

На правах рукописи

Ельникова Лилия Вячеславовна

**РЕШЕТОЧНЫЕ МОДЕЛИ ЛИОТРОПНОГО
ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2006

Работа выполнена в Московском Инженерно-Физическом Институте
(Государственном Университете)

Научный руководитель: -доктор физико-математических наук,
профессор Быковский Юрий Алексеевич

Официальные оппоненты: -доктор физико-математических наук
Дмитриенко Владимир Евгеньевич,

-кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Емельяненко Александр Вячеславович

Ведущая организация: Российский Университет Дружбы Народов

Защита состоится ____ ноября 2006 года в ____ часов на заседании диссертационного совета Д.501.002.01 в Московском Государственном Университете им. М.В. Ломоносова по адресу: 119992 ГПС-2, Москва, Ленинские Горы, МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, ЮФА.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан 25 сентября 2006.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д.501.002.01

кандидат физико-математических наук

Т.В. Лаптинская

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Диссертация посвящена теоретическому изучению критических явлений в лиотропных жидких кристаллах и агрегатах с помощью решеточных моделей и их численного решения. В основу положены современные экспериментальные результаты по лиотропным переходам в некоторых системах различных классов, не имеющие законченной интерпретации.

Лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) - это системы из двух и более компонентов, поверхностно-активных веществ и растворителя, проявляющие полиморфизм при изменении концентрации (в отличие от термотропных жидких кристаллов (ТЖК), однокомпонентных систем, в которых фазовые переходы индуцированы изменением температуры). В отличие от ТЖК, ЛЖК способны образовывать надмолекулярные структуры, или термодинамически устойчивые агрегаты, предшествующие лиотропным ЖК фазам.

Актуальность проблемы исследования

ЛЖК фазы и агрегаты являются основными строительными блоками различных биологических структур (клеточных мембран, хлоропластов, миелиновых оболочек нейронов и пр.). Процессы их самосборки продолжают интенсивно изучаться до настоящего времени, стимулируемые совершенствованием методов физического эксперимента. Коллективные взаимодействия амфифильных молекул в растворах играют важную роль в образовании высокомолекулярных соединений в составе живых организмов: белков, полисахаридов и пр., в настоящее время успешно проводится синтез их новых представителей, ЛЖК структур, и исследование их мезоморфных свойств.

На сегодняшний день особенно остро ощущаются проблемы экологии и мониторинга окружающей среды, безопасности общества. Жидкие кристаллы эффективны в измерениях концентрации практически любых сред, поскольку они обладают предельно высокой чувствительностью вблизи границ фазовых переходов. С этой позиции возможности лиотропных жидких кристаллов еще не достаточно глубоко не исследованы. Весьма существенным является факт, что фазовые переходы, индуцированные изменением концентрации, позволяют обнаруживать содержание в растворах органических примесей, в том числе, наркотических препаратов и других химических соединений.

В качестве одной из технических реализаций этой возможности являются волоконно-оптические датчики (ВОД) с жидкими кристаллами, в том числе зонды и биохимические датчики концентрации на основе ЛЖК, это техническое направление сформировалось 80 гг. прошлого столетия. Масштабы внедрения ВОД концентрации растворов в медицинской и экологической диагностике оказались значительными благодаря их низкой стоимости и высоким эксплуатационным показателям.

Необходимость оценок возможностей практического применения ЛЖК систем требует от теории большей предсказательной силы. Самоорганизация материи, подобная лиотропным многокомпонентным системам, не наблюдается и не рассматривается в свете проблем термотропного мезоморфизма, развитие экспериментальных и теоретических методов изучения термотропных и лиотропных ЖК исторически происходило независимо друг от друга [a1] - [a2]. В отличие от теории ТЖК, для лиотропных ЖК из-за сложности параметра порядка необходимо расширить аппарат теории применением статистических и топологических методов, теоретико-группового анализа [a3].

В рамках феноменологической теории Ландау были обнаружены аналогии и общие закономерности в морфологии ЛЖК, по симметричным

признакам проявляющиеся в явлениях сверхпроводимости, сверхтекучести, физики ферромагнетиков и полимеров. Так, например, в теории лиотропных мембран [а3-а6], в описаниях мезоморфизма отдельных неорганических ЛЖК нематиков [а7] применяется аппарат топологических дефектов, но в целом, возможности топологических методов в теории ЛЖК недостаточно реализованы.

Многие фундаментальные проблемы естествознания взаимосвязаны с самоорганизацией лиотропных ЖК систем, а наука о ЛЖК носит междисциплинарный характер, смежный с проблемами химии, биофизики, топологии, кибернетики и других областей знания.

