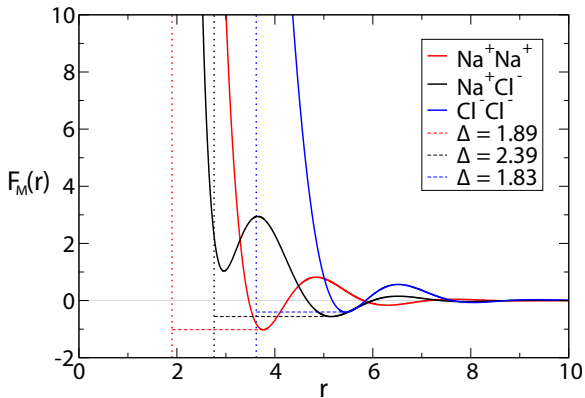


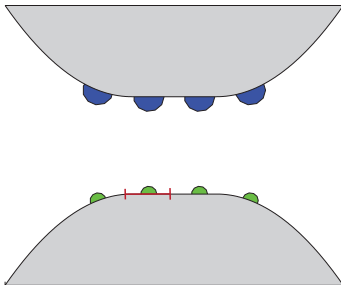
Abbildung: Das Potential F_M für die Ionenpaare Na^+Cl^- , Na^+Na^+ und Cl^-Cl^- .

Wir verwenden den Metropolis Algorithmus

- Falls $E_B < E_A$ wird die neue Konfiguration angenommen.
- Falls $E_A < E_B$ wird die neue Konfiguration mit der Wahrscheinlichkeit $e^{(E_A - E_B)/T}$ angenommen.

Erweiterung 1:

Randionen werden durch das Potential der Ionen im Kanal beeinflusst



Erweiterung 2:

Optimierung des Programmcodes. Aufwändigster Programmteil ist die Berechnung der Wechselwirkungsenergie.

- Es ändert sich immer nur die Positionen eines Teilchens, d.h. nur für dieses Teilchen müssen die Wechselwirkungen neu berechnet werden.
- Vernachlässigung von F_M und F_C für weit entfernte Ionen.
- Ergebnis: Reduktion der Laufzeit auf bis zu ein Sechstel. Weitere Einsparungen wurden erzielt indem nurnoch jedes zehnte Bild dem Film hinzugefügt wurde. Das komplette Verzichten auf die Ausgabe eines Films reduziert die Laufzeit auf die Hälfte.

Film:

- Wir untersuchen nun das Flussverhalten des Modells über je 50000 Schritte.
- Dazu fügen wir nach einer jeweils konstanten Zeitspanne neue Kationen und Anionen ein, wobei wir für Anionen und Kationen die gleiche Zeitspanne wählen. (Eingangsfluss)
- Wir betrachten dann die Anzahl der durchgelaufenen Ionen $F(t)$ über der Anzahl der Schritte t . (Ausgangssfluss)
- Die Graphen basieren auf lediglich einer einzelnen Simulation, sind also nur begrenzt aussagekräftig.
- Wir untersuchen das Modell mit einem linearen $V_l(x)$, einem quadratischen $V_q(x)$ und einem Potentials der Form Tangens Hyperbolicus $V_t(x)$.
- Zur besseren Vergleichbarkeit der Potentiale fordern wir
$$\int_{-18}^{18} V_l(x)dx = \int_{-18}^{18} V_q(x)dx = \int_{-18}^{18} V_t(x)dx.$$

Gliederung

1 Erinnerung

2 Erweiterungen

3 Ergebnisse

Lineares Potential

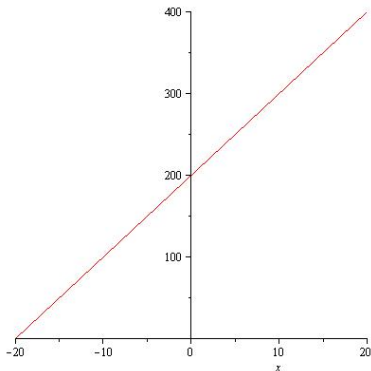
Quadratisches Potential

Tangens Hyperbolicus Potential

Wir betrachten nun das lineare Potential

$$V_l(x) = \frac{c_1(x + 20)}{40}$$

mit $c_1 = 400$.



