

Kapitel 4

Der Korrekturterm

In Kapitel 2 tragen wir die nötigen theoretischen Grundlagen der Elastizitätstheorie fluider Membranen zusammen. Im darauffolgenden 3. Kapitel stellen wir die verwendeten Simulationsmethoden dar. Das zu untersuchende System und unser Werkzeug zu seiner Bearbeitung liegen somit bereit und wir können erste Schritte wagen. Bevor wir mit der Simulation mit höheren Krümmungsordnungen loslegen, testen wir als Spezialfall, wie sich die Membran in der Simulation nur mit der ersten Entwicklungsordnung der Biegeenergie verhält. Dabei stellt sich ein Verhalten heraus, das wir verstehen müssen. Um dem auftretenden Artefakt Abhilfe zu leisten, wird es erst analysiert und danach ein zusätzlicher entropischer Term hergeleitet. Damit wir die Wirkungsweise dieses Entropietermes besser verstehen können, soll dieser am Ende kurz diskutiert werden.

4.1 Erste Testsimulationen

Der obligatorische Test, von dem hier die Rede sein soll, geht aus von der für unseren Fall ersten relevanten Entwicklungsordnung der elastischen Energie pro Fläche, wie sie in Kapitel 2 hergeleitet wird. Bei verschwindender spontaner Krümmung $c_0 = 0$ ist dieser Fall durch Gleichung (2.5) gegeben. Beachten wir, dass wir aufgrund periodischer Randbedingungen den Gauss'schen Krümmungsterm weglassen können (Vgl. Kapitel 2), so schreiben wir den Hamiltonian, der Ausgangspunkt dieses Kapitels sein soll, zu

$$g = \frac{1}{2}\kappa_0 J^2 = \frac{1}{2}\kappa_0 (c_1 + c_2)^2 . \quad (4.1)$$

Wir stellen fest, dass die flache Membran mit dem Wert $c_1 = c_2 = 0$ für die beiden Hauptkrümmungen den energetischen Tiefpunkt darstellt

$$c_1 = c_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad g = 0$$

und somit energetisch am günstigsten ist. Jede Abweichung aus dem Gleichgewichtszustand der flachen Membran führt zu einer Deformation der Membran und somit zu einem positiven Krümmungsenergiebeitrag

$$g = \frac{1}{2}\kappa_0 (c_1 + c_2)^2 \geq 0 , \quad \text{für } c_1, c_2 \neq 0 .$$

Im Experiment zeigen reale, flache Membranen unter dem Mikroskop bei endlicher Temperatur ($T \neq 0$) leichte Bewegungen (Vgl. Kapitel 1). Diese beobachtbaren Bewegungen sind

Undulationsbewegungen der Membran um die Gleichgewichtsebene. Dabei stellt jede Undulationsmode $q = |\vec{q}|$ einen Freiheitsgrad der Membran dar und nach dem Äquipartitionstheorem folgt für die mittlere Energie eines Modes

$$\langle E_q \rangle = \frac{kT}{2} . \quad (4.2)$$

Ein analoges Verhalten erwarten wir auch bei unseren Computer-Simulationen, die mit Hamiltonian (4.1) durchgeführt werden. Wir erwarten eine im Mittel flache Membran, die aufgrund ihrer Undulationsfreiheitsgrade kleine Undulationsbewegungen vollführt, was sich als leichte Fluktuationen um ihre Ursprungsebene $z(u, v) = 0$ äussert. Die Fluktuationen um die Ursprungsebene lassen die simulierte Membran im Mittel flach, sodass deren reale Fläche A_{real} ungefähr gleich ihrer projizierten Basisfläche A_{proj} (und somit konstant) bleibt

$$\frac{A_{\text{real}}}{A_{\text{proj}}} \leq 1.05 .$$

Der Energieverlauf während der Simulation müsste dann im Mittel auf konstantem Niveau auf einem Wert von $kT/2$ pro Stützstelle schwanken.

Das erwartete Verhalten können wir bei kleinen Membranflächen (Membranbasisflächen mit einer Kantenlänge von $L \leq 15\text{nm}$) wie beschrieben beobachten. Erhöhen wir aber die Membranfläche unserer Simulation, so stellen wir fest, dass bei grossen Flächenstücken (Basisflächen mit einer Kantenlänge von $L > 15\text{nm}$) vom flachen Zustand $z(u, v) = 0$ ausgehend im Laufe der Simulation die reale Membranfläche stetig und unbegrenzt anwächst. Somit gilt für das Verhältnis von realer Fläche und Basisfläche einige Zeit nach Simulationsbeginn

$$\frac{A_{\text{real}}}{A_{\text{proj}}} \gg 1 .$$

Das Charakteristische an den im Laufe der Simulation entstehenden Membranformen (Abb. 4.1) sind Höhenzüge mit grossen Flanken, die ein riesiges Flächenreservoir für die Membran darstellen. Das langsame Anwachsen von realer Membranfläche während der Simulation geht einher mit einem stetigen Anwachsen der Membranenergie.

