

# Monte-Carlo-Simulation einer Überstruktur auf Lipidmembranen

Inauguraldissertation  
zur Erlangung der Doktorwürde  
des Fachbereichs Physik  
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von  
ANDREAS JUD  
aus Muttenz/CH

Berlin, im September 1998

1. Gutachter : Prof. Dr. W. Helfrich  
Institut für Theoretische Physik  
der Freien Universität Berlin  
Arnimallee 14, 14195 Berlin

2. Gutachter : Prof. Dr. I. Peschel  
Institut für Theoretische Physik  
der Freien Universität Berlin  
Arnimallee 14, 14195 Berlin

Tag der Disputation: 4. November 1998

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Lipidmembranen . . . . .	1
1.1.1	Amphiphile Moleküle . . . . .	1
1.1.2	Selbstaggregation . . . . .	3
1.1.3	Modellmembranen . . . . .	4
1.1.4	Biologische Zellmembranen . . . . .	5
1.2	Die Überstruktur . . . . .	6
1.3	Aufbau der Arbeit . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Elastizitätstheorie</b>	<b>11</b>
2.1	Die elastische, homogene Platte . . . . .	11
2.2	Entwicklung der Krümmungsenergie . . . . .	13
2.2.1	Krümmungsterme erster Ordnung . . . . .	15
2.2.2	Krümmungsterme zweiter Ordnung . . . . .	16
2.2.3	Krümmungsterme dritter Ordnung . . . . .	16
2.2.4	Krümmungsterme vierter Ordnung . . . . .	17
2.3	Molekulare Membranmodelle . . . . .	18
2.3.1	Biegemodule erster und zweiter Ordnung . . . . .	19
2.3.2	Entwicklung des Gauss'schen Moduls . . . . .	21
2.4	Der Hamiltonian der Simulation . . . . .	25
2.4.1	Der Modul des Gradiententerms . . . . .	26
2.4.2	Der Modul des Begrenzungsterms . . . . .	29
2.5	Zusammenfassung . . . . .	29
<b>3</b>	<b>Monte-Carlo-Methoden</b>	<b>31</b>
3.1	Simple-Sampling . . . . .	31
3.2	Importance-Sampling . . . . .	34
3.2.1	Allgemeines Prinzip . . . . .	35
3.2.2	Der Metropolis-Algorithmus . . . . .	37
3.3	Einige übliche Tricks . . . . .	40
3.3.1	Periodische Randbedingungen . . . . .	40
3.3.2	Dynamisch optimiertes Monte-Carlo . . . . .	42
3.3.3	Simulated Annealing . . . . .	42

<b>4</b>	<b>Der Korrekturterm</b>	<b>45</b>
4.1	Erste Testsimulationen . . . . .	45
4.2	Herleitung des Entropieterms . . . . .	46
4.2.1	Die Skalierungen . . . . .	47
4.2.2	Der Verbreiterungsfaktor . . . . .	49
4.2.3	Entropiezunahme aufgrund der Verbreiterung . . . . .	51
4.3	Diskussion des Entropieterms . . . . .	54
4.3.1	Vergleich mit exaktem Wert . . . . .	55
4.3.2	Wirkung des Korrekturtermes . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Die Einheitszelle der Überstruktur</b>	<b>59</b>
5.1	Messung der Autokorrelationszeiten . . . . .	59
5.2	Die Einheitszelle . . . . .	62
5.2.1	Erste Simulationen . . . . .	62
5.2.2	Bestimmung der Kantenlänge . . . . .	65
5.2.3	Fourierreihenansatz für die Einheitszelle . . . . .	66
5.3	Variation der Stützstellendichte . . . . .	70
5.3.1	Eingelesene Vorstruktur . . . . .	71
5.3.2	Flache Membran als Ausgangssituation . . . . .	73
5.4	Parameterbereich für Sattelstrukturen . . . . .	75
<b>6</b>	<b>Simulationen grosser Flächen</b>	<b>79</b>
6.1	Die Phasenübergänge . . . . .	79
6.1.1	Allgemeines Vorgehen . . . . .	80
6.1.2	Bereich der ersten Phase . . . . .	87
6.1.3	Erster Phasenübergang . . . . .	89
6.1.4	Bereich der zweiten Phase . . . . .	93
6.1.5	Zweiter Phasenübergang . . . . .	95
6.1.6	Bereich der dritten Phase . . . . .	98
6.1.7	Bestätigung durch weiteren Parametersatz . . . . .	101
6.2	Übergrosse Flächen . . . . .	102
6.2.1	Langsames Abkühlen . . . . .	103
6.2.2	Schnelles Abschrecken . . . . .	107
6.2.3	Von eingelesenen Strukturen ausgehend . . . . .	111
<b>7</b>	<b>Der Weg zur ungeordneten Überstruktur</b>	<b>113</b>
7.1	Simulationen auf der Kreisfläche . . . . .	113
7.2	Die Gitteranbindung der Simulation . . . . .	117
7.2.1	Translation des Gitters . . . . .	117
7.2.2	Fazit aus der Gitterpunktanbindung . . . . .	119
7.2.3	Rotation des Gitters . . . . .	120
7.2.4	Fazit aus der Gitterachsenanbindung . . . . .	123
7.3	Simulationen mit Drehung des Gitters . . . . .	124
7.3.1	Phasenverhalten . . . . .	125
7.3.2	Anknüpfung an das Experiment . . . . .	130
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>133</b>