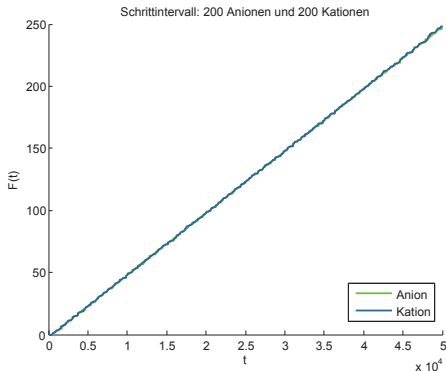
Als Ausgangspunkt vernachlässigen wir F_M und F_C vollständig und betrachten den Fluss.

Erinnerung

Erweiterungen

Ergebnisse

Lineares Potential

Quadratisches
PotentialTangens
Hyperbolicus
Potential

Für eine Eingangfluss von je einem Ion pro 200 Schritte ist der Ausgangsfluss linear.

Lineares Potential

Quadratisches

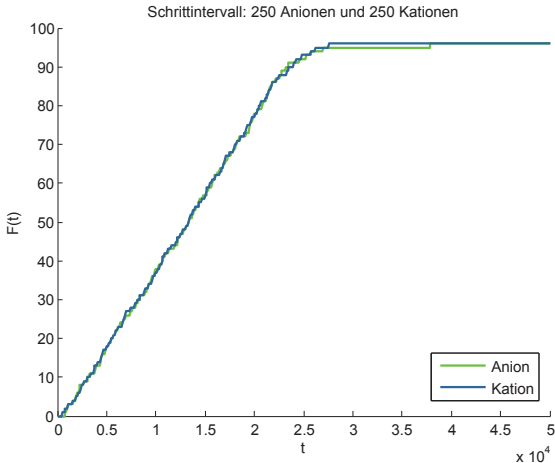
Potential

Tangens

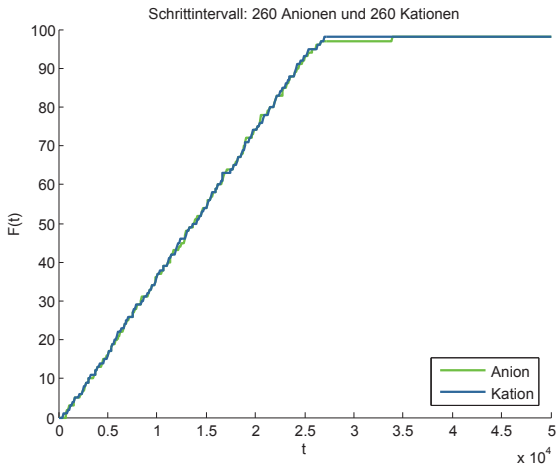
Hyperbolicus

Potential

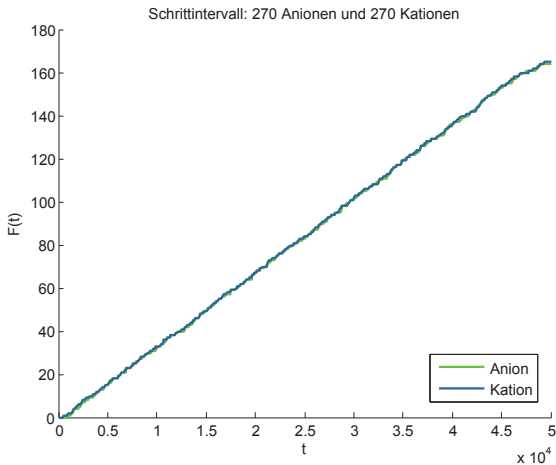
Berücksichtigt man die Wechselwirkungen F_M und F_C ist das nicht mehr der Fall. Der Kanal wird vollständig blockiert trotz eines geringeren Eingansflusses von $\frac{1 \text{ Ion}}{250 \text{ Schritte}}$.