Aufgrund der Diskrepanz unserer obigen Überlegungen mit der Simulation schliessen wir, dass wir es beim Simulationsverhalten mit einem Artefakt zu tun haben. Die Tatsache, dass dieser Artefakt nur bei grossen Membranflächen auftritt, ist darauf zurückzuführen, dass bei kleinen Flächen die Krümmungsenergiebarriere zu gross ist, die zum Aufwerfen eines Flächenhanges notwendig ist. Später interessieren wir uns aber gerade für Simulationen grosser Flächen (Vgl. Kapitel 6). Daher muss dieser Artefakt verstanden und beseitigt werden.

Wir argumentieren, dass die Kippung der Membran wie eine Verkleinerung der Biegesteifigkeit κ_0 wirkt, was zu einer Abnahme der freien Energie (4.1) führt. Diese Abnahme der freien Energie kann mit einer Zunahme der Entropie pro Mode verknüpft werden. Das Ziel ist es, aus der Abnahme der Biegesteifigkeit eine entropieartige, negative freie Energiedichte der Kippung der Membran abzuschätzen, um diese durch einen positiven Korrekturterm in (4.1) zu kompensieren. Dazu braucht es einige Überlegungen.

4.2 Herleitung des Entropieterms

Überlegen wir uns genau, welches unsere Simulationsbedingungen sind und wie eine Rechenmaschine ausführt, was wir ihr befehlen, so merken wir, dass wir daraus einen entropieartigen

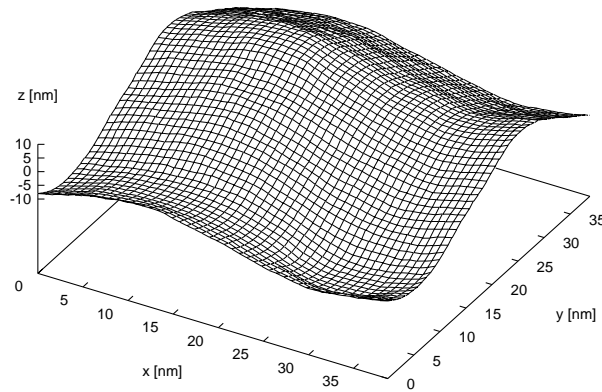


Abbildung 4.1: Endkonfiguration eines Simulationslaufs mit dem Biegesteifigkeitsparameter $\kappa_0 = 0.05 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ bei der Temperatur $T = 253.5 \text{ K}$ (Überschussfläche $A_{\text{real}}/A_{\text{proj}} = 1.75$). Das System ist nicht im Gleichgewicht.

Summanden zur freien Energie herleiten können, der das Kippen der Membran beschreibt.

4.2.1 Die Skalierungen

In unserer Simulation gehen wir sowohl von einer bei Simulationsbeginn festgelegten und während der Simulation festen projizierten Basisfläche, als auch von einer festen Anzahl gleichmässig über die Fläche verteilter Stützstellen N aus. Der Abstand zweier benachbarter Stützstellen beträgt

$$\Delta h = \sqrt{\frac{A_{\text{proj}}}{N}}$$

und ist bezüglich der projizierten Basisfläche während des gesamten Simulationslaufs konstant. Die flache Membran liegt parallel zu ihrer Basisfläche, womit auch dort der Stützstellenabstand Δh beträgt. Im Hang der gekippten Membranfläche nimmt aber der Abstand zwischen zwei Stützstellen bezüglich der realen Fläche in Kipprichtung zu (Abb. 4.2). Dies führt zu einer Vergrößerung der Wellenlänge, bzw. zu einer Verkleinerung des Wellenvektors.

In der flachen Membran wird ein Wellenvektor geschrieben zu

$$\vec{q} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y) , \quad n_x, n_y \in \mathbb{N}_0 .$$

Betrachten wir einen in einer gekippten Membran liegenden Wellenvektor, wobei die Kipprichtung parallel zur x -Richtung sei, dann gilt

$$\vec{q} \rightarrow \vec{q}^{\text{kip}} = \frac{2\pi}{L} (n_x^{\text{kip}}, n_y) = \left(\frac{2\pi}{L^{\text{kip}}} n_x, \frac{2\pi}{L} n_y \right) .$$

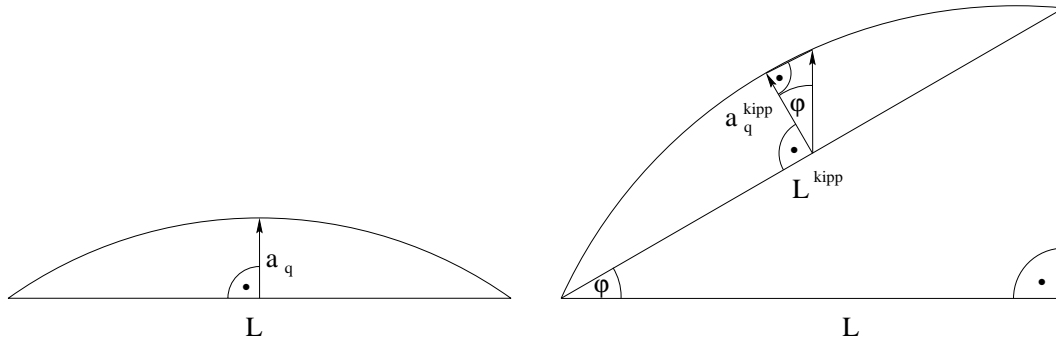


Abbildung 4.2: Vergleich zwischen einer Undulationsmode auf der flachen Membran und der gleichen Mode auf der gekippten Membran bei konstantem Stützstellenabstand.