Целью работы является 1. Разработка модели и методов расчета термодинамических и структурных параметров фазовых переходов в ЛЖК – системах с неионными сурфактантами, наблюдаемых на эксперименте: а) для объяснения увеличения периода повторяемости ламеллярной везикулы системы димиристоилфосфатидил-холин/моноэфир додецил-октаэтиленгликоль/ вода ($DMPC/C_{12}E_8/H_2O$), б) для объяснения лиотропных переходов между ламеллярными и сетчатыми фазами симметрии $R\bar{3}m$ в системах полиоксиэтилированных соединений типа C_mEO_n/H_2O при понижении температуры. 2. Построение модели образования поверхностных доменов в замкнутых липидных везикулах системы 1,2- дипальмитоил-фосфатидилхолин/1,2- дилауроилфосфатидилхолин/ холестерол ($DPPC/DLPC/холестерол$) и исследование закономерностей их эволюции. 3. Оценка применимости различных моделей лиомезоморфизма на примере определения параметров динамических процессов в псевдочетверной системе вода/ масло/ сурфактант/ косурфактант (вода/ додецилсульфат натрия/ толуол/ бутанол) в их лиотропных переходах. 4. Анализ возможностей практического применения лиотропных систем, в частности, в волоконно-оптических

датчиках концентрации для биомедицинских и экологических задач.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

Установлен лиотропный характер самоорганизованного поведения ламеллярной фазы в системе $DMPC/C_{12}E_8/H_2O$ в рамках численного анализа модели Блюма-Капеля, найдена зависимость увеличения периода повторяемости мультиламеллярной везикулы от концентрации неионного сурфактанта $C_{12}E_8$.

Разработан метод численного решеточного анализа структурных параметров четырехкомпонентных систем типа вода/масло/сурфактант/косурфактант (вода/ додецилсульфат натрия/толуол/бутанол) в микроэмульсионных и ламеллярных агрегатах в динамических переменных.

Разработана решеточная модель лиотропного образования микро- и наноскопических липидных доменов на поверхности везикул системы липиды-холестерол ($DPPC/DLPC$ /холестерол) в условиях непрерывного перехода.

Для семейства сетчатых фаз, образующихся в водных растворах неионных сурфактантов C_mEO_n (полиоксиэтилированных соединениях $C_{16}EO_6/H_2O$ и $C_{30}EO_9/H_2O$) разработана решеточная модель перехода из ламеллярной фазы в фазу с ромбоэдрической симметрией пространственной группы $R\bar{3}m$, предшествующей гексагональной фазе при понижении температуры. Определены структурные параметры фазы $R\bar{3}m$ методом Монте-Карло на решетке, учитывающим кривизну поверхности.

На уровне моделирования предложена схема измерения pH воды на основе липидного волоконно-оптического датчика.

Апробация работы

Результаты, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на семинарах МИФИ, ИТЭФ, Института кристаллографии

РАН им. А.В. Шубникова, на IV и V Национальных конференциях по применению Рентгеновского, Синхротронного излучений, Нейтронов и Электронов для исследования материалов РСНЭ-2003, РСНЭ НАНО-2005 (Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова), на V и VII научных конференциях молодых ученых и специалистов ОИЯИ (Дубна 2001, 2003 гг.), на научных сессиях МИФИ 2000, 2001, 2003, 2004, 2005 гг., на Международной конференции "Оптика-2001" (Санкт-Петербург), II Международной конференции молодых ученых и специалистов 2003 (II International Conference Laser Optics for Young Scientists. LOYS-2003) и Международных конференциях "Оптика-2003" (Санкт-Петербург), "Фундаментальные проблемы оптики-2004" (Санкт-Петербург), на Международной конференции "Nanoscale Properties of Condensed Matter Probed by Resonance Phenomena" (NANORES-2004) в Казани, XXI Международной конференции "Нелинейные процессы в твердых телах" (RPS-21, Воронеж, 2004), Международной школе молодых ученых "IV Чистяковские чтения" (Иваново, 2004), Восьмой Европейской конференции по жидким кристаллам (Сесто, 2005) и 14 Международной конференции по внутреннему трению и механической спектроскопии (ICIFMS-14, Киото, 2005).

Публикации

По теме диссертации в научных журналах и сборниках трудов научных школ и конференций опубликованы работы [1-19].

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из пяти глав и четырех приложений общим объемом 150 страниц, включая 3 таблицы, 26 рисунков и список цитированной литературы из 229 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение

Во введении кратко сообщается об истории открытия и исследований ЛЖК фаз и агрегатов, определяется терминология и методы исследований, дается общая характеристика работы, формулируются цели работы, основные результаты и защищаемые положения, актуальность темы, новизна и практическая значимость результатов.

Глава 1

Глава представляет собой обзор литературы. В ней перечисляются основные экспериментальные методы исследования ЛЖК структур, дается вводное представление об установленной номенклатуре и топологических классах исследуемых объектов. Кратко освещаются основные теоретические подходы, применяемые для описания фазового поведения ЛЖК фаз и агрегатов. Делается акцент на микроскопические модели, связанные с возможностью численного решения [1-2], [14-15].

Глава 2

Глава посвящена моделированию фазового состояния мультиламеллярной везикулы в сильно разбавленном растворе системы $DMPC/C_{12}E_8/H_2O$, в ней используются данные экспериментов по малоугловому рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей, выполненных группой Киселева [а8] на спектрометре YuMO (ИБР-2, Дубна) и на др. установках за рубежом.

Согласно экспериментальным результатам [а8] для липидно-сурфактантного водного раствора $DMPC/C_{12}E_8/H_2O$, в мезоморфной последовательности в режиме медленного повышения температуры при

лиотропном (индуцированном добавлением сурфактанта) переходе, липидный бислой трансформируется в многослойную везикулу (рис. 1).

Мезоморфные свойства водных растворов неионных сурфактантов типа C_iE_j с липидом *DMPC* подробно рассмотрены в литературе [a9], построены фазовые диаграммы, отражающие лиотропную природу образования агрегатов и ЖК-фаз. Известные континуальные описания мембранных фаз основаны на феноменологической теории Хельфриха и Грюнера о спонтанной кривизне.