Ebenso für einem Eingangsfluss von je $\frac{1 \text{ Ion}}{260 \text{ Schritte}}$.



Bei $\frac{1 \text{ Ion}}{270 \text{ Schritte}}$ tritt wieder ein nahezu linearer Ausgangsfluss auf.



Für einen Eingangsfluss von je $\frac{1 \text{ Ion}}{290 \text{ Schritte}}$ ist der Ausgangsfluss linear.

Lineares Potential

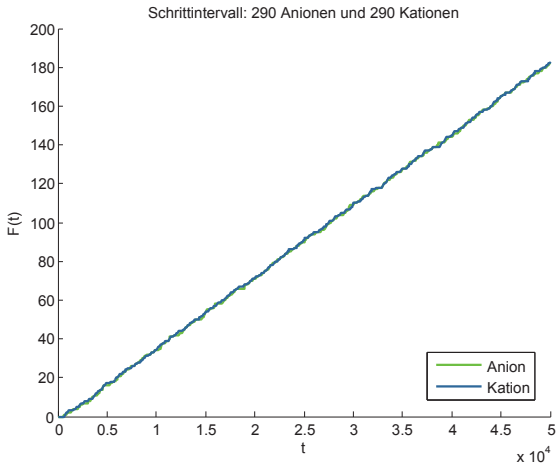
Quadratisches

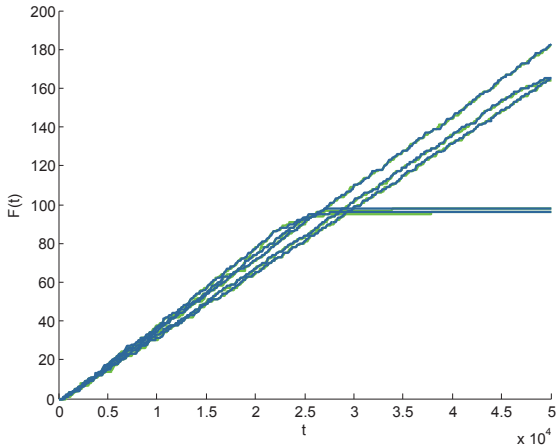
Potential

Tangens

Hyperbolicus

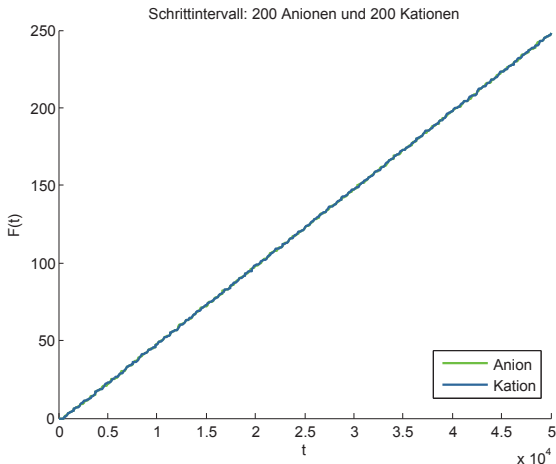
Potential





- Mit Ausnahme einer vergleichsweise kurzen Übergangsphase ist der Flussverlauf entweder linear oder der Kanal ist vollständig blockiert.
- Wie der vorige Graph schon andeutet, ist die Grenze des Eingangsflusses, ab der ein linearer Verlauf auftritt, keinesfalls scharf.
- Mit oft durchgeführten Simulationen (entsprechende Rechenkapazität bzw. weitere Vereinfachungen vorausgesetzt) könnte man für jeden Eingangsfluss eine Wahrscheinlichkeit dafür angeben, dass es zu einer vollständigen Blockade des Kanals kommt.
- Die Blockade entsteht bei einem linearem Potential meist im dem Bereich des Kanals mit dem geringsten Durchmesser.

Entfernt man die Randionen, stellt man fest, dass wieder wesentlich höhere Eingangsflüsse möglich sind ohne dass der Kanal blockiert. Die Berücksichtigung der Randionen hat also einen maßgeblichen Einfluss auf das Modell.