Aufgrund der Beziehung (Abb. 4.2)

$$\cos \varphi = \frac{L}{L^{\text{kipp}}} \quad (4.3)$$

folgt

$$\vec{q}^{\text{kipp}} = \left(\frac{2\pi}{L} n_x \cdot \cos \varphi, \frac{2\pi}{L} n_y \right) = \frac{2\pi}{L} (n_x \cdot \cos \varphi, n_y) .$$

Diese Verkürzung der Wellenvektoren entspricht der erwähnten Längenzunahme der Moden. Wir merken uns, dass die Wellenvektoren bei Kippung in x -Richtung wie

$$q_x^{\text{kipp}} \propto \cos \varphi . \quad (4.4)$$

skalieren.

Betrachten wir die Folgen der Kippung für die Amplituden der Undulationsmoden. Hier gilt es, die Simulationsbedingungen zu beachten. Die Simulation ist derart, dass Stützstellenauslenkungen senkrecht zur projizierten Membranbasisfläche stattfinden. Die relevante Größe der Amplituden der Auslenkungsmoden ist somit die Projektion der Amplitude auf die z -Achse. Besitzt die Undulationsmode q auf der ungekippten Membran eine Amplitude der Größe a_q , so gilt für die z -Achsen-Projektion derselben Amplitude auf der um den Winkel φ gekippten Membran die Beziehung

$$a_q^{\text{kipp}} = a_q \cos \varphi .$$

Auf der gekippten Membran (Abb. 4.2) skaliert also die Auslenkungsamplitude wie

$$a_q^{\text{kipp}} \propto \cos \varphi . \quad (4.5)$$

Dieser Sachverhalt ist in der Literatur bereits bekannt. Zur Beschreibung physikalischer Auslenkungen einer nichtflachen Membran leiten die Autoren in [47] einen Faktor her, der aus dem Skalarprodukt zwischen der Normalen der Membranebene und der Normalen der Projektionsebene gebildet wird. Der entstehende Faktor ist die aus der Feldtheorie bekannte Faddeev–Popov–Determinante.

Aus den Beziehungen (4.3), (4.4) und (4.5) schätzen wir als Nächstes eine effektive Biegesteifigkeit $\kappa_0^{\text{eff}} < \kappa_0$ ab, die vom Membrankippungswinkel abhängt. Anschliessend erkennen wir, dass eine verkleinerte Biegesteifigkeit eine Verbreiterung des mittleren Amplitudenquadrates eines Modes bewirkt.

4.2.2 Der Verbreiterungsfaktor

Entwickeln wir die Undulationen der Membran in einer Fourier-Reihe

$$u(x, y) = \frac{a_{\vec{0}}}{2} + \sum'_{\vec{q} \neq \vec{0}} a_{\vec{q}} \cos(\vec{q}\vec{r}) + b_{\vec{q}} \sin(\vec{q}\vec{r}) ,$$

wobei die gestrichene Summe anzeigt, dass nur über die halbe \vec{q} -Ebene summiert werden soll, und betrachten nur den geraden Teil obiger Fourier-Reihe (für den ungeraden Teil der Fourier-Reihe gilt alles in völliger Analogie) mit den Koeffizienten $a_{\vec{q}}$, so kann mit seiner Hilfe die mittlere Energie eines Modes berechnet werden. Wir wissen, dass in erster Näherung

$$\begin{aligned} \langle E_q \rangle &= \frac{1}{2} \kappa_0 \langle a_{\vec{q}}^2 q^4 \cos^2(\vec{q}\vec{r}) \rangle A_{\text{proj}} \\ &= \frac{1}{2} \kappa_0 \langle a_{\vec{q}}^2 \rangle q^4 \langle \cos^2(\vec{q}\vec{r}) \rangle A_{\text{proj}} = \frac{1}{4} \kappa_0 \langle a_{\vec{q}}^2 \rangle q^4 A_{\text{proj}} \end{aligned}$$

gilt, wobei k die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur, κ_0 die Biegesteifigkeit und A_{proj} die Basisfläche der flachen Membran ist. Mit dem Äquipartitionstheorem (4.2) folgt weiter [48]

$$\langle a_{\vec{q}}^2 \rangle = \frac{2kT}{\kappa_0 q^4 A_{\text{proj}}} . \quad (4.6)$$

Sei nun die Membran um den Winkel φ gekippt und dieser Fall mit dem der ungekippten Membran verglichen. Die x -Komponente eines beliebigen Wellenvektors skaliert auf der in x -Richtung gekippten Membran nach (4.4)

$$q_x \propto \cos \varphi .$$

Die Amplitude skaliert auf der gekippten Membran wie (4.5)

$$a_q \propto \cos \varphi .$$

Beachten wir noch die für die Basisfläche wichtige Proportionalität (4.3)

$$L \propto \frac{1}{\cos \varphi}$$

und leiten aus dem Normalenvektor der projizierten Basisfläche \vec{N} und dem Normalenvektor der gekippten Membranebene \vec{n} die Beziehung (Abb. 4.3)

$$\vec{n} \cdot \vec{N} = |\vec{n}| |\vec{N}| \cos \varphi \quad \Rightarrow \quad n_z = \frac{1}{\gamma} = \cos \varphi$$

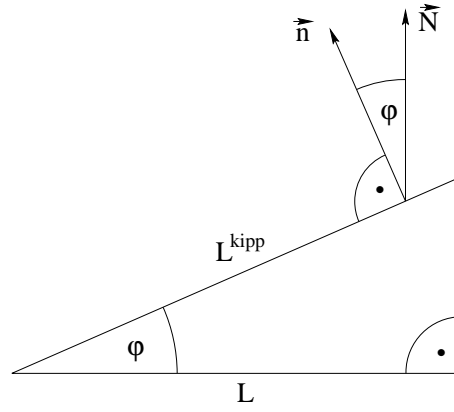


Abbildung 4.3: Die Normalenvektoren der flachen (\vec{N}) und der gekippten (\vec{n}) Membranebene.

her (Vgl. Anhang A), wobei γ der differentialgeometrische Faktor ist, so schreiben wir zusammengefasst für eine Mode auf der gekippten Membran

$$\begin{aligned}
 E_q^{\text{kippt}} &= \frac{1}{2} \kappa_0 a_q^2 \frac{1}{\gamma^2} \cdot \left(q_x^2 \frac{1}{\gamma^2} + q_y^2 \right)^2 A_{\text{proj}} \gamma \\
 &= \frac{1}{2} \kappa_0 a_q^2 \frac{1}{\gamma^2} \cdot q^4 \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right)^2 A_{\text{proj}} \gamma \\
 &= \frac{1}{2} \kappa_0^{\text{eff}} a_q^2 \cdot q^4 A_{\text{proj}} ,
 \end{aligned}$$

mit der effektiven Biegesteifigkeit

$$\kappa_0^{\text{eff}} = \kappa_0 \cdot \frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right)^2 . \quad (4.7)$$

Da für eine gekippte Membranfläche $\gamma \geq 1$ gilt und mit zunehmendem Steigungswinkel schnell $\gamma \gg 1$ wird, sehen wir, dass die Kippung der Membran wie eine Verkleinerung der Biegesteifigkeit κ_0 wirkt.

Setzen wir (4.7) in (4.6) ein, so gilt

$$\begin{aligned}
 \sqrt{\langle (a_q^{\text{kippt}})^2 \rangle} &= \sqrt{\frac{2kT}{\kappa_0^{\text{eff}} q^4 A_{\text{proj}}}} \\
 &= \sqrt{\langle a_q^2 \rangle} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right)^2}} . \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

Ausdruck (4.8) ist das mittlere Amplitudenquadrat der flachen Membran, multipliziert mit einem Faktor, der eine Verbreiterung des mittleren Amplitudenquadrates bei Kippung der Membran bewirkt. Der Verbreiterungsfaktor, der aus der Kippung der Membran folgt, lässt

sich schreiben zu

$$\sqrt{\frac{\langle (a_q^{\text{kipf}})^2 \rangle}{\langle a_q^2 \rangle}} = \frac{1}{\frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right)}. \quad (4.9)$$

Die hier folgende Vergrößerung des mittleren Amplitudenquadrates (4.9) bewirkt eine Zunahme der Entropie einer Mode. Die Verknüpfung der Verbreiterung der Amplitudenverteilung mit der Zunahme der Entropie ist unser nächster Schritt.

4.2.3 Entropiezunahme aufgrund der Verbreiterung

Im Folgenden verwenden wir einen Gedankengang, wie er zum ersten Mal in [49] aufgezeigt wird.

Überlegen wir uns, dass die von der Membran erreichbaren Amplituden einer Undulationsmode in einer Gauss-Glockenkurve

$$w(a_q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{a_q^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.10)$$

um den Mittelwert $\langle a_q \rangle = 0$ verteilt sein müssen (Abb. 4.4), wobei für die Breite dieser Gauss-Verteilung die Beziehung

$$\sigma = \sqrt{\langle a_q^2 \rangle} \quad (4.11)$$

gilt. Da eine Kippung der Membran zu der Vergrößerung (4.8) des mittleren Amplitudenquadrates $\langle a_q^2 \rangle$ führt, ist dies gleichbedeutend mit einer Verbreiterung der Gauss-Verteilung (4.11) der von der Membran erreichbaren Amplituden einer Undulationsmode. Zerlegen wir die Gauss-Verteilung der Amplitude in endlich viele infinitesimale Intervalle $\Delta a_q \ll \sigma$ (Abb. 4.4), wobei die Breite dieser Intervalle so klein sein soll, dass die Anzahl der entstehenden Intervalle Statistik ermöglicht (die tatsächliche Breite dieser Zellen ist dabei irrelevant, da später nur Entropie-Differenzen betrachtet werden). Eine Verbreiterung der Gauss-Verteilung bedeutet dann eine Neugewinnung statistisch möglicher Zustände, also eine Änderung der Anzahl

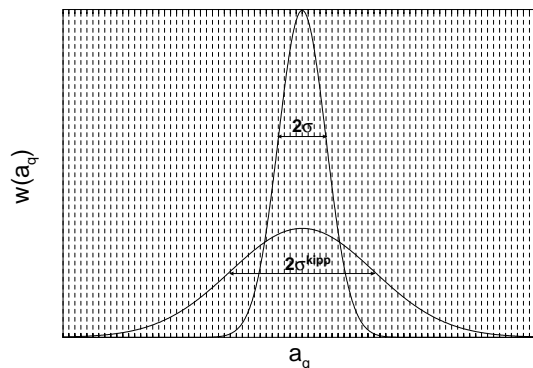


Abbildung 4.4: Die Verbreiterung der Gauss-Glockenkurve beim Übergang von einer flachen (σ) zu einer gekippten Membran (σ^{kipf}).

möglicher Mikrozustände. Diese Anzahl möglicher Mikrozustände der Membranfluktuationen bestimmt die Entropie der Membran, ihre Zunahme geht einher mit einer Entropiezunahme.

Mit $w(a_q)\Delta a_q$ als der Wahrscheinlichkeit, die Auslenkungsamplitude im Intervall $[a_q, a_q + \Delta a_q]$ zu finden, kann die Entropie pro Mode als Summe über alle Zellen ausgedrückt werden zu

$$S_q = -k \sum_n w(\Delta a_{q,n}) \Delta a_{q,n} \ln \{w(\Delta a_{q,n}) \Delta a_{q,n}\} ,$$

wobei die einzelnen Zellen mit dem Index n nummeriert werden, um ihre Summierbarkeit zu ermöglichen. Führen wir die Summation über in eine Integration

$$\sum_n \rightarrow \int da_q ,$$

so folgt

$$S_q = -k \int_{-\infty}^{\infty} w(a_q) \ln \{w(a_q) \Delta a_q\} da_q .$$

Einsetzen der Gauss-Verteilung (4.10) für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Amplitude ergibt

$$\begin{aligned} S_q &= -k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{a_q^2}{2\sigma^2}\right) \ln \left\{ \frac{\Delta a_q}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{a_q^2}{2\sigma^2}\right) \right\} da_q \\ &= \frac{k}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{a_q^2}{2\sigma^2}\right) \left\{ \ln\left(\frac{\sqrt{2\pi}\sigma}{\Delta a_q}\right) + \frac{a_q^2}{2\sigma^2} \right\} da_q \\ &= k \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \ln\left(\frac{\sqrt{2\pi}\sigma}{\Delta a_q}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{a_q^2}{2\sigma^2}\right) d\left(\frac{a_q}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\sigma^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} a_q^2 \exp\left(-\frac{a_q^2}{2\sigma^2}\right) da_q \right\} \end{aligned}$$

Zur Lösung dieser Integrale verwenden wir die bekannten Formeln [50]

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) dx &= \sigma^2 , \\ \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx &= \sqrt{\pi} \end{aligned}$$

und es folgt

$$S_q = k \left\{ \ln\left(\frac{\sqrt{2\pi}\sigma}{\Delta a_q}\right) + \frac{1}{2} \right\} .$$

Dies ist die gesuchte Beziehung, aus der wir die Art erkennen können, wie die Entropie der Membran von der Breite der Verteilung der Auslenkungsmoden (4.11) abhängt. Wir können sehen, dass eine Verbreiterung dieser Verteilung aufgrund von Membrankippung eine Zunahme der Entropie pro Mode zur Folge hat. Da wir Kippung verhindern wollen, interessieren wir uns für den Entropie–Beitrag, der aufgrund der Kippung entsteht, d. h. wir interessieren uns für die Entropiedifferenz

$$\Delta S_q = S_q^{\text{kipp}} - S_q = \left\{ k \ln \left(\sigma^{\text{kipp}} \right) - k \ln (\sigma) \right\} = k \ln \left(\frac{\sigma^{\text{kipp}}}{\sigma} \right)$$

und können erkennen, dass die gesuchte Entropiedifferenz proportional zum Logarithmus des Verbreiterungsfaktors (4.9) ist. Es folgt

$$\Delta s_q = -\frac{k}{L^2} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right) \right\} ,$$

wobei wir die gefundene Entropiedifferenz durch die Membranbasisfläche $A_{\text{proj}} = L^2$ dividieren, um eine für die Simulationen leichter handhabbare Entropiedifferenzdichte pro Mode zu erhalten. Aus dieser Entropiedifferenz pro Mode erhalten wir den gesuchten Entropiedifferenzausdruck aller Moden des \vec{q} -Raumes, indem wir über alle Moden summieren. Für genügend grosse \vec{q} -Raumflächen führen wir die Summation über in eine Integration über alle Moden auf einer Kreisscheibe um den Nullpunkt. Es ist