Образование новых бислоев в ламеллярных фазах может быть также интерпретировано топологическими особенностями в виде дисклинаций в смектиках (аналогичные «террасам Гранжана» в ТЖК [a10]). Однако, согласно эксперименту, данная задача не ограничивается симметрией D_2 и мотивирует построение единой модели, в рамках которой возможно описание полной серии переходов в названной тройной системе.

Кроме макроскопического континуального описания самоорганизованного поведения подобных систем существует представление свободной энергии системы в терминах микроканонического ансамбля на решетке (Ларсон, Сулливан [a11], Вайдом и Шик, Зуккерман и др.), энергия ориентационного и изотропного взаимодействий выражается через коэффициенты гамильтониана модели типа Изинга.

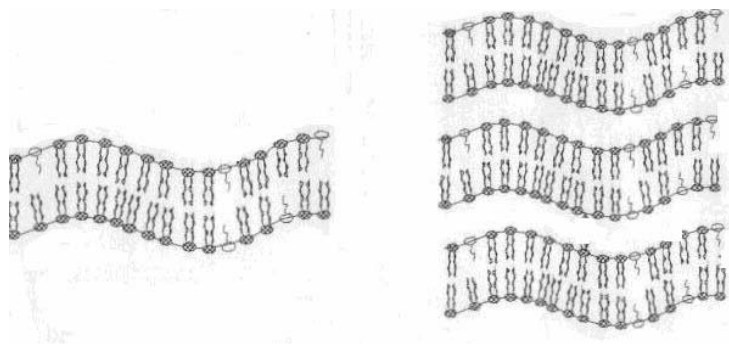


Рис.1 Фрагмент мезоморфной последовательности в $DMPC/C_{12}E_8/H_2O$ [a8].

В настоящей работе, как и в некоторых ранних интерпретациях трехкомпонентных лиотропных систем, использован гамильтониан модели Блюма-Капеля:

$$H = -J_1 \sum_{\langle uv \rangle} \sigma_u^2 \sigma_v^2 - J_2 \sum_{\langle uv \rangle} (\sigma_u^2 \sigma_v + \sigma_v^2 \sigma_u) - J_3 \sum_{\langle uv \rangle} (\sigma_v^2 \vec{s}_u \vec{r}_{uv} + \sigma_u^2 \vec{s}_v \vec{r}_{vu}) - \mu_s \sum_u (1 - \sigma_u^2) - \mu_l \sum_u \sigma_u (\sigma_u - 1) / 2, \quad (1)$$

в различных конфигурациях узлы решетки случайно заняты одним из состояний σ_i ($\sigma_i = 1, 0, -1$ соответствует молекуле воды, молекуле сурфактанта), \vec{r}_{uv} – вектор в направлении от узла u к узлу v , \vec{s}_u – вектор ориентации молекул, находящихся в соответствующих узлах, μ_s , μ_l – химические потенциалы сурфактанта и липида соответственно, J_1 , J_2 и J_3 – константы ориентационного взаимодействия [6, 8, 12].

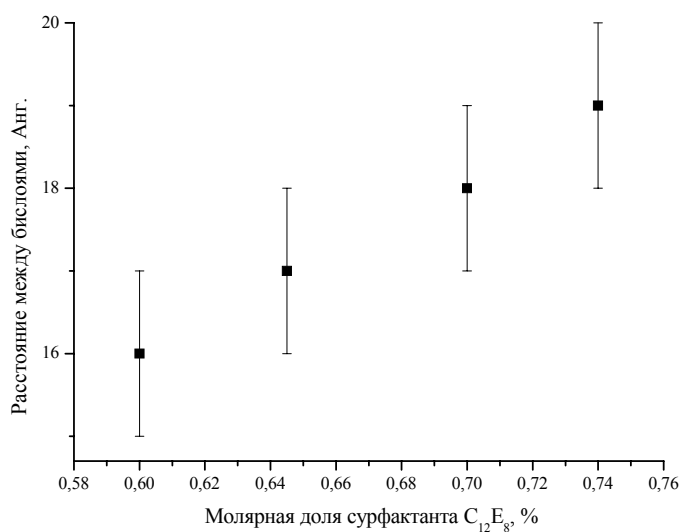


Рис. 2. Увеличение периода повторяемости мембранной везикулы *DMPC/C₁₂E₈/H₂O* по результатам моделирования Монте-Карло.

В результате проведенных в диссертации вычислений методом Монте-Карло на решеточной модели найдены основные зависимости критических величин, по распределению спиновой плотности построена эволюция

периода повторяемости мембранной везикулы в зависимости от концентрации неионного сурфактанта (рис. 2), качественно согласующаяся с другими литературными сведениями по мембранной самосборке [a12] и экспериментом.

В рамках решеточного метода переход от мембранного бислоя водного раствора липида *DMPC* к системе бислоев в тройной системе можно интерпретировать как последовательность переходов между смектической и изотропной фазами и упорядочение в смектическую фазу с другим параметром порядка, избегая при этом возникновения предсказываемой теорией среднего поля складчатой смектической фазы (рипл – фазы), существование которой для системы *DMPC/C₁₂E₈/H₂O* не согласуется с экспериментальными результатами.

