

УДК 532.5

## ФИЛЬТРАЦИЯ ВОДЫ ЧЕРЕЗ КЛЕТОЧНУЮ МЕМБРАНУ В ОРГАНИЗМЕ ЧЕЛОВЕКА

В. Линь<sup>\*,\*\*</sup>, Ю. Чзан<sup>\*\*</sup>

\* Технологический институт г. Уси, Уси, Китай

\*\* Университет Чанчжоу, Чанчжоу, Китай

E-mails: 327294703@qq.com, engmech1@sina.com

Проведено моделирование процесса просачивания воды через клеточную мембрану в организме человека. В клеточной мембране толщиной  $7 \div 8$  нм плотно распределены нанопоры радиусом  $0,2 \div 0,5$  нм. Вычислены значение перепада давления и критическое значение потери мощности в отдельной нанопоре, при которых происходит проскальзывание на стенке канала. Установлено, что скорость скольжения существенно увеличивается с уменьшением радиуса поры и возрастает по линейному закону с увеличением потери мощности в поре. Показано, что в отсутствие проскальзывания на стенке канала массовая скорость потока воды через поры значительно меньше вычисленной по классической гидродинамической теории, но на 3–5 порядков больше вычисленной по классической гидродинамической теории движения потока при наличии проскальзывания на стенке. Скорость потока существенно зависит от потери мощности в поре.

Ключевые слова: клеточная мембрана, перенос, вода, проскальзывание.

DOI: 10.15372/PMTF20220606

**Введение.** В последнее время достигнут большой прогресс в моделировании потоков жидкости в организме человека, в том числе в крупных артериях, артериолах и капиллярах [1–3]. Тело человека в основном состоит из воды, главным потоком в нем является поток воды, который переносит метаболиты (углекислый газ) и питательные вещества (кислород, белок, сахар, жир, ионы и пр.). В работе [4] без введения каких-либо предположений о форме пор и о взаимодействиях молекул воды между собой или со стенками пор установлена связь между макроскопической константой проницаемости клеточной мембраны и структурой поры. Однако с использованием теории молекулярной динамики было показано, что поток воды в узкой нанопоре является, по сути, микроскопическим потоком и зависит от взаимодействия молекул воды между собой и со стенкой поры [5–7]. Установлено, что скорость потока воды через углеродные нанотрубки, диаметр которых не превышает 7 нм, существенно больше скорости, вычисленной с помощью классической гидродинамической теории [5–7]. В работе [8] изучены характеристики потока воды через мембрану дендритных клеток мыши с использованием микрожидкостной перфузионной системы и с учетом изменения объема клетки при различных внеклеточных условиях. В [9] с использованием полидиметилсилоксанового микрожидкостного устройства с гидродинамическим переключением изучены характеристики потока воды в клеточных мембранах путем изменения внеклеточного раствора с контролируемой скоростью.

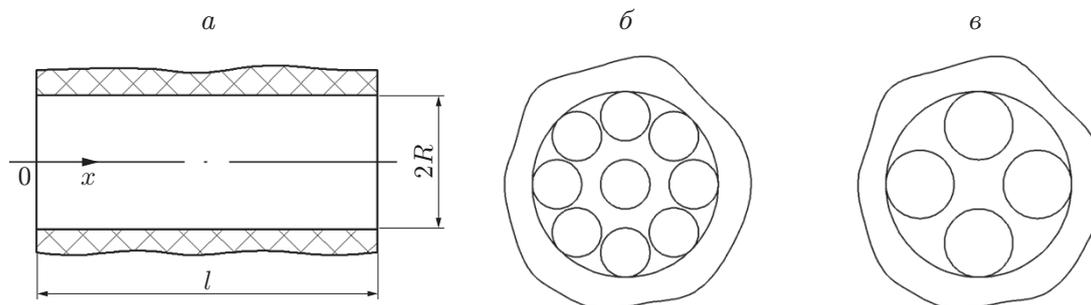


Рис. 1. Нанопоры клеточной мембраны в организме человека:  
 $a$  —  $R = 0,2 \div 0,5$  нм,  $l = 7 \div 8$  нм,  $b$  —  $R = 0,5$  нм,  $c$  —  $R = 0,3$  нм

Моделирование потока воды в нанопорах, таких как стенка кровеносных капилляров, является сложной задачей вследствие больших значений радиуса пор и их длины в осевом направлении. Такие потоки воды могут быть разномасштабными, в них присутствуют как течение адсорбированного слоя на стенке поры, так и промежуточный непрерывный поток воды [10]. Моделирование таких потоков воды с использованием теории молекулярной динамики затруднительно. В работе [10] с использованием многомасштабных уравнений течения исследована проницаемость воды через стенку кровеносного капилляра человека. Течение воды в узких нанопорах, таких как клеточная мембрана, можно моделировать с помощью теории молекулярной динамики вследствие их небольшого размера. В работе [11] с использованием уравнений наномасштабного потока аналитически исследован поток воды в коннексонах организма человека.