$$\Delta s(\gamma) = -\frac{\varrho \cdot k}{L^2} \cdot \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \int_0^{2\pi} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right) \right\} q dq d\psi ,$$

mit dem Zustands–Dichtefaktor ϱ des Wellenvektorraumes, der durch den Übergang von der Summation zur Integration hinzukommt. Für ihn gilt

$$\varrho = \frac{L^2}{4\pi^2}$$

und mit den Integrationsgrenzen

$$q_{\min} = \frac{2\pi}{L} \quad \text{und} \quad q_{\max} = \frac{\pi}{\Delta h}$$

folgt für grosse Flächenstücke ($L \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} \Delta s(\gamma) &= -\frac{k}{4\pi^2} \cdot \int_0^{\frac{\pi}{\Delta h}} q dq \int_0^{2\pi} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \cdot \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right) \right\} d\psi \\ &= -\frac{k}{8\Delta h^2} \int_0^{2\pi} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \cdot \left(\frac{1}{\gamma^2} \cos^2 \psi + \sin^2 \psi \right) \right\} d\psi . \end{aligned}$$

Es bleibt zu lösen

$$\Delta s(\gamma) = -\frac{k}{4\Delta h^2} \int_0^{\pi} \ln \left\{ \frac{1}{\gamma^{\frac{5}{2}}} \cos^2 \psi + \frac{1}{\gamma^{\frac{1}{2}}} \sin^2 \psi \right\} d\psi .$$

Formeltabellen [51] verraten uns die Beziehung

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \ln \{a^2 \cos^2 x + b^2 \sin^2 x\} dx = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \ln \{a^2 \cos^2 x + b^2 \sin^2 x\} dx = \pi \cdot \ln \left\{ \frac{a+b}{2} \right\}, \quad [a > 0, b > 0].$$

In unserem Fall sind

$$a = \gamma^{-\frac{5}{4}}, \quad b = \gamma^{-\frac{1}{4}}$$

und es ergibt sich

$$\begin{aligned} \Delta s(\gamma) &= -\frac{k}{4\Delta h^2} \int_0^{\pi} \ln \left\{ \frac{1}{\gamma^{\frac{5}{2}}} \cos^2 \psi + \frac{1}{\gamma^{\frac{1}{2}}} \sin^2 \psi \right\} d\psi \\ &= -\frac{k}{2\Delta h^2} \cdot \pi \ln \left\{ \frac{1 + \frac{1}{\gamma}}{2\sqrt[4]{\gamma}} \right\}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Mit der Temperatur T lässt sich die freie Energie der Kippung schreiben zu

$$\Delta g(\gamma) = -T \cdot \Delta s(\gamma) = \frac{kT}{2\Delta h^2} \cdot \pi \ln \left\{ \frac{1 + \frac{1}{\gamma}}{2\sqrt[4]{\gamma}} \right\}. \quad (4.13)$$

Dies ist unser gesuchter Korrekturterm der Kippung. Er nimmt mit zunehmender Membrankippung ab. Er wird in dieser Form in die Simulation miteingeführt, indem er von Hamiltonian (4.1) subtrahiert wird. Die Subtraktion bringt den Kompensationscharakter von (4.13) zum Ausdruck: Das durch Kippung der Membran erzeugte Absinken der freien Energie wird dadurch kompensiert, dass der Gewinn an freier Energie durch Kippung von der ursprünglichen freien Energie abgezogen wird. Daraus muss folgen, dass die freie Energie der Membran bei Kippung nicht mehr abnehmen kann.

Die neue freie Energiedichte, die mit (4.13) entsteht

$$g^{\text{neu}} = g^{\text{alt}} - \Delta g(\gamma)$$

ist bei gekippter Membranfläche grösser, bei flacher Membran gleich dem alten Ausdruck für die freie Energie (Abb. 4.5).

4.3 Diskussion des Entropieterms

Befassen wir uns kurz mit den uns aus der Literatur bekannten Möglichkeiten zur Simulation von gekrümmten Membranflächen. Bei kleinen Steigungen $\gamma \approx 1$ können wir unsere Ausdrücke der mittleren und der Gauss'schen Krümmung approximieren (Vgl. Anhang A). Ein Beispiel für die Simulation auf einem Rechteckgitter mit Hilfe des genäherten Ausdrucks der mittleren Krümmung ist in [52] gegeben. Das hier beschriebene Kippen der Membranfläche findet bei dieser Vorgehensweise nicht statt. Ihr entscheidender Nachteil jedoch ist, dass