Глава 3

В лиотропных системах часто оказываются существенными релаксационные процессы, связанные с перестройкой размеров сверхструктур (например, мицелл) к равновесным значениям [a2], определяемым, в том числе, значениями локальных концентраций компонентов, тогда как в ТЖК из-за отсутствия надмолекулярных структур и градиентов концентрации эти процессы несущественны.

Релаксационные процессы в лиотропной системе типа вода/масло/сурфактант/косурфактант в присутствии неорганической соли отличаются от хорошо изученной тройной системы типа вода/масло/сурфактант, что отражается на характере фазовой диаграммы. По результатам экспериментов Молле и др. [a14] по нейтронной спектроскопии спинового эха, выполненных в Гренобле, в представленной диссертации проводится численный анализ времен релаксации относительной интенсивности рассеяния в различных мицеллярных

структурах смеси вода/додецилсульфат натрия/толуол/бутанол через зависимости корреляционных функций, вычисляемых в решеточной 3D модели Изинга.

Тепловые флуктуации в масштабах корреляционной длины в микроэмульсиях были предсказаны до их экспериментального обнаружения [a15]. В области сосуществования фаз фазовой диаграммы, при молярном отношении бутанол/ додецил сульфат натрия около 0.57 мы рассматриваем влияние на капли тепловых флуктуаций, которые можно сопоставить с результатами вычислений методом ренормализационной группы (РГ) и феноменологической модели Хельффриха [a15] для всех измеряемых типов пространственных структур в температурном диапазоне 296-323 К.

Среднее смещение капли $\langle \Delta r^2(t) \rangle^{\frac{1}{2}} \sim (6D_0\tau)^{\frac{1}{2}}$, (где D_0 - короткодействующая диффузионная константа броуновского движения), определяющее эффекты различия во временах релаксации для плотной и разреженной микроэмульсий (вдали и вблизи границы раздела фаз соответственно), может быть оценено в моделировании Монте-Карло.

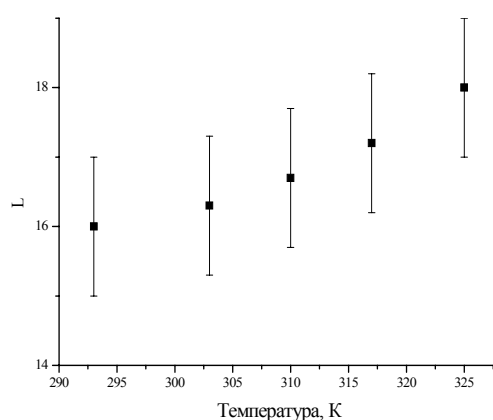


Рис. 3. Результаты численного моделирования для температурной зависимости решеточного размера на участке фазы микроэмульсии [13].

Чтобы выделить динамику капель в микроскопической модели, на

некотором шаге производится случайный выбор параметров взаимодействия J_2 , J_3 , аналогично численному анализу гамильтониана спинового стекла. Результаты численного моделирования подтверждают экспоненциальное увеличение радиуса слоя (как и набухание ламеллярной фазы) в качественном согласии с экспериментом [a14].

Глава 4

В четвертой главе изучается образование упорядоченных и неупорядоченных структур на поверхности сферических везикул в липидно-холестерольной смеси (*DPPC/DLPC*/холестерол).

В основу построения модели положены результаты экспериментов по конфокальной флуоресцентной микроскопии Фейгенсона с сотрудниками [a16], в которых исследовалась роль концентрации компонентов *DPPC/DLPC*/холестерол в образовании поверхностных доменов с характерным размером порядка 300 нм на гигантских униламеллярных везикулах GUV (рис. 4, 5), а также последующие измерения методом атомно-силовой микроскопии на модельных везикулах LUV [a17] той же системы.

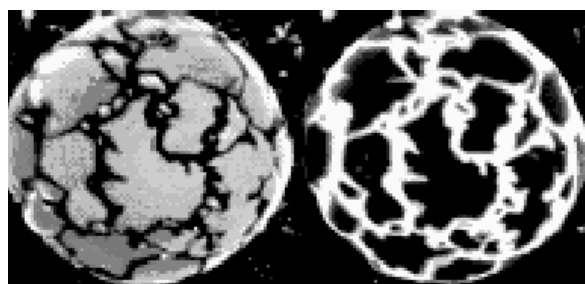


Рис. 4. Везикулы *DPPC/DLPC*/холестерол и визуализация поверхностных доменов [a16].

Структурные параметры некоторых ламеллярных фаз, связанных с этими областями, проверяются численным методом Монте-Карло [18] в рамках решеточной модели типа Изинга с учетом эффекта радиуса

гирации на каплях, который оценивается с помощью феноменологической теории. Привлекается аналогия свободной энергии мембраны с энергией вихрей в сверхпроводящих пленках [a5].

В общем виде используется высокотемпературный изингоподобный гамильтониан, аналогичный (1), нормированный на химический потенциал холестерина и использующий аналогичные целые спиновые переменные σ_i .

$$H = -J_1 \sum_{\langle uv \rangle} \sigma_u \sigma_v - J_2 \sum_{\langle uv \rangle} (\sigma_u^2 \sigma_v^2 + \sigma_v^2 \sigma_u^2) - J_3 \sum_{\langle uv \rangle} (\sigma_u^2 \sigma_v + \sigma_v^2 \sigma_u) - \mu_{l_1} \sum_u (1 - \sigma_u) - \mu_{l_2} \sum_u \sigma_u^2 \quad (2)$$

С помощью компьютерного моделирования прослежен рост поверхностных доменов в зависимости от концентрации холестерина (рис. 6).

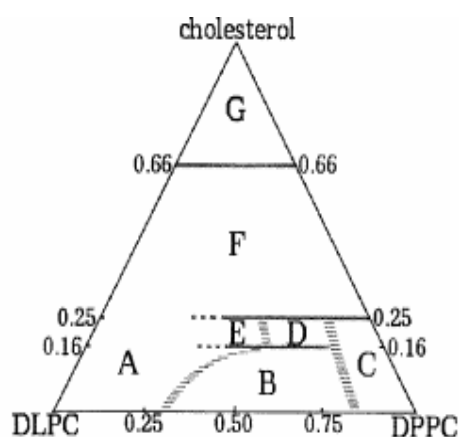


Рис. 5. Фазовая диаграмма лиотропной смеси DPPC/DLPC/холестерол при 297 К [a16]. Обозначены участки: *A*- DLPC-насыщенная флюидная ламеллярная фаза $L_{0,2}$; *B*- участок сосуществования флюидной ламеллярной фазы $L_{0,2}$ и DPPC-насыщенной упорядоченной фазы; *C* - DPPC-насыщенная упорядоченная фаза; *D* – фаза, изменяющаяся непрерывно от жесткой упорядоченной фазы около границы *C/D* до флюидоупорядоченной фазы около границы *D/E*; *E*, *F* –различные флюидоупорядоченные фазы; *G* - область сосуществования кристаллического моногидрата холестерина и глубокой ламеллярной фазой L_α

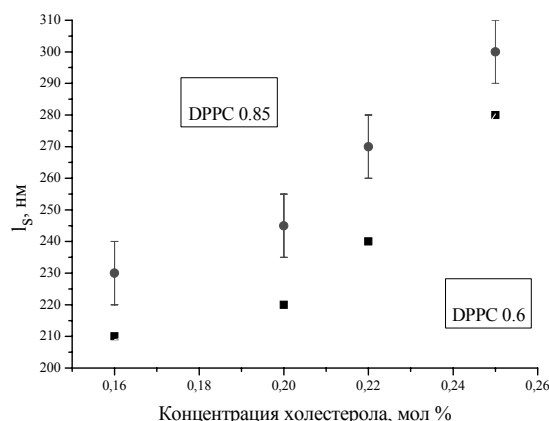


Рис. 6. Результаты вычислений размеров поверхностных доменов при увеличении концентрации холестерина, полученные с помощью метода Монте-Карло [14].

Глава 5

Рассматривается лиотропный мезоморфизм бинарных смесей неионных сурфактантов типа C_mEO_n/H_2O и метод вычисления термодинамических параметров при лиотропных переходах между ламеллярной (L_α), сетчатой фазой с пространственной ромбоэдрической симметрией $R\bar{3}m$ и гексагональной (H_1) фазой, сочетающий в себе континуальный и решеточный анализ. Нахождение структурных параметров может быть выполнено численно решеточным методом Монте-Карло [5, 16, 17].

Брукманом и др. разработан метод приближенных вычислений геометрии гироидных поверхностей [18], основанный на свойствах скелетного графа Шюена и поверхностей Шварца. С помощью этого метода можно описывать также фазы с симметрией $R\bar{3}m$, как поверхности рода 3 [a18], рис. 8, метод Брукмана использовался Холмсом при оценке структурных параметров наблюдаемых на эксперименте сетчатых фаз.

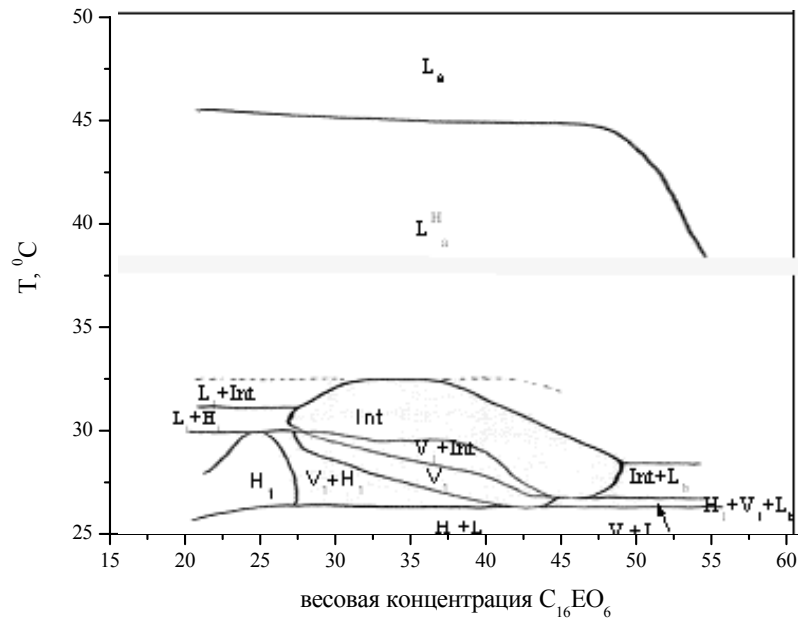


Рис. 7. Фазовая диаграмма системы $C_{16}EO_6/H_2O$ в области весовой концентрации сурфактанта 48 - 62% [a18], обозначены ламеллярная фаза (L_α), случайная *mesh* фаза (L_α^H), промежуточная (*Int.*), *bcc* - фаза (V_1), гексагональная (H_1) и гелевая фаза (L_β). Пунктирной линией выделена граница области, где фаза L_α^H становится нестабильной и вероятно сосуществование двух фаз с промежуточной фазой вдоль всего исследуемого диапазона.

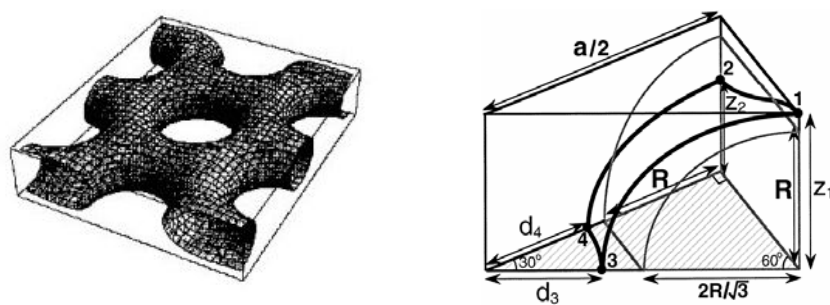


Рис. 8. Единичная структурная ячейка трехсвязной *mesh* фазы.

В качестве альтернативного метода расчета в диссертации рассмотрены случайные поверхности без самопересечений, которые конструируются на дуальной решетке [a19], что позволило вычислять

двухкомпонентный гамильтониан модели Изинга и его статистическую сумму с учетом трех типов связей при наличии дуальной решетки. Кривизна в этом случае является трехкомпонентной и нормируется действием в римановой метрике.

Гамильтониан свободной энергии на исходной решетке ОЦК имеет вид

$$H = - \sum_{\langle uv \rangle} [J_1 \sigma_u \sigma_v + \frac{1}{\sqrt{3}} J_2 (\sigma_v \vec{s}_u \vec{r}_{uv} + \sigma_u \vec{s}_v \vec{r}_{vu})] - \mu_s \sum_u (1 - \sigma_u^2), \quad (3)$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B - постоянная Больцмана и T - абсолютная температура,

спиновые переменные σ_i ($\sigma_i = \pm 1, 0$) соответствуют молекулам воды и сурфактанта, \vec{r}_{uv} - вектор в направлении от узла u к узлу v , \vec{s}_u - вектор ориентации молекул, находящихся в соответствующих узлах, μ_s - химический потенциал сурфактанта,

J_1 и J_2 - константы ориентационного взаимодействия. Гамильтониан модели, построенный на дуальной решетке, и статистическая сумма в этом случае включают в себя кривизну поверхности [19].

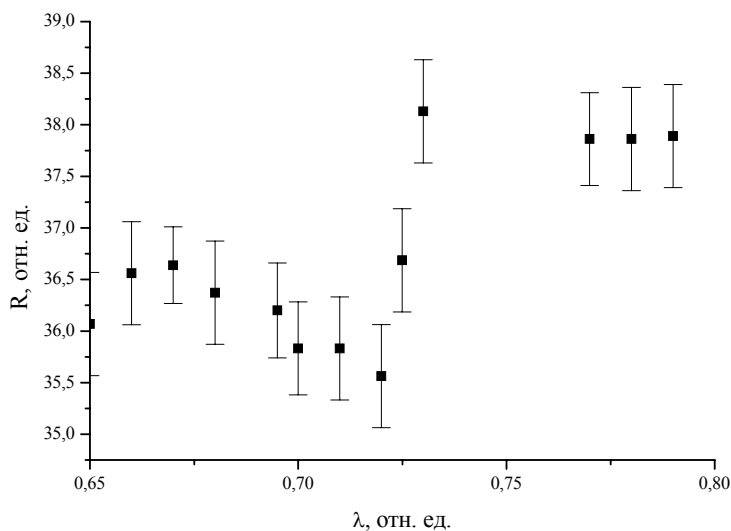


Рис. 9. Зависимость кривизны сетчатой фазы от концентрации неионного сурфактанта, построенная по результатам численного моделирования.

Результатом компьютерного моделирования методом Монте-Карло является концентрационная зависимость структурных параметров (рис. 9), имеющая качественное согласие с аналогичной зависимостью однокомпонентной усредненной средней кривизны, полученной Брукманом.

В 5 главе также оценены возможности применения нелинейной σ -модели для интерпретации эволюции сетчатых фаз [аб] и найдены энергетические соотношения между ламеллярной, гексагональной и сетчатой фазами.

В заключении сформулированы основные выводы и результаты работы.

Приложение 1 Номенклатура лиотропных ЖК фаз.

Приложение 2 Используемые структурные формулы.

Приложение 3 Блок-схемы алгоритмов Монте-Карло.

Приложение 4 Моделирование датчиков концентрации.

В этом четвертом приложении рассмотрены варианты устройств для определения pH растворов, схемы измерений включают волоконно-оптические датчики (ВОД) [1-4], [9,10]. Принцип их работы основан на смещении спектра флуоресцентной эмиссии в зависимости от лиомезоморфизма раствора липида DMPG.