В клеточной мембране организма человека имеются плотно распределенные нанопоры, играющие важную роль в транспортировке воды. Как правило, толщина клеточной мембраны составляет  $7 \div 8$  нм, а значения радиуса нанопор находятся в диапазоне  $0,2 \div 0,5$  нм, что позволяет проходить через поры одновременно нескольким молекулам воды. Поток воды в таких нанопорах можно моделировать с использованием уравнений молекулярной динамики.

В данной работе с помощью уравнений наномасштабного потока вычисляется скорость потока воды через нанопоры с учетом проскальзывания водяной пленки.

**1. Нанопоры клеточной мембраны.** На рис. 1 показаны нанопоры клеточной мембраны в организме человека, наполненные водой. Радиус  $R$  нанопоры настолько мал, что в ней может содержаться только 1–3 молекулы воды. Пора является “глубокой” (отношение ее длины в осевом направлении к радиусу  $l/R > 7$ ). Поэтому согласно классическим законам гидродинамики в поре должно быть большое гидравлическое сопротивление, и, следовательно, для обеспечения потока воды через пору необходим большой перепад давления, при этом в поре происходит потеря мощности. Однако в реальности расход воды при прохождении через пору значителен.

Поток воды через пору не может быть сплошным. Кроме того, эффективная (сдвиговая) вязкость должна быть больше объемной вязкости. В результате при прохождении потока через пору происходит уменьшение расхода воды [12]. На поток воды через нанопору существенное влияние оказывает проскальзывание воды на стенке [5–7, 12].

**2. Основные уравнения.** В данной работе при моделировании потока воды через нанопоры используются уравнения наномасштабного потока [13]. Поток полагается изотермическим, влиянием давления на вязкость и плотность воды пренебрегается. С учетом проскальзывания выражение для расхода воды при прохождении через нанопору записы-

вается в виде [13]

$$q_m = \pi \rho_{bf}^{eff}(\bar{R}) u_s R^2 + \frac{\pi \rho_{bf}^{eff}(\bar{R}) S(\bar{R}) R^4}{4 \eta_{bf}^{eff}(\bar{R})} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (1)$$

где  $p$  — давление;  $x$  — координата в направлении потока;  $u_s$  — скорость проскальзывания на стенке;  $\rho_{bf}^{eff}$  — осредненная по радиусу поры плотность воды;  $\eta_{bf}^{eff}$  — эффективная (сдвиговая) вязкость воды в поре;  $S$  — параметр, учитывающий несплошность (разрывность) потока;  $\bar{R} = R/R_{cr,bf}$ ;  $R_{cr,bf} = 2,8$  нм — критический радиус.

Выражение для перепада давления в поре вследствие проскальзывания на стенке записывается следующим образом [11]:

$$P_d = \frac{\tau_s l}{\theta_\tau(R) R}.$$

Здесь  $\tau_s$  — прочность на сдвиг на границе раздела вода — пора;  $\theta_\tau(R)$  — корректирующий коэффициент для напряжений сдвига на стенке, учитывающий разрывность потока.

Выражение для критической потери мощности в поре вследствие проскальзывания на стенке записывается в виде [11]

$$W_{dcr} = - \left( \frac{\tau_s}{\theta_\tau(R)} \right)^2 \frac{\pi S(\bar{R}) R^2 l}{4 \eta_{bf}^{eff}(\bar{R})},$$

выражение для скорости проскальзывания на стенке — в виде [11]

$$u_s = \frac{\Delta W \theta_\tau(R)}{\pi \tau_s l R}, \quad (2)$$

где  $\Delta W = W_d - W_{dcr}$ ;  $W_d$  — потеря мощности в поре. Из уравнения (2) следует, что скорость проскальзывания линейно возрастает с увеличением потери мощности в поре. При наличии проскальзывания от потери мощности в поре существенно зависит расход воды.

