

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

多種材料之彈性性質及生物物理的一些課題(1/3)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2112-M-032-010-

執行期間：94 年 08 月 01 日至 95 年 07 月 31 日

執行單位：淡江大學物理學系

計畫主持人：周子聰

計畫參與人員：蘇德喜，詹政諱，涂展春，王全盛，陳冠璋，楊元欣，何柏樺，
陳郁君，李佳娜

報告類型：精簡報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 5 月 17 日

國科會專題研究計畫成果報告撰寫格式

一、說明

國科會基於學術公開之立場，鼓勵一般專題研究計畫主持人發表其研究成果，但主持人對於研究成果之內容應負完全責任。計畫內容及研究成果如涉及專利或其他智慧財產權、違異現行醫藥衛生規範、影響公序良俗或政治社會安定等顧慮者，應事先通知國科會不宜將所繳交之成果報告蒐錄於學門成果報告彙編或公開查詢，以免造成無謂之困擾。另外，各學門在製作成果報告彙編時，將直接使用主持人提供的成果報告，因此主持人在繳交報告之前，應對內容詳細校對，以確定其正確性。

本格式說明僅為統一成果報告之格式，以供撰寫之參考，並非限制研究成果之呈現方式。精簡報告之篇幅（不含封面之頁數）以 4 至 10 頁為原則，完整報告之篇幅則不限制頁數。

成果報告繳交之期限及種類（精簡報告、完整報告或期中報告等），應依本會補助專題研究計畫作業要點及專題研究計畫經費核定清單之規定辦理。

二、內容格式：依序為封面、中英文摘要、目錄（精簡報告得省略）、報告內容、參考文獻、計畫成果自評、可供推廣之研發成果資料表、附錄。

(一)報告封面：請至本會網站(<http://www.nsc.gov.tw>)下載製作(格式如附件一)。

(二)中、英文摘要及關鍵詞(keywords)。

(三)報告內容：請包括前言、研究目的、文獻探討、研究方法、結果與討論（含結論與建議）…等。若該計畫已有論文發表者，可以 A4 紙影印，作為成果報告內容或附錄，並請註明發表刊物名稱、卷期及出版日期。若有與執行本計畫相關之著作、專利、技術報告、或學生畢業論文等，請在參考文獻內註明之，俾可供進一步查考。

(四)頁碼編寫：請對摘要及目錄部分用羅馬字 I、II、III……標在每頁下方中央；報告內容至附錄部分請以阿拉伯數字 1.2.3……順序標在每頁下方中央。

(五)附表及附圖可列在文中或參考文獻之後，各表、圖請說明內容。

(六)計畫成果自評部份，請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

(七)可供推廣之研發成果資料表：凡研究性質屬**應用研究及技術發展**之計畫，請依本會提供之表格（如附件二），每項研發成果填寫一份。

三、計畫中獲補助國外或大陸地區差旅費、出席國際學術會議差旅費或國際合作研究計畫差旅費者，須依規定撰寫心得報告（出席國際學術會議者須另附發表之論文），以附件方式併同成果報告繳交，並請於成果報告封面註記。

四、打字編印注意事項

1. 用紙 使用 A4 紙，即長 29.7 公分，寬 21 公分。

2. 格式 中文打字規格為每行繕打（行間不另留間距），英文打字規格為 Single Space。

3. 字體 報告之正文以中英文撰寫均可。在字體之使用方面，英文使用 Times New Roman Font，中文使用標楷體，字體大小請以 12 號為主。

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 ☐ 成果報告
☒ 期中進度報告

(計畫名稱)

多種材料之彈性性質及生物物理的一些課題(1/3)

計畫類別：☒ 個別型計畫 ☐ 整合型計畫

計畫編號： NSC 94-2112-M-032-010-(周子聰)

執行期間：94 年 08 月 01 日至 95 年 07 月 31 日

計畫主持人：周子聰

共同主持人：無

計畫參與人員：蘇德喜，詹政諱，涂展春，王全盛，陳冠璋，楊元欣，何柏樺，陳郁君，李佳娜

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)：☒ 精簡報告 ☐ 完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

☐ 赴國外出差或研習心得報告一份

☐ 赴大陸地區出差或研習心得報告一份

☒ 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份(6 月底將出席國際學術會議並繳交該報告)

☐ 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

☐ 涉及專利或其他智慧財產權，☐ 一年☐ 二年後可公開查詢

執行單位：淡江大學物理系

一、中英文摘要及關鍵詞(keywords)

關鍵詞：彈性性質，螺旋的構型與穩定性，硬度滲透，非定型態半導體。

中文摘要：

我們推導出了細長彈性桿在外力和外力矩作用下的一組用尤拉角表示的形狀方程，並求得了在力學實驗中形成螺旋桿所需要的特殊邊界條件。我們證明了由於其特殊邊界條件，除了在一些特殊情況下，細長彈性桿沒有近螺旋解。我們詳細研究了螺旋桿在不同條件下的彈性行為。我們的解析結果證明了當用外力矩為獨立變量時，螺旋桿的伸長可能出現不連續的躍變。但當用超螺旋度為獨立變量時，螺旋桿的伸長沒有不連續的躍變。我們的結果成功地解釋了化學成分確定的脂質液體(chemically defined lipid concentrate, CDLC)中受拉伸的螺旋形膽固醇的實驗結果，並預期受扭曲的螺旋形膽固醇的伸長將出現不連續的躍變。我們還推導出了兩端閉合的細長彈性桿用尤拉角表示的形狀方程，並發現一般而言需要外力來維持其圓形解。我們進一步探討了在沒有外力時近圓形解的可能並將與實驗進行比較。

Jarzynski 等式(Jarzynski equality, JE)能利用從一個平衡態到另一個平衡態的過程中外力所做的功來計算這兩個平衡態間的自由能之差，在平衡態與非平衡態間架設了一條橋樑。但我們發現某些特殊系統可能不滿足 Jarzynski 等式的條件，因此 Jarzynski 等式有可能需要拓廣。我們的計算機模擬證實了我們的推測。我們亦提出了一個可能用於證實我們的推測的實驗。

非定型態半導體材料如 $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$ 等在近年來吸引了理論和實驗物理學家的關注。然而許多基本問題如其玻璃態的軟模相變的性質，其相關之彈性係數的計算仍然未得到解決。我們正在用分子動力學計算機模擬的方法研究 $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$ 玻璃態的軟模相變，並用我們最近才推導出的“平衡漲落法”公式計算其彈性係數。

Keywords : elasticity, conformation and stability of a helix, rigidity percolation, amorphous semiconductors.

Abstract :

The study of a filament has increasing importance due to it may even account for elasticity of some microscopic objects, from carbon nanotubes to biomaterials. We derive the shape equations in terms of Euler angles for a uniform elastic rod. We find that due to the special requirements on the boundary conditions, a static slightly distorted helix cannot exist in this model except for some special cases. We study the elasticity and stability of a helical filament under different conditions. We show analytically that the extension of a helix may undergo a one-step sharp transition when using torque as independent variable. This agrees quantitatively with experimental observations for a stretched helix in a chemically defined lipid concentrate(CDLC). We predict that the extension of a twisted helix in CDLC may also undergo a one-step sharp transition. We show that there is no sharp transition for the extension of a helix when using supercoiling degree as an independent variable. We find that a negative twist tends to destabilize a helix. We derive the shape equations in terms of Euler angles for a closed uniform filament. We find that to form a circular shape for a filament with nonvanishing spontaneous twisting and anisotropic bending rigidity, it in general requires an external force. We study the possibility to form a nearly circular shape for a filament free of external force.

Jarzynski equality (JE) can be used to extract the free energy difference between two equilibrium states from the non-equilibrium work performed on the system in the process between these two states. We point out that the crucial condition in the derivation of the JE from the fluctuation theorem is that the time integral of the phase space contraction factor is exactly expressed as the entropy production resulting from the heat absorbed from the thermal bath by the thermal system. We suggest that for the system violating this condition, a more general form of JE may exist. This conjecture is supported by our computer simulation on a simple system. We expect that with the aid of the nanotechnology, one can justify our conjecture in experiment.

Up to now, a clear picture of rigidity percolation in a system with non-central force is not yet available. This issue is also related to the phenomena of the floppy to rigidity transition in amorphous semiconductors. A vanishing shear modulus is the most important character of such a transition. However, a direct calculation of elastic constants for amorphous semiconductors is not yet available. We are using the equilibrium fluctuation formulae we derived in last plan to calculate directly the elastic constants of the amorphous semiconductors, such as $\text{Ge}_x\text{Se}_{1-x}$, and compare our results with experiments.

二、研究目的、研究方法

目的: To have a comprehensive understanding of the elastic properties of various materials, from amorphous semiconductors, carbon nanotubes to biomaterials such as DNA. To obtain a full picture for the floppy to rigidity transition.

方法: Analytical approaches, computer simulations.

三、主要結果與討論:

1. We derive the shape equations in terms of Euler angles for a closed uniform filament. We find that to form a circular shape for a filament with nonvanishing spontaneous twisting and anisotropic bending rigidity, it in general requires an external force. We study the possibility to form a nearly circular shape for a filament free of external force and will compare our findings with the experimental observations.
2. Jarzynski equality (JE) can be used to extract the free energy difference between two equilibrium states from the non-equilibrium work performed on the system in the process between these two states. The crucial condition in the derivation of the Jarzynski equality (JE) from the fluctuation theorem is that the time integral of the phase space contraction factor is exactly expressed as the entropy production resulting from the heat absorbed from the thermal bath by the thermal system. For the system violating this condition, a more general form of JE may exist. Our computer simulation on a simple system supports this conjecture. We expect that with the aid of the nanotechnology, one can justify our conjecture in experiment.
3. We derive the shape equations in terms of Euler angles for a uniform elastic rod with isotropic bending rigidity and spontaneous curvatures, and under uniaxial force. We find that to form a helix, the Euler angle ψ must be a constant determined by the spontaneous curvatures. We

find that due to the special requirements on the boundary conditions, a static slightly distorted helix cannot exist in this model except for some special cases. We study the elasticity and stability of a helical filament under different conditions. We show analytically that the extension of a helix may undergo a one-step sharp transition when using torque as independent variable. This agrees quantitatively with experimental observations for a stretched helix in a chemically defined lipid concentrate. We predict further that the extension of a twisted helix in CDLC may also undergo a one-step sharp transition. But we find that there is no sharp transition for the extension of a helix when using supercoiling degree as an independent variable. We also find that a negative twist tends to destabilize a helix.

4. A novel technique, gold nanoparticle-assisted single-drop microextraction (SDME) combined with atmospheric pressure matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry (AP-MALDI-MS) for the identification of peptides has been described. The SDME of peptides from aqueous solution was achieved using gold nanoparticles prepared in toluene as the acceptor phase. A simple phenomenon of isoelectric point (pI) of the peptides has been utilized successfully to extract the peptides into a single drop of nanogold in toluene. After extraction, a singledrop nano gold solution was directly spotted onto the target plate with an equal volume of matrix, α -cyanohydroxy cinnamic acid (α -CHCA) and analyzed in AP-MALDI-MS. The parameters, such as solvent selection, extraction time, agitation rate, and pH effect, were optimized for the SDME technique. Using this technique, in aqueous solution, the lowest concentration detected for Met- and Leu-enkephalin peptides was 0.2 and 0.17 μ M, respectively. In addition, the application of this technique to obtain the signal for the selected peptides in a mass spectrum in the presence of matrix interferences such as 1% Triton X-100 and 6.5 M urea has been showed. The application was extended to identify the peptides spiked into urine.