Результаты работы

Для анализа лиотропного мезоморфизма системы $DMPC/C_{12}E_8/H_2O$ составлена модель типа Блюма-Капеля. Найдена зависимость увеличения периода повторяемости мультиламеллярной везикулы от концентрации неионного сурфактанта $C_{12}E_8$.

Разработан метод расчета термодинамических свойств агрегатов системы типа вода/масло/сурфактант/косурфактант в динамических

переменных с использованием гамильтониана типа спинового стекла в моделировании методом Монте-Карло.

На основе построенной спиновой модели численно оценена эволюция микро- и наноскопических поверхностных везикул в липидной смеси *DPPC/DLPC*/холестерол.

Для растворов неионных сурфактантов $C_{16}EO_6/H_2O$ и $C_{30}EO_9/H_2O$ численно промоделирован переход из ламеллярной фазы в гексагональную в фазу с ромбоэдрической симметрией $R\bar{3}m$ в рамках спиновой модели и найдены структурные параметры мезофазы.

Предложена модель липидного волоконно-оптического датчика для измерения концентрации молекул и ионов в растворителе.

Научная новизна результатов

В диссертационной работе впервые поставлена и решена задача о стабилизации ламеллярной фазы в тройной системе липида *DMPC*, воды и сурфактанта $C_{12}E_8$ в многослойной везикуле в рамках решеточной модели Блюма-Капеля. Предложена интерпретация фазового перехода из бислоя водного раствора *DMPC* в многослойную везикулу *DMPC/C₁₂E₈/H₂O*.

Впервые интерпретировано образование микро- и наноскопических поверхностных областей в везикулах системы *DPPC/DLPC*/холестерол, проходящее в условиях лиотропного перехода, индуцированного добавлением холестерина, результаты проверены численным моделированием Монте-Карло на решетке.

Разработан метод вычисления структурных параметров сетчатой фазы с симметрией $R\bar{3}m$ в системах с неионным сурфактантом типа C_mEO_n/H_2O , основанный на решеточной модели с топологическим инвариантом.

Научно-практическая ценность

Развитые в работе методы расчета могут применяться при конструировании волоконно-оптических датчиков, в частности, основанных на принципе изменения параметров излучения в зависимости от лиотропных свойств среды, на этапе выбора чувствительного элемента с требуемыми физическими и химическими свойствами.

Предсказание критического поведения лиотропных ЖК фаз и агрегатов имеет значение при синтезе новых соединений с аналогичными термодинамическими и мезоморфными свойствами.

Выводы

Как показано в главе 2, теория среднего поля неадекватно отражает характер лиотропных переходов применительно к задачам о смектических фазах в липид-сурфактантных водных растворах, использование спиновой решеточной модели позволяет уточнять структуру мезоморфных последовательностей в зависимости от состава смесей.

Микроскопический анализ (глава 3) позволяет оценивать размерные эффекты, происходящие на двух различных масштабах агрегации. В фазах микроэмульсий систем вода-масло-сурфактант-косурфактант можно проиллюстрировать эффективность решеточных моделей, сформулированных в динамических переменных, для наблюдаемых на эксперименте масштабных эффектов.

Как показано в главе 4, эффекты различной природы в липидных агрегатах, такие, как образование поверхностных доменов в везикулах и набухание ламеллярной структуры, целесообразно интерпретировать на языке спиновых решеточных моделей в сочетании с топологическим анализом.

На основе вычислений, представленных в главе 5, можно заключить о целесообразности дискретизировать в виде изинговой модели энергию случайных поверхностей без самопересечений, что позволяет вычислять параметры сетчатых лиотропных структур.

Список публикаций автора

1. Быковский Ю.А., Ельникова Л.В. Волоконно-оптические датчики концентрации примесей в воде и волоконно-оптические датчики рН // Научная сессия МИФИ-2000. Сб. науч. трудов. М. 2000, Т. 4, С. 204-205.
2. Ельникова Л.В. Жидкие кристаллы в биохимических волоконно-оптических датчиках // Научная сессия МИФИ-2001. Сб. науч. трудов. М. 2001, Т. 4, С. 231.
3. Ельникова Л.В. Принцип измерения концентрации растворов с помощью лиотропных жидких кристаллов // Сб. трудов конференции "Оптика-2001". СПб. 2001.
4. Ельникова Л.В. Измерение концентрации растворов с помощью лиотропной жидкокристаллической фазы // Пятая научная конференция молодых учёных и специалистов ОИЯИ. Дубна. 2001., С. 13.
5. Ельникова Л.В. Критические явления в лиотропных системах // Научная сессия МИФИ-2003. Сб. науч. трудов, Т. 4, С. 170-171.
6. Ельникова Л.В. Образование ламеллярных фаз лиотропных жидких кристаллов в решеточных моделях Изинга // Седьмая научная конференция молодых ученых и специалистов ОИЯИ. Тезисы докладов. Дубна 2003, С. 205-207.
7. El'nikova L.V., Ryabinkina V.A. The optical monitoring for lyotropic liquid crystalline mesophases // II International Conference Laser Optics for Young Scientists. LOYS-2003. (30.06-4.07.2003) St. Petersburg 2003.
8. Ельникова Л.В. Численное моделирование Монте Карло мезоморфных превращений в смесях фосфолипидов // IV Национальная конференция по применению Рентгеновского, Синхротронного излучений,

- Нейтронов и Электронов для исследования материалов. ИК РАН им. А.В. Шубникова. Тезисы докладов РСНЭ. Москва 2003, С. 330.
9. Ельникова Л.В. Численное моделирование мезоморфных превращений в лиотропных системах, влияющих на их оптические свойства // Оптика-2003. Труды третьей международной конференции молодых ученых и специалистов. Санкт-Петербург, 20-23 октября 2003. Под ред. проф. С.А. Козлова. С. 232.
 10. Ельникова Л.В. Мезоморфизм смеси $C_{12}EO_6/H_2O$ // Научная сессия МИФИ-2004. Сб. науч. трудов. М. 2004., Т.4., С. 190.
 11. Ельникова Л.В. Методы определения концентрации в ламеллярных фазах фосфолипидов // Сб. трудов конференции "Фундаментальные проблемы оптики-2004" (Proceeding ВРО-2004). СПб. 2004, С. 317.
 12. Ельникова Л.В. Решеточная модель образования смектических фаз в везикулах системы вода-липид-неионный сурфактант // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2005, Вып. 1-2 (11-12). С. 95 - 100.
 13. El'nikova L.V., 3D Lattice Model for the Phase Transition in a Water/Oil/Surfactant/Cosurfactant Mixture, J. Solid State Phenomena 2006, V. 115, P. 315-318.
 14. Ельникова Л.В. Наноразмерные поверхностные эффекты в липидных везикулах // V Национальная конференция по применению Рентгеновского, Синхротронного излучений, Нейтронов и Электронов для исследования материалов. Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова. Тезисы докладов РСНЭ НАНО-2005. Москва 2005, С. 207.
 15. Ельникова Л.В. Метод позитронной аннигиляции в исследованиях лиотропных агрегатов // Научная сессия МИФИ-2005. М.2005, Сб. науч. трудов, Т.4 , С. 181-183.

16. Ельникова Л.В. Локальная топология лиомезофаз и методы вычислений // Научная сессия МИФИ-2005. М.2005, Сб. науч. трудов., Т.4 , С. 233-235.
17. Ельникова Л.В. Решеточная модель образования промежуточной $R\bar{3}m$ фазы в водных смесях неионных сурфактантов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2004, Вып.2(8), С. 31-38.
18. Ельникова Л.В. Гироиды и спиновая модель образования промежуточной фазы в водных смесях неионных сурфактантов // Поверхность: Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2005, N. 8, С. 74-79.
19. El'nikova L.V. Numerical version of the area-difference elasticity model for lipid-detergent bilayer vesiculation // Materials Science and Engineering A 2006. Доступно в режиме "online" с 28 июля 2006: <http://www.sciencedirect.com/science/journal/09215093>

Список цитированной литературы

- [a1] Усольцева Н.В. Лиотропные жидкие кристаллы: химическая и надмолекулярная структура. Иван. гос. ун-т. -Иваново, 1994. - 220 С.
- [a2] Веденов А.А., Левченко Е.Б. // УФН 1983, Т. 183 (Вып. 1), С. 3-54.
- [a3] Монастырский М.И. Топология калибровочных полей и конденсированных сред. - М. ПАИМС, 1995. - 478 с.
- [a4] Кац Е.И., Монастырский М.И. // ЖЭТФ 2000, Т. 118, Вып. 6(12), С. 1476 - 1483.
- [a5] Evans R.M.L. // Phys. Rev. E. 1996, V. 53, P. 935 - 949.
- [a6] Golo V.L., Kats E.I. and Porte G. // JETP Lett. 1996, V. 64, P. 631-636.
- [a7] Sonin A.S. // J. Mater. Chem. 1998, V. 8, P. 2557-2574; Казначеев А.В.,

- Богданов М.М. и Тараскин С.А. // ЖЭТФ 2002, Т. 122, С. 68-75.
- [a8] Kiselev M.A. et al. //Proc. German-Russian User Meeting, Dubna, 1998.
- [a9] Koynova R. and Tenchov B. //Current Opinion in Colloid and Interface Science 2001, V. 6, P. 277 - 286.
- [a10] де Жен П. Физика жидких кристаллов. М. Мир, 1982. - 400 с.
- [a11] Linhananta A. and Sullivan D. E. // Phys. Rev. E. 1998, V. 57, P. 4547-4557.
- [a12] Chen C.-M. // Physica A. 2000, V. 281, P. 41-50.
- [a13] Goldstain R.E. and Lipowsky R. // Phys. Rev. L. 1988, V. 61, P. 2213 - 2216.
- [a14] Molle B., de Geyer A., Guillermo A. et al. // Phys. Rev. L. 2003, V. 90, P. 068305-068310.
- [a15] Milner S.T. and Safran S.A // Phys. Rev. A. 1987, V. 36, P. 4371 - 4379.
- [a16] Feigenson G.V. and Buboltz J.T. // Biophys. Journal 2001, V. 80, P. 2775-2788.
- [a17] Tokumasu F., Jin A.J., Feigenson G.V. and Dvorak J.A. // Biophys. Journal 2003, V. 84, P. 2609-2618.
- [a18] Leaver M. S., Fogden A., Holmes M. C. et al. // Langmuir 2001, V. 17, P. 35-46.
- [a19] Caselle M., Gliozzi F. and Vinti S. // Nucl. Phys. Proc. Suppl. 1994, V. 34, P. 726 - 729.