Отношение массового расхода воды через пору, вычисленного по уравнению (1), к расходу, вычисленному с использованием классической гидродинамической теории течения, равно [11]

$$r_m = \frac{4 C_q(\bar{R}) \theta_\tau^2(R) \eta(\Delta W)}{\pi R^2 \tau_s^2 l} - \frac{C_q(\bar{R}) S(\bar{R})}{C_y(\bar{R})},$$

где  $C_y = \eta_{bf}^{eff} / \eta$ ;  $C_q = \rho_{bf}^{eff} / \rho$ ;  $\eta$ ,  $\rho$  — объемная вязкость и плотность воды соответственно.

**3. Значения параметров, использованные при вычислении.** При проведении расчетов использовались следующие значения параметров:  $\eta = 0,001$  ГПа·с,  $\tau_s = 10$  кПа, толщина мембраны — 7,5 нм. Вследствие относительно слабого взаимодействия воды со стенками пор в данной работе принято  $\theta_\tau(R) = 1,0$  [14]. Другие параметры приняты следующими [15, 16]:

$$\begin{aligned} C_y(\bar{R}) &= 0,9507 + \frac{0,0492}{\bar{R}} + \frac{1,6447 \cdot 10^{-4}}{\bar{R}^2}, & 0,1 < \bar{R} < 1,0, \\ C_q(\bar{R}) &= 1,116 - 0,328 \bar{R} + 0,253 \bar{R}^2 - 0,041 \bar{R}^3, & 0,1 < \bar{R} < 1,0, \\ S(\bar{R}) &= [-0,1 - 0,892(\bar{R} - 0,1)^{-0,084}]^{-1}, & 0,1 < \bar{R} < 1,0. \end{aligned}$$

**4. Результаты вычислений.** На рис. 2 приведена зависимость перепада давления  $P_d$  от радиуса поры  $R$ . Значение перепада давления на мембране в момент начала проскальзывания на стенке находится в диапазоне 150 ÷ 250 кПа при значении радиуса

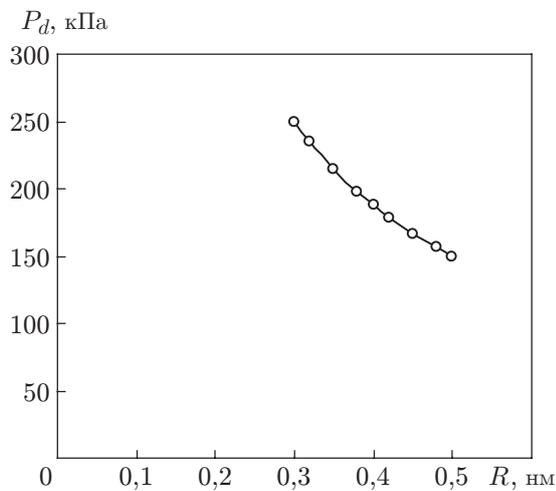


Рис. 2

Рис. 2. Зависимость перепада давления  $P_d$  от радиуса нанопоры  $R$

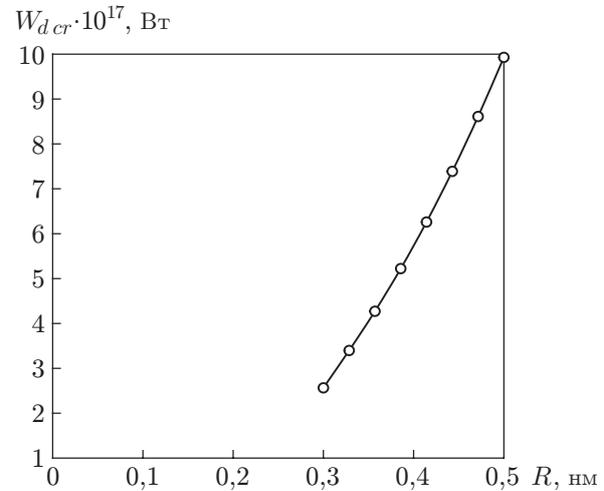


Рис. 3

Рис. 3. Зависимость критической потери мощности  $W_{dcr}$  от радиуса нанопоры  $R$

нанопоры  $R$  в диапазоне  $0,3 \div 0,5$  нм и быстро увеличивается с уменьшением радиуса. Это значение  $P_d$  в два раза меньше, чем в нанопоре внутриклеточного соединения [11]. В случае если разность давлений во внутриклеточной и внеклеточной жидкостях меньше значения  $P_d$ , проскальзывания на стенке не происходит и вода очень медленно течет через клеточную мембрану. В противном случае происходит проскальзывание на стенке, что приводит к увеличению скорости течения воды через клеточную мембрану [5–7].

На рис. 3 приведена зависимость от радиуса нанопоры  $R$  критической потери мощности  $W_{dcr}$  в отдельной нанопоре, при которой начинается проскальзывание на стенке. Значения  $W_{dcr}$  в отдельной нанопоре почти в два раза меньше, чем во внутриклеточном соединении [11].

Значение  $W_{dcr}$  для клеточной мембраны обычно находится в интервале  $2 \cdot 10^{-17} \div 10^{-16}$  Вт и быстро уменьшается с уменьшением  $R$ . Это означает, что проскальзывание на стенке происходит беспрепятственно, когда вода течет через клеточную мембрану с небольшими потерями энергии на нанопоре. Такая же закономерность наблюдается при течении воды через углеродные нанотрубки диаметром менее 2 нм [5].

На рис. 4 приведены зависимости скорости проскальзывания  $u_s$  от радиуса нанопоры при различных значениях потери мощности  $W_{dcr}$  в нанопоре. Видно, что при уменьшении  $R$  скорость  $u_s$  существенно увеличивается. Этот результат качественно согласуется с экспериментальными данными [5–7]. Из зависимостей, приведенных на рис. 4, следует, что при  $\Delta W = 10^{-14}$  Вт скорость проскальзывания приблизительно равна 0,1 м/с. В эксперименте, описанном в работе [6], измерена скорость проскальзывания воды на стенке углеродной нанотрубки диаметром 7,0 нм. Значение этой скорости находится в диапазоне  $0,10 \div 0,44$  м/с. Такие же значения скорости имеют место при течении воды в канале протеиновой клеточной мембраны. Согласно данным, приведенным на рис. 4, при изменении  $\Delta W$  в диапазоне  $10^{-14} \div 5 \cdot 10^{-14}$  Вт скорость скольжения изменяется в интервале  $0,1 \div 0,5$  м/с, что соответствует экспериментальным данным работы [6].

Согласно зависимостям, приведенным на рис. 4, скорость проскальзывания прямо пропорциональна потере мощности в нанопоре. В организме человека для значительного увеличения скорости потока воды через клеточную мембрану может потребоваться незначи-

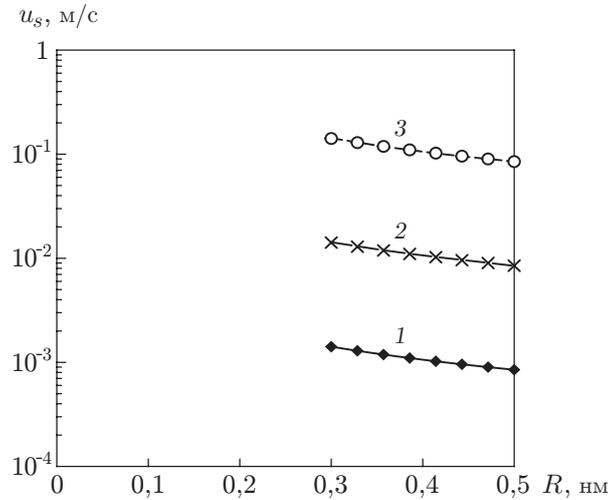


Рис. 4. Зависимость скорости проскальзывания от радиуса нанопоры:  
 1 —  $\Delta W = 10^{-16}$  Вт, 2 —  $\Delta W = 10^{-15}$  Вт, 3 —  $\Delta W = 10^{-14}$  Вт

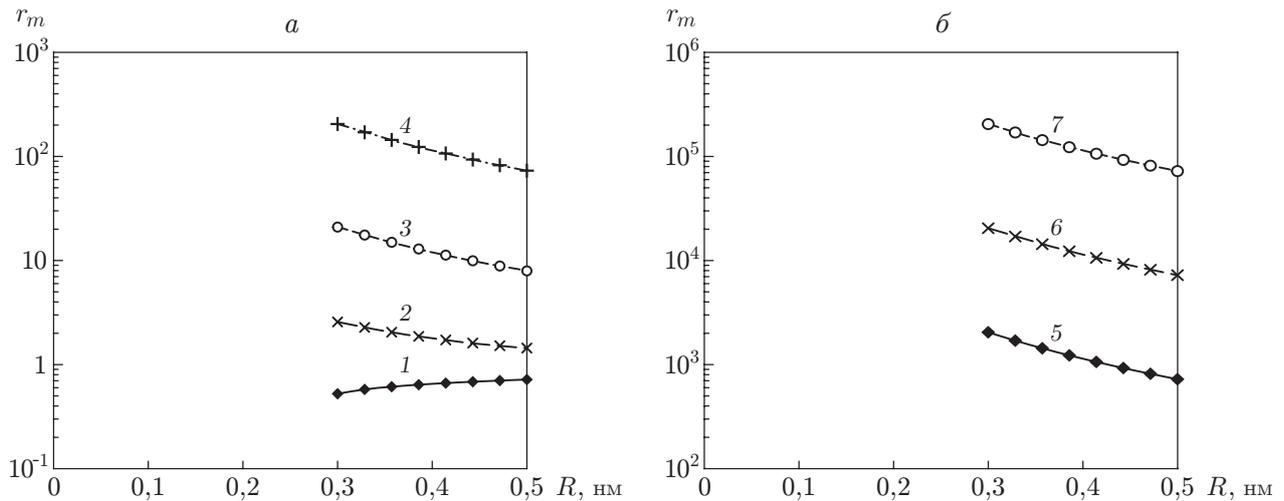


Рис. 5. Зависимость расхода  $r_m$  от радиуса нанотрубки  $R$ :  
 а —  $r_m = 10^{-1} \div 10^3$ , б —  $r_m = 10^2 \div 10^6$ ; 1 —  $\Delta W = 0$  (отсутствие проскальзывания),  
 2 —  $\Delta W = 10^{-16}$  Вт, 3 —  $\Delta W = 10^{-15}$  Вт, 4 —  $\Delta W = 10^{-14}$  Вт, 5 —  $\Delta W = 10^{-13}$  Вт,  
 6 —  $\Delta W = 10^{-12}$  Вт, 7 —  $\Delta W = 10^{-11}$  Вт

тельное увеличение потери мощности на клеточной мембране, которого достаточно для нормального функционирования клетки.

На рис. 5 приведены зависимости расхода  $r_m$  от радиуса нанопоры. В отсутствие проскальзывания на стенке значение  $r_m$  существенно меньше единицы и быстро уменьшается с уменьшением  $R$ . Это означает, что в отсутствие проскальзывания скорость потока жидкости через клеточную мембрану существенно меньше скорости, вычисленной с использованием классической теории гидродинамики, причем скорость потока жидкости уменьшается с уменьшением размера поры. В отсутствие проскальзывания, когда внутриклеточная и внеклеточная среды различаются незначительно, скорость потока очень мала. Однако из зависимостей, приведенных на рис. 5, следует, что при наличии проскальзывания значение расхода  $r_m$  существенно больше единицы (при  $\Delta W = 10^{-11}$  Вт

$r_m = 10^5$ ). В работе [5] приведены экспериментальные значения скорости потока жидкости через углеродные нанотрубки диаметром  $1,0 \div 2,0$  нм. Эти значения оказались на три порядка меньше вычисленных с использованием классической гидродинамической теории. Экспериментальные значения скорости потока жидкости, приведенные в [5], согласуются с данными, представленными на рис. 5,б. В работе [6] сделано предположение, что углеродная нанотрубка может имитировать канал мембраны клетки биологического белка. Измеренная в экспериментах [6] скорость потока жидкости через углеродную нанотрубку диаметром 7,0 нм оказалась на 4–5 порядков больше скорости, вычисленной с помощью классической гидродинамической теории. Авторы [6] объяснили такое различие наличием беспрепятственного проскальзывания на стенке трубки. Экспериментальные значения, полученные в [6], согласуются с данными, приведенными на рис. 5,б.

Согласно данным, представленным на рис. 5, при наличии проскальзывания на стенке и заданной потере мощности в поре расход  $r_m$  значительно увеличивается с уменьшением радиуса поры  $R$ , что свидетельствует о существенном влиянии проскальзывания. При фиксированном радиусе поры увеличение потери мощности в поре оказывает более существенное влияние на скорость потока, чем в случае использования классической гидродинамической теории.