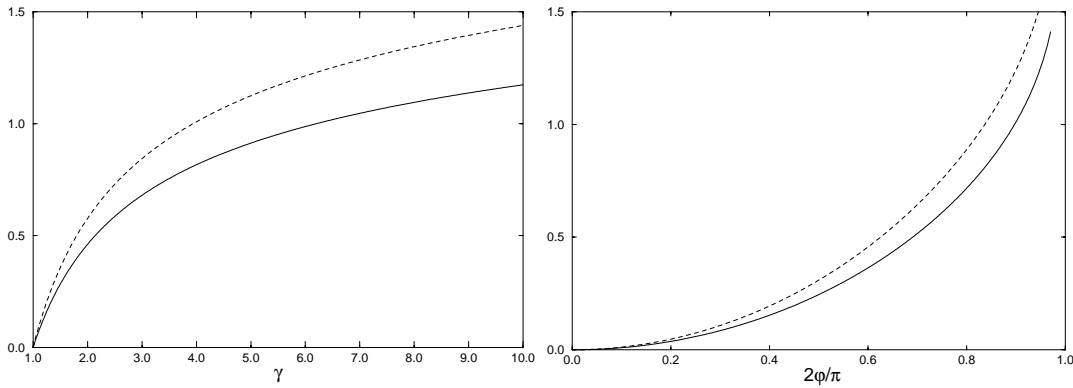


Abbildung 4.5: Die durchgezogenen Linien zeigen den Kurvenverlauf der Funktionen $C\Delta s(\gamma)$ (linkes Bild) und $C\Delta s(\varphi)$ (rechtes Bild), mit dem Vorfaktor $C = \frac{2\Delta h^2}{\pi k}$. Die gestrichelte Kurven ergeben sich aus der Integration über die vollständige Fläche des \vec{q} -Raumes.

bei unseren Simulationen der Überstruktur keine genügend grossen Überschussflächen (Vgl. Kapitel 5) entstehen können.

Eine professionelle Vorgehensweise besteht in der Simulation mit Hilfe von triangulierten Flächen [53]. Für triangulierte Flächen existiert eine Berechnungsmöglichkeit für die mittlere Krümmung J , allerdings ist uns keine für die Berechnung der Gauss'schen Krümmung K bekannt. Die Gauss'sche Krümmung der Stützstelle eines Zufallsgitters müsste wahrscheinlich mittels Stützstelleninterpolation ermittelt werden. Dies wäre mit einem zusätzlichen Rechenaufwand verbunden. Bei unserem direkten Weg simulieren wir auf dem Rechteckgitter, wo wir analytische Ausdrücke für J und K ohne zusätzlichen Rechenaufwand umsetzen können.

Eine interessante Alternative zu unseren Membransimulationen im Ortsraum wird in [54] aufgezeigt durch Simulationen im Fourierraum. Bei Simulationen im Fourierraum ist unser beschriebener Artefakt nicht zu erwarten.

Aus der Literatur über Simulationen von gekrümmten Membranflächen ist uns die hier verwendete Vorgehensweise nicht bekannt. Wir kennen keine Simulationen von Membranen mit Hilfe eines Rechteckgitters, bei denen die diskretisierten, exakten Ausdrücke für die mittlere Krümmung J und für die Gauss'sche Krümmung K (Vgl. Anhang A) verwendet werden - ausser in [22], wo unser Problem umgangen wird, indem einerseits auf sehr kleinen Flächen simuliert und andererseits die Simulation bei sehr tiefen Temperaturen (höchstens bei $T = 75\text{K}$) gestartet wird. Wir gehen daher davon aus, dass die Ideen dieses Kapitels ein neuer Beitrag zur Simulation von diskretisierten Membranflächen darstellen.

Im Folgenden wollen wir kurz die Wirkungsweise von (4.13) untersuchen. Erste Tests müssen abklären, ob unsere Mühen durch die Simulation belohnt werden. Im Laufe der Arbeit kehren wir noch einige Male zum Thema der Wirkungsweise von (4.13) zurück.

4.3.1 Vergleich mit exaktem Wert

Ausdruck (4.12) wird im vorhergehenden Abschnitt berechnet, indem über die Fläche integriert wird, die begrenzt ist durch zwei konzentrische Kreise mit dem Mittelpunkt $\vec{q} = (0, 0)$ und den Radien q_{min} und q_{max} (Abb. 4.6). Dies ist eine Näherung, denn die exakte Integrationsfläche wird durch die Ränder der zwei Quadrate begrenzt, die die beiden Kreise derart

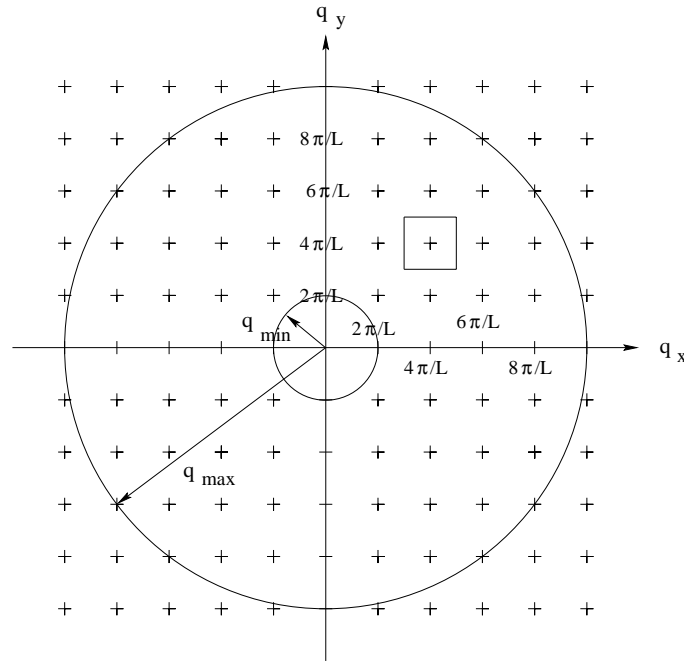


Abbildung 4.6: Die Ebene des \vec{q} -Raumes.

einschliessen, dass diese den Rand je eines Quadrates berühren. Der Grund dafür, dass wir nähern liegt in der unhandlichen Form der analytischen Lösung des exakten Integrals¹

$$\begin{aligned} \Delta_s^{\text{exakt}}(\gamma) = & -\frac{4k}{4\pi^2} \cdot \left(\int_0^{q_{\min}} \left(\int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{\frac{1}{\gamma^2} q_x^2 + q_y^2}{q_x^2 + q_y^2} \right\} dq_x \right) dq_y \right. \\ & + \int_0^{q_{\min}} \left(\int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{\frac{1}{\gamma^2} q_x^2 + q_y^2}{q_x^2 + q_y^2} \right\} dq_y \right) dq_x \\ & \left. + \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \ln \left\{ \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{\frac{1}{\gamma^2} q_x^2 + q_y^2}{q_x^2 + q_y^2} \right\} dq_y dq_x \right) . \end{aligned}$$

Um den Fehler abzuschätzen, den wir durch unsere Näherung machen, können wir die analytische Form der exakten Formel bestimmen und diese mit unserer genäherten Formel vergleichen (Abb. 4.5).

4.3.2 Wirkung des Korrekturtermes

Mit Hilfe des Korrekturtermes (4.13) bleiben die Membranen der Simulation flach. Betrachten wir zur Kontrolle das mittlere Amplitudenquadrat $\langle a_q^2 \rangle$ eines Laufs, so stellen wir fest, dass dieses für die kleinsten und grössten Wellenvektoren leicht grösser ist als es von der Theorie vorausgesagt wird (Abb. 4.7). Dieser Befund ist verständlich, wenn wir im Auge behalten, dass wir mit unserem Korrekturterm eine Näherung vorliegen haben, die bei allen

¹Das Programm Mathematica gibt als Lösung eine Summe, bestehend aus 28 Summanden von arctan- und log-Funktionen.

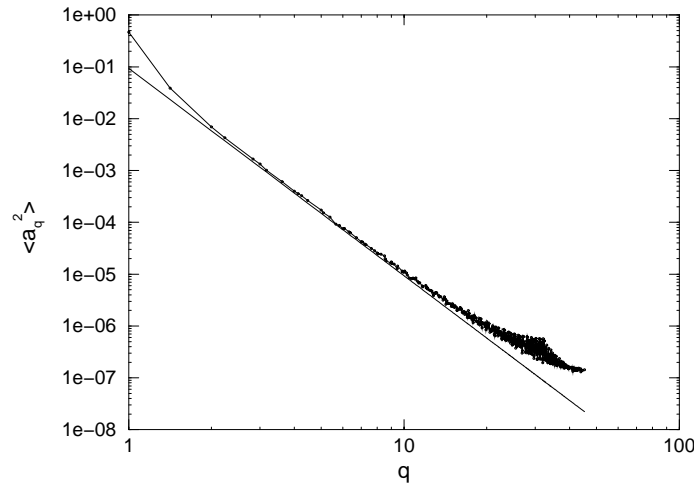


Abbildung 4.7: Mittleres Amplitudenquadrat $\langle a_q^2 \rangle$ eines Simulationslaufs mit dem Biegesteifigkeitsparameter $\kappa_0 = 1 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ bei der Temperatur $T = 181.1 \text{ K}$. Die Sweepzahl des Laufs beträgt 2'000'000, die Kantenlänge der simulierten Membran $L = 54 \text{ nm}$, wobei die Membran auf einem 64×64 -Stützstellengitter dargestellt wird. Am Laufende ist eine Überschussfläche $A_{\text{real}}/A_{\text{proj}} = 1.01$ protokolliert. Die Gerade entspricht der theoretischen Kurve.

Kippungen $\gamma > 1$ kleiner ist als die Funktion, die bei Integration über die eigentliche Fläche des Wellenvektorraumes zustandekommt.

Dieser Effekt scheint nicht auszureichen, um die zu grossen Amplituden zu erklären. Behalten wir aber weiter im Auge, dass durch unsere Flächendiskretisierung in der Simulation Wellenlängen im kürzestwelligen Bereich nicht erfasst werden sondern bei der Summation verloren gehen. Da unser Korrekturterm (4.13) die Summe aller Wellenvektoren und somit unabhängig von den einzelnen Wellenvektoren ist, ist es verständlich, dass durch das Fehlen der grössten Wellenvektoren bei der Summation auch unser Korrekturterm zu klein sein muss.

Unsere Diskretisierung in der Simulation lässt somit unseren Korrekturansatz teilweise zu klein ausfallen, er reicht aber für unsere Zwecke, da unter allen durchgeführten Testsituationen keine Kippung der Membran mehr auftritt.