<b>A</b>	<b>Grundlegendes zur Differentialgeometrie</b>	<b>137</b>
A.1	Analytische Grundlagen . . . . .	137
A.1.1	Reguläre Flächen . . . . .	137
A.1.2	Krümmungen . . . . .	140
A.1.3	Der Satz von Gauss–Bonnet . . . . .	143
A.2	Numerische Realisierung . . . . .	144
A.2.1	Numerische Ableitungen . . . . .	145
A.2.2	Krümmung auf dem diskreten Gitter . . . . .	146
<b>B</b>	<b>Erzeugung von Zufallszahlen</b>	<b>149</b>
<b>C</b>	<b>Von Markov–Prozessen und der Mastergleichung</b>	<b>153</b>
C.1	Definitionen . . . . .	153
C.2	Stationäre Lösungen der Mastergleichung . . . . .	155
<b>D</b>	<b>Fehlerrechnung und Fluktuationen</b>	<b>157</b>
D.1	Standard Fehleranalyse . . . . .	157
D.1.1	Bestimmung der Wärmekapazität . . . . .	158
D.2	Die Autokorrelationszeit . . . . .	158
D.2.1	Die Autokorrelationsfunktion . . . . .	159
D.2.2	Statistische Ineffizienz . . . . .	159
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>161</b>



## Danksagung

Viele Menschen haben direkt und indirekt zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Es ist unmöglich, sie alle zu nennen. Einigen von ihnen möchte ich aber ausdrücklich meinen Dank aussprechen.

An erster Stelle danke ich Prof. Dr. W. Helfrich für das Stellen des interessanten Themas und für die Betreuung der Arbeit. Die vielen Diskussionen gegen Ende der Arbeit haben mir sehr geholfen.

Den Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe spreche ich meinen Dank aus für die Zusammenarbeit und die vielfältigen, hilfreichen Diskussionen, die eine solche Arbeit erst ermöglichen. Dr. Beate Klösgen hat mich einige Male auf den richtigen Weg zurückgebracht. Meine KommilitonInnen Gabriela Bagordo, Roger Bilewicz, Thomas Franke und Johannes Thimmel hatten immer Zeit und ein offenes Ohr für mich. Dies war über weite Wegstrecken sehr wichtig. Auch den zahlreichen weiteren Mitarbeitern, Gästen und Diplomanden, die im Laufe meiner vier Jahre hier unsere Gruppe bereichert haben, bin ich zum Dank verpflichtet.

Der Fachbereich Physik der Freien Universität war oft eine wichtige Stütze. Ausdrücklich danken möchte ich Dr. Stanislav Iatsevitch und Dr. Sabine Klapp. Ich empfand es als Auszeichnung, an der Freien Universität in Berlin studieren und arbeiten zu dürfen.

Nicht zu vergessen ist Dr. Riedel von der ZEDAT. Ohne seinen Einsatz für einen Ausbau der Rechenleistung an der Freien Universität wären die meisten Bilder dieser Arbeit kaum möglich gewesen.



# Lebenslauf

<b>Name</b>		Andreas Jud
<b>Geburtsdatum</b>		16. Juni 1968
<b>Geburtsort</b>		Liestal/Baselland (CH)
<b>Schulbildung</b>	04/75-03/80	Primarschule in MuttENZ
	04/80-03/84	Progymnasium in MuttENZ
	04/84-09/87	Gymnasium MuttENZ
	09/87	Maturitätsprüfung
<b>Wehrdienst</b>	02/88-05/88	Rekrutenschule
<b>Studium</b>	10/88-10/90	Grundstudium der Physik an der Universität Basel
	10/90	Vordiplom
	11/90-06/93	Hauptstudium der Physik an der Universität Basel
	07/93-11/93	Anfertigung einer Diplomarbeit bei Prof. Dr. H. Thomas, Thema: „Semiklassische Behandlung des Spin–Boson–Modells“
	04/94	Diplom in Physik
	seit 08/94	Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Freien Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik