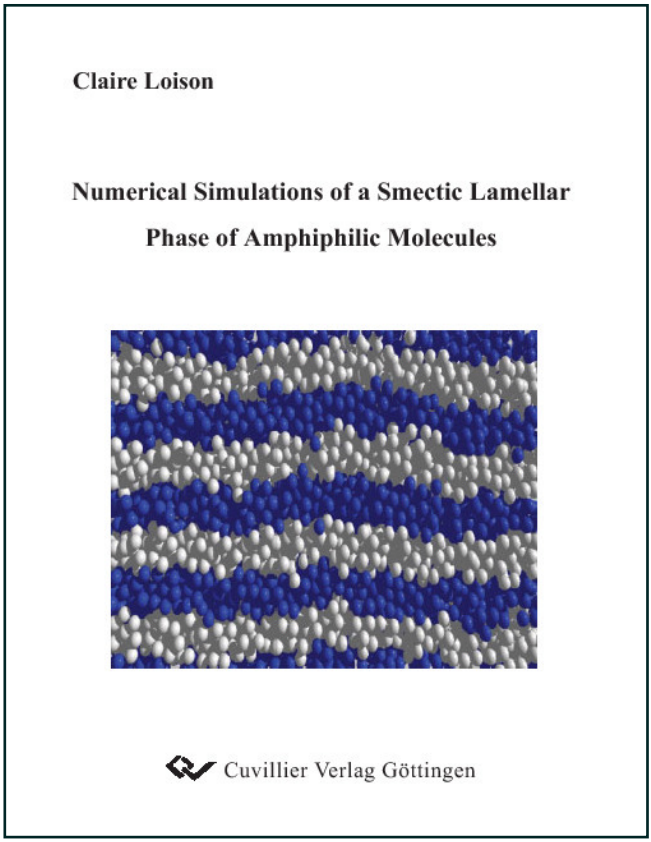
Claire Loison (Autor)

Numerical Simulations of a Smectic Lamellar of Amphiphilic Molecules



https://cuvillier.de/de/shop/publications/2360

Copyright:
Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentzsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen, Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: https://cuvillier.de

globule. Contrairement aux hypothèses habituelles, le polymère non adsorbé perturbe localement la distance interlamellaire et favorise l'apparition de pores dans son voisinage.

Zusammenfassung (German summary)

Diese Arbeit behandelt die flüssig-kristalline lamellare Phase (die sogenannte L_α Phase), die amphiphile Moleküle in wässriger Lösung ausbilden. Diese lamellare Phase besteht aus mehrere Lagen paralleler amphiphiler Doppelschichten, die durch Lösungsmittel voneinander getrennt sind. Wir studieren mittels Molekulardynamiksimulationen die thermischen Fluktuationen der Doppelschichten und die Defekte, die in der lamellaren Phase auftreten köennen, und die Auswirkungen eines Makromoleküls, das zwischen die Doppelschichten gestetzt wird.

In dem zugrundeliegenden, idealisierten "coarse-grained" Modell werden das Lösungsmittel als weiche Kugeln und die Amphiphile als Tetramere (zwei hydrophile Kugeln und zwei hydrophobe Kugeln) repräsentiert. Der Algorithmus, der in dieser Arbeit verwendet wird, beschreibt die lamellare Phase im isobaren isothermen Ensemble ohne Oberflächenspannung ($NPT, \gamma = 0$).

Zuerst verifizieren wir, daß das Modell tatsächlich eine stabile L_α Phase bildet, und charakterisieren ihre flüssig-kristalline Struktur.

Um die Elastizität der lamellaren Phase zu untersuchen, berechnen wir die Fluktuationsspektren der Positionen von den Doppelschichten und vergleichen sie mit den Vorhersagen der "Discrete Harmonic Theory" (DH) für die Elastizität der smektischen Phasen. Die Ergebnisse der Simulation, die mit einem Stapel von fünfzehn Doppelschichten durchgeführt wurde, stimmen mit der DH Theorie überein. Daher können die elastischen Konstanten (Steifigkeitsmodul K_c und smektischer Kompressionsmodul B) berechnet werden.

Nachfolgend betrachten wir lokale Defekte, die auf Grund thermischer Fluktuationen erscheinen. Kurzlebige Poren treten spontan in den Doppelschichten der lamellaren Phase auf. Im Gegensatz dazu werden Verbindungen oder Durchgänge zwischen den Doppelschichten selten beobachtet. Die Verteilungen von Größe und Form der Poren werden bestimmt. Das Verhältnis zwischen Fläche der Poren a und ihrer Konturlänge c wird durch das Skalengesetz $a \propto c^{2/3}$ beschrieben (ein analoges Skalengesetz gilt für zweidimensionale geschlossene Irrfahrten). Zusätzlich ist die Oberflächenspannung null. Wir nehmen dann an, daß die Energie einer einzelnen Pore nur von ihrer Konturlänge abhängt. Diese Energie und die Linienspannung des Porenrandes werden mittels der Verteilung für die Konturlänge geschätzt. Zusätzlich zeigt eine zeitabhängige Analyse, daß die Poren innerhalb ihrer Lebensdauer nicht nennenswert diffundieren.

Schließlich wird eine lamellare Phase untersucht, in der ein hydrophiles, flexibles, lineares Polymer zwischen zwei Doppelschichten eingesetzt wurde. Zwei Typen von Polymeren werden simuliert: adsorbierende und nicht-adsorbierende. In beiden Fälle werden die Wechselwirkungen zwischen den Doppelschichten in Anwesenheit des Polymer