四、計畫成果自評

原計畫在三年左右的時間在國際期刊上發表至少 7 篇研究論文。自從 94 年 8 月 1 日本計畫啟動以來，我們已經在 SCI 期刊上發表了 1 篇論文，另有 2 篇相關研究論文已向 SCI 期刊投稿，還有 2-3 篇論文已基本完成，正處於寫作修改階段。從這個角度而言，進展尚稱順利。

原計畫要用三年左右的時間研究：1. 細長桿的彈性性質；2. 計算非定型態半導體材料的彈性系數，由此得出非中心力系統在臨界滲透區的軟模相變現象的基本圖像；3. 研究 DNA 微環構型及其穩定性以及 DNA 局域變性的序列相關性，以及蛋白質摺疊的動力學過程。

上述第一項內容進展順利，已有一篇長文投到 SCI 期刊，另有兩篇相關論文的主要工作已基本完成，正處於撰寫階段。

上述第二項內容所需要的計算機模擬程式已經基本完成，正進入調試階段。

上述第三項內容中的 DNA 微環構型及其穩定性與第一項內容實際上是相關的，因此進展亦算順利。但其餘內容則因為因缺乏足夠的時間與人力而謹處於資料收集與分析階段，尚待進一步深入研究。

另外有兩篇研究論文不在原計畫目標內。其中有一篇指出非平衡統計力學中的 Jarzynski 等式有可能需要拓廣。第二篇描述了一種利用奈米金粒子幫助，並整合質譜儀及毛細管電泳儀的一滴溶劑微萃取法的新技術。這兩篇論文主要是涂展春與蘇德喜兩位博士後研究員的貢獻，及與本校化學系老師的合作成果。兩位博士後的到來對本人有相當大的幫助。

總而言之，本計畫的方向及其進展基本上符合預期。

五、參考文獻：主持人於 94 年 8 月 1 日至 95 年 5 月 31 日期間著述：

I. 期刊論文：

1. Putty-Reddy Sudhir, Hui-Fen Wu, and **Zi-Cong Zhou**, “Identification of Peptides Using Gold Nanoparticle-Assisted Single-Drop Microextraction Coupled with AP-MALDI Mass Spectrometry”, *Anal. Chem.* **77**, 7380-7385(2005)

II. 國際研討會論文：

1. **Zicong Zhou**, “Effect of tension on the rigidity percolation”, 2005 Taiwan Summer Symposium on Statistical and Nonlinear Physics (StatPhys-Taiwan-2005), 1-6 August, 2005, 中研院物理所, 中原大學物理系

III. 國內研討會論文：

1. Zhanchun Tu and **Zicong Zhou**(周子聰), “Theory of Chiral Lipid Bilayers”, NCTS Workshop on Complex Fluids, May 5-7, 2006, National Central University
2. Zhanchun Tu and **Zicong Zhou** (周子聰), “A possible generalized form of Jarzynski equality”, Soft Matter and Biophysics Winter School, January 21-22, 2006, National Center for Theoretical Sciences, National Cheng Kung University
3. Zhanchun Tu and **Zicong Zhou** (周子聰), “Elasticity and stability of cell membranes with membrane skeleton”, 「2006 中華民國物理學會年會暨研究成果發表會」, 2006 年 1 月 16 日至 1 月 18 日, 台灣大學物理系
4. **Zicong Zhou** (周子聰), “Elasticity and stability of a helical filament”, 「2006 中華民國物理學會年會暨研究成果發表會」, 2006 年 1 月 16 日至 1 月 18 日, 台灣大學物理系(邀請報告)
5. C.S. Wang (王全盛), F.T. Lin (林方庭), **Zicong Zhou** (周子聰), 「在靜壓力與零溫條件下二維中心力系統的彈性性質與穩定性」, 「2006 中華民國物理學會年會暨研究成果發表會」, 2006 年 1 月 16 日至 1 月 18 日, 台灣大學物理系

IV. 已向有審查制度的SCI期刊投稿的論文：

1. Z. C. Tu, and **Zicong Zhou**, “A possible generalized form of Jarzynski equality”, *submitted to J. Chem. Phys.*
2. **Zicong Zhou** Béla Joós, and Pik-Yin Lai, “Elasticity and stability of a helical filament with isotropic bending rigidity”, *submitted to Phys. Rev. E*

V. 學生畢業論文：

碩士班學生詹政諱, 「具等向性彎曲剛度但無自發扭曲之長細螺旋杆的彈性性質」(Elasticity of a helical filament with isotropic bending rigidity and free of spontaneous torsion)。2006 年 1 月畢業