**Заключение.** С использованием уравнений наномасштабного потока и с учетом наличия проскальзывания на стенке проведено моделирование процесса просачивания воды через мембрану клетки в организме человека. Перепад давления на клеточной мембране в начале процесса проскальзывания на стенке находится в диапазоне  $150 \div 250$  кПа и существенно увеличивается с уменьшением радиуса нанопоры в мембране. Значение критической потери мощности в отдельной нанопоре в мембране в начале процесса проскальзывания на стенке находится в диапазоне  $2 \cdot 10^{-17} \div 10^{-16}$  Вт и быстро уменьшается с уменьшением радиуса нанопоры.

Установлено, что при просачивании воды через клеточную мембрану проскальзывание на стенке происходит беспрепятственно только при очень малых потерях мощности в мембране; тем не менее проскальзывание на стенке оказывает наибольшее влияние на процесс просачивания воды через мембрану, при этом расход воды увеличивается на 3–5 порядков. В отсутствие проскальзывания на стенке вода течет через мембрану очень медленно, что свидетельствует о большом гидравлическом сопротивлении мембраны.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Taylor C. A., Hughes T. J. R., Zarins C. K. Finite element modeling of blood flow in arteries // *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* 1998. V. 158. P. 155–196.
2. Moore J. A., Rutt B. K., Karlik S. J., et al. Computational blood flow modeling based on in vivo measurements // *Annals Biomed. Engng.* 1999. V. 27. P. 627–640.
3. Perdikaris P., Grinberg L., Karniadakis G. E. Multiscale modeling and simulation of brain blood flow // *Phys. Fluids.* 2016. V. 28. 021304.
4. Levitt D. G. A new theory of transport for cell membrane pores. 1. General theory and application to red cell // *Biochim. Biophys. Acta: Biomembranes.* 1974. V. 373. P. 115–131.
5. Holt J. K., Park H. G., Wang Y., et al. Fast mass transport through sub-2-nanometer carbon nanotubes // *Science.* 2006. V. 312. P. 1034–1037.
6. Majumder M., Chopra N., Andrews R., Hinds B. J. Enhanced flow in carbon nanotubes // *Nature.* 2005. V. 438. 44.
7. Borg M. K., Reese J. M. Multiscale simulation of enhanced water flow in nanotubes // *MRS Bull.* 2017. V. 42. P. 294–299.

8. **Chen H. H., Shen H., Heimfeld S., et al.** A microfluidic study of mouse dendritic cell membrane transport properties of water and cryoprotectants // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2008. V. 51. P. 5687–5694.
9. **Lyu S. R., Chen W. J., Hsieh W. H.** Measuring transport properties of cell membranes by a PDMS microfluidic device with controllability over changing rate of extracellular solution // Sens. Actuat. B: Chem. 2014. V. 197. P. 28–34.
10. **Wang M., Zhang Y. B.** Water permeability through the wall of blood capillary // Frontiers Heat Mass Transfer. 2022. V. 18, N 7.
11. **Wang M., Zhang Y. B.** Water transport in cellular connexon of human bodies // Frontiers Heat Mass Transfer. 2021. V. 17, N 9.
12. **Zhang Y. B.** The flow factor approach model for the fluid flow in a nano channel // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2015. V. 89. P. 733–742.
13. **Zhang Y. B.** Transport in nanotube tree // Intern. J. Heat Mass Transfer. 2017. V. 114. P. 536–540.
14. **Zhang Y. B.** Flow factor of non-continuum fluids in one-dimensional contact // Industr. Lubricat. Tribology. 2006. V. 58. P. 151–169.
15. **Zhang Y. B.** Modeling of molecularly thin film elasto-hydrodynamic lubrication // J. Balkan Tribolog. Assoc. 2004. V. 10. P. 394–421.
16. **Zhang Y. B.** Lubrication analysis for a line contact covering from boundary lubrication to hydrodynamic lubrication. 1. Micro contact results // J. Comput. Theor. Nanosci. 2014. V. 11. P. 62–70.

*Поступила в редакцию 14/IX 2021 г.,  
после доработки — 25/II 2022 г.  
Принята к публикации 27/VI 2022 г.*

---