

# Kapitel 8

## Zusammenfassung

Die physikalische Beschreibung fluider Lipidmembranen geschieht üblicherweise mittels eines Energiedichteausdrucks, der ihre Deformationsmöglichkeiten berücksichtigt. Dabei spielt im Rahmen dieser Arbeit Krümmungsdeformation die zentrale Rolle. Während für viele experimentellen Beobachtungen die Beschreibung bis zur Hooke'schen Näherung ausreicht, gehen wir über einen solchen Ansatz hinaus und ziehen Terme höherer Entwicklungsordnung in den Krümmungen in Betracht. Die Berücksichtigung von Termen höherer Entwicklungsordnung erfordert das Abschätzen ihrer Moduln. Dies wird in Kapitel 2 dargelegt. Das zentrale Resultat der Rechnungen in diesem Kapitel ist ein negativer Modul vor dem Quadrat der Gauss'schen Krümmung. Seine Wirkung lässt ebene Membranflächen erwarten, die sich durch eine hohe Anzahl von Sattelpunkten auszeichnen. Die Form der Fläche, die durch das Ausbilden möglichst vieler Sättel charakterisiert ist, nennen wir Überstruktur.

In Kapitel 2 führen wir eine Energiedichtefunktion für Krümmungen ein. Diese verwenden wir zur Durchführung von Monte-Carlo-Simulationen, wobei wir den Metropolis-Algorithmus verwenden. Die Technik der Monte-Carlo-Simulationen ist eine häufig verwendete und wohletablierte Vorgehensweise. Wir beschreiben sie kompakt in Kapitel 3, wobei wir sowohl allgemeine, vor allem aber speziell auf unsere Problemstellung zugeschnittene Aspekte einführen. Unsere Simulationen führen wir auf einem Rechteckgitter mit festen Stützstellen in der projizierten Ebene durch, indem wir die Membranfläche mittels Monge-Darstellung beschreiben. Einen Überblick zu der konkreten numerischen Realisierung geben wir in Anhang A.

Testsimulationen mit Hilfe des Energiedichteausdrucks erster Entwicklungsordnung führen zu einem stetigen, unbegrenzten Ansteigen der realen Membranfläche. Optisch lässt sich das Ansteigen der Simulationsfläche als Kippung der Membranebene bezüglich ihrer projizierten Basisfläche beschreiben. Die Kippung kommt dadurch zustande, dass wir auf einem festen Stützstellengitter simulieren. Sie führt zu einer Abnahme der Biegesteifigkeit der Membran, woraus wir eine Verteilungszunahme der Undulationsamplituden auf der gekippten Fläche errechnen. Aus dem Unterschied zwischen dem mittleren Amplitudenquadrat einer Undulationsmode auf der flachen und auf der gekippten Membran lässt sich eine Entropiedifferenz der Kippung herleiten. Die Entropiezunahme aufgrund von Membrankippung kompensieren wir durch die berechnete Entropiedifferenz im Ausdruck für die freie Biegeenergie. Der Erfolg rechtfertigt unsere Mühen: Die Membran kippt in der Folge nicht mehr während der Simulation. Die Überlegungen und Rechnungen, die zum Korrekturterm der Kippung führen, stellen eine neue Erkenntnis dieser Arbeit dar. Sie werden in Kapitel 4 dargelegt.

Kapitel 5 ist der Einheitszelle der Überstruktur gewidmet. Dabei besteht ein neues Re-

sultat darin, dass wir zum ersten Mal Überstruktur von der flachen Membran ausgehend erzeugen können. Diese Tatsache ist dem Wirken des Korrekturterms zuzuschreiben. Die Einheitszelle der Sattelstruktur suchen wir in diesem Kapitel, indem wir die Energiedichte in Abhängigkeit der Kantenlänge bestimmen. Danach gehen wir näher auf das charakteristische Aussehen der Überstruktur ein. Nach der Analyse ihrer Form variieren wir die Stützstellendichte der die Einheitszelle beschreibenden Simulationsfläche. Dieses Kapitel ergänzen wir durch Bemerkungen zu den neben reiner Sattelstruktur in der Simulation zusätzlich auftretenden Flächenformen.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der Untersuchung des Phasenverhaltens der Überstruktur. Dies wird hauptsächlich in Kapitel 6 durchgeführt. Tragen wir die Energiedichte und die spezifische Wärme der Sattelstruktur in Abhängigkeit der Temperatur je in einem Diagramm auf, so erkennen wir drei Phasenbereiche, die durch zwei Phasenübergänge getrennt sind. Den Bereich der ersten Phase charakterisieren wir durch das spontane Auftreten der geordneten Überstruktur, die sich durch ihre tetragonale Ordnung auszeichnet. Die Bedeutung des zweiten Phasenbereichs bleibt vorerst unklar, wir vermuten jedoch, dass sich dort die als weiche Atome interpretierten Hoch- und Tiefpunkte der Sattelstruktur ohne gegenseitige Abstossung durchdringen können. Im Bereich der dritten Phase sind die Undulationsbewegungen der Membran derart heftig, dass sie zu einem Zerstoren der Überstruktur führen. Dabei beobachten wir die Bildung von Hütchen und Superhütchen. Die Übergänge zwischen den einzelnen Phasenbereichen identifizieren wir als Übergänge erster Ordnung.

Die Interpretation der Hoch- und Tiefpunkte der Überstruktur als weiche Atome eröffnet eine interessante Einordnungsmöglichkeit unseres Systems. Mit unserer Sichtweise erhalten wir das Modell eines zweidimensionalen Kristalls mit tetragonaler Kristallstruktur. An diesem Modell untersuchen wir - ebenfalls in Kapitel 6 - das Entstehen und das Ausheilen von Defekten, wobei wir beobachten, dass wir es mit weichen Atomen zu tun haben, die sich fließend und nicht sprunghaft bewegen.

Im abschliessenden 7. Kapitel untersuchen wir die Anbindung der Überstruktur an das Gitter der Simulation. Dabei stellen wir sowohl eine Punkt- als auch eine Achsenanbindung fest. Wir können zeigen, dass die Gitterpunktanbindung beim ersten Phasenübergang verschwindet. Dies werten wir als Bestätigung unserer Interpretation der Hoch- und Tiefpunkte als weiche Atome, die sich im mittleren Phasenbereich gegenseitig durchdringen können. Zur Aufhebung der Gitterachsenanbindung schlagen wir die Simulation auf einem Stützstellengitter vor, das während der Simulation gedreht wird. Zum Test simulieren wir auf der Kreisfläche. Erste Simulationen führen in einem Bereich mittlerer Temperaturen zu Bildern mit ungeordneter Überstruktur. Diese Bilder lassen sich gut mit den experimentellen Elektronenmikroskopieaufnahmen vergleichen. Bei den ersten Simulationen auf dem rotierenden Stützstellengitter scheint das im 6. Kapitel beschriebene Phasenverhalten bestätigt zu werden. Darüberhinaus interpretieren wir aufgrund dieser Simulationsläufe den Bereich der zweiten Phase als Bereich der ungeordneten Überstruktur.

Somit würde das im Rahmen dieser Arbeit gefundene Phasenverhalten aus drei Bereichen bestehen. Bei tiefen Temperaturen nehmen wir die geordnete Überstruktur als stabil an. In einem kleinen, mittleren Temperaturbereich betrachten wir den geschmolzenen Eierkarton als stabilen Zustand während bei hohen Temperaturen jegliche Überstruktur durch die Heftigkeit der dort vorhandenen Undulationen zerstört wird. Die letzte Phase wird durch die Simulationen auf dem rotierenden Stützstellengitter gut bestätigt.

Weitere Untersuchungen sind für eine klare Bestätigung des von uns beschriebenen Verhaltens notwendig. In erster Linie sind dabei ausführlichere Untersuchungen der Simulationen

auf dem rotierenden Gitter in Betracht zu ziehen. Rotationen um Zufallswinkel lassen weiter klärende Informationen erwarten. Für sinnvolle Resultate müssten Simulationen mit einer grossen Anzahl Rotationen und somit mit langen Laufzeiten angesetzt werden, damit mit Sicherheit von einem Verschwinden der Gitterachsenanbindung ausgegangen werden kann. Solche Läufe lassen die Möglichkeit einer Auswertung des Phasenverhaltens, wie wir es in Kapitel 6 durchführen, erwarten.

Eine weitere Bestätigungsmöglichkeit des von uns gefundenen Phasenverhaltens der Überstruktur schlagen wir durch die Simulation auf einem Zufallsgitter vor. Bei einem Zufallsgitter ist die Stützstellenverteilung in der projizierten Ebene der Simulationsfläche zufällig verteilt. Dabei wäre auch interessant zu untersuchen, was bei Simulationen mit beweglichen Stützstellen passiert. Dies jedoch ist der Rahmen für andere Arbeiten.