Gliederung

1 Errinerung

2 Erweiterungen

3 Ergebnisse

Lineares Potential

Quadratisches Potential

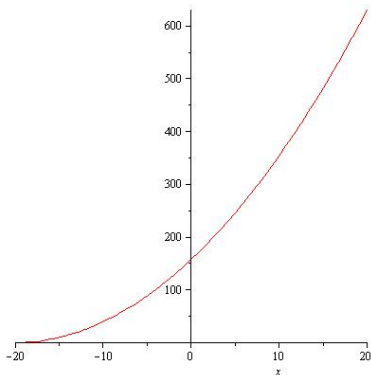
Tangens Hyperbolicus Potential

Wir untersuchen nun das Flussverhalten mit quadratischen Potential.

$$V_q(x) = c_2(x + 20)^2$$

mit $c_2 = \frac{50}{127}$.

Von Interesse dürfte dabei vor allem der schwache Anstieg auf der linken Seite sein.



Der Fluss der Kationen ist geringer als der Fluss der Anionen.

Erinnerung

Erweiterungen

Ergebnisse

Lineares Potential

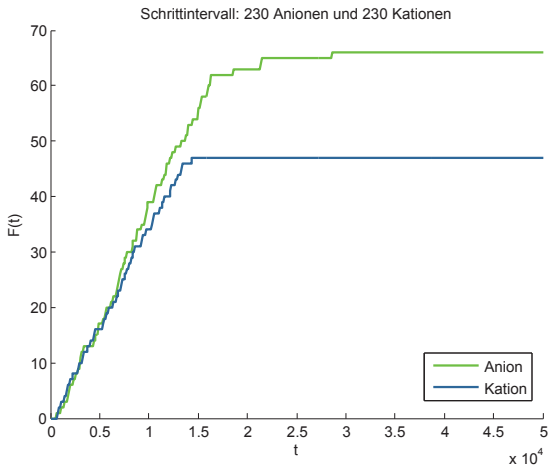
Quadratisches

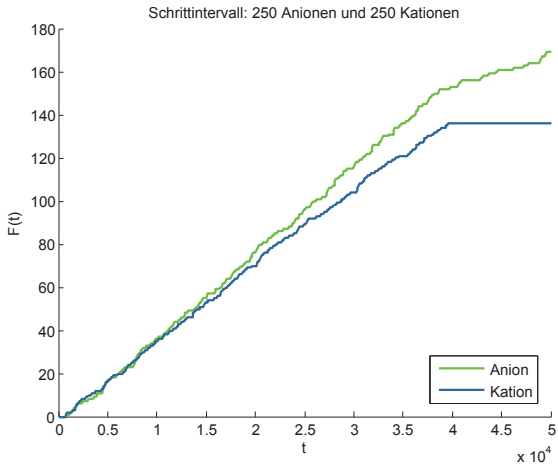
Potential

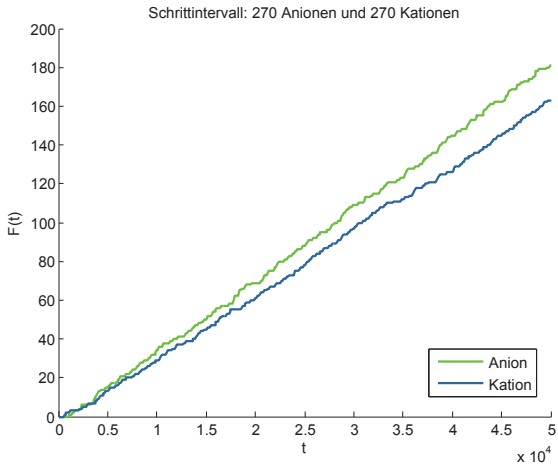
Tangens

Hyperbolicus

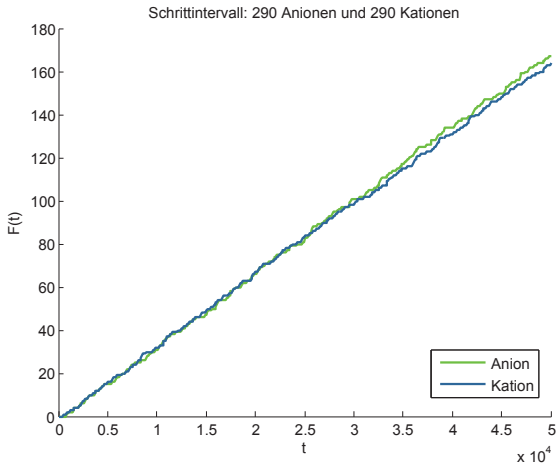
Potential

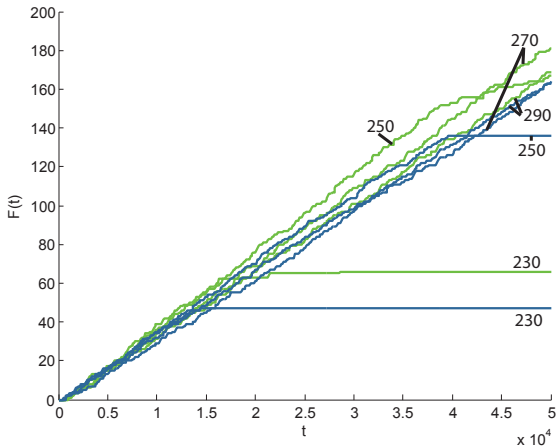




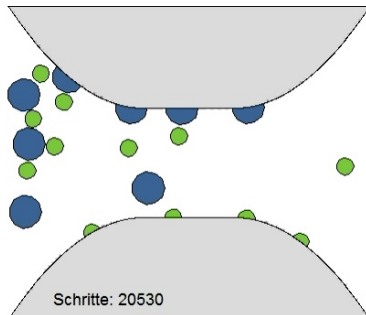


Erst ab $\frac{1 \text{ Ion}}{290 \text{ Schritte}}$ verschwindet die Aufspaltung der Flüsse.





- Bedingt durch den schwachen Potentialanstieg auf der linken Seite sammeln sich dort Ionen und verhindern das neue Kationen eintreten können.



- Im Gegensatz zum linearen Potential entsteht die Blockade meist im linken Bereich des Kanals.
- Auch im Falle eines quadratischen Potentials ist der Fluss im Wesentlichen linear, sofern keine vollständige Blockierung vorliegt.
- Der Eingangsfluss ab der keine vollständige Blockade des Kanals mehr auftrat liegt im gleichen Bereich wie beim linearen Potential. ($\frac{1 \text{ Ion}}{170 \text{ Schritte}}$)

Gliederung

1 Errinerung

2 Erweiterungen

3 Ergebnisse

Lineares Potential

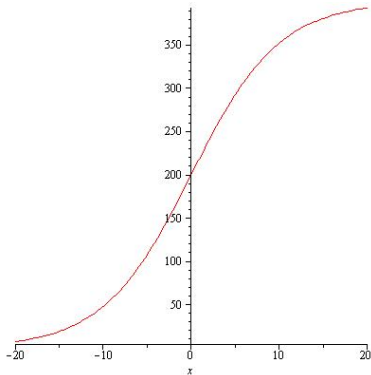
Quadratisches Potential

Tangens Hyperbolicus Potential

- Wir untersuchen nun das Flussverhalten mit einem Tangens Hyperbolicus Potential.

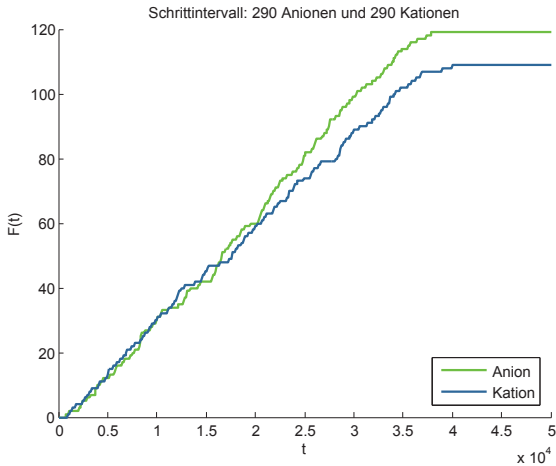
$$V_q(x) = c_3 \cdot \tanh\left(\frac{x}{10}\right)$$

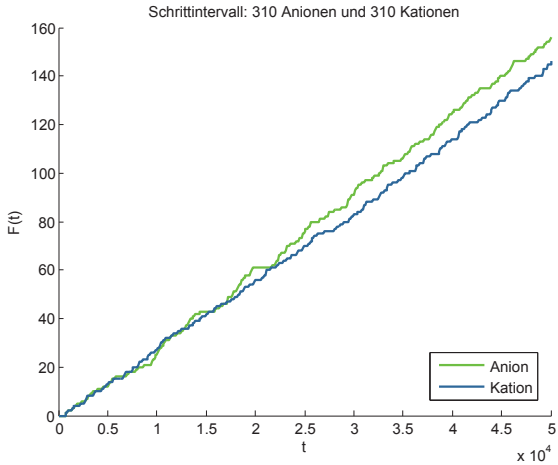
mit $c_3 = 200$.

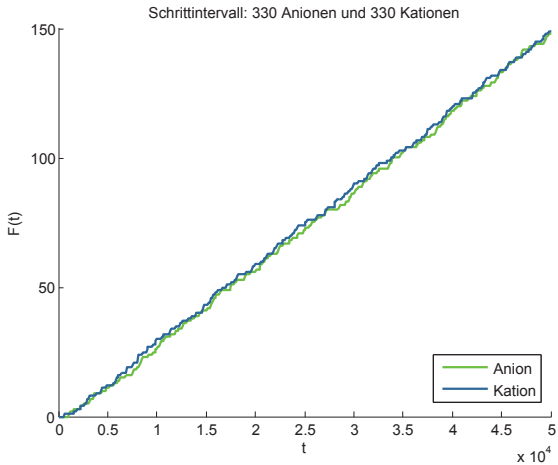


Da auch in den Randbereichen das Potential nur schwach ansteigt, ist ein ähnliches Verhalten zu erwarten wie beim quadratischen Potential.

Es tritt erneut eine Aufspaltung der Flüsse auf.







Lineares Potential

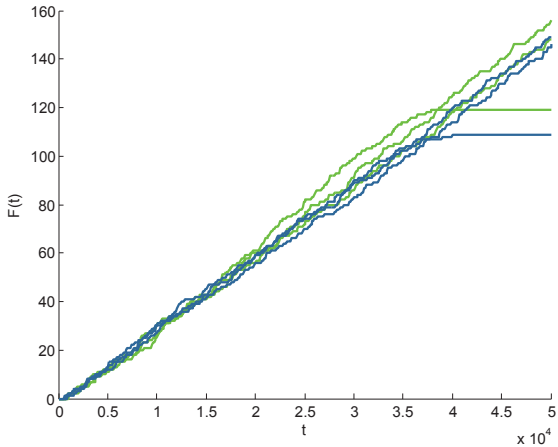
Quadratisches

Potential

Tangens

Hyperbolicus

Potential



- Der Eingangsfluss ($\frac{1 \text{ Ion}}{310 \text{ Schritte}}$) muss niedriger sein, als beim quadratischen und linearem Potential ($\frac{1 \text{ Ion}}{170 \text{ Schritte}}$) damit keine vollständige Blockade auftritt.
- Vollständige Blockaden treten meist im linken oder rechten Randbereich des Kanals auf.
- Auch im Falle eines Tangens Hyperbolicus Potentials ist der Fluss im Wesentlichen linear, sofern keine vollständige Blockierung vorliegt.

- Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich durch die Wahl eines Potentials der prinzipielle Verlauf des Flusses nicht ändern lässt, d. h. der Fluss ist entweder linear oder blockiert.
- Beeinflussen lässt sich ab welchem Eingangsfluss eine vollständige Blockade auftritt und in welchem Kanalbereich diese üblicherweise entsteht.

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit und an Tanja für
die Betreuung!