

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1. Cluster Monte Carlo Updating für kontinuierliche Modellsysteme	5
2. Die Monte Carlo Methode	7
2.1. Numerische Berechnung thermodynamischer Mittelwerte	7
2.2. Importance Sampling	8
2.3. Markov Chain Monte Carlo: Detaillierte Bilanz und <i>a priori</i> Wahrscheinlichkeiten	9
2.4. Cluster Monte Carlo	12
2.4.1. Der Swendsen-Wang Algorithmus	14
2.4.2. Der Wolff Algorithmus	17
3. Cluster Monte Carlo Methoden für Vielteilchensysteme im Kontinuum	21
3.1. Entropiegetriebene Phasenübergänge und das System harter Scheiben .	22
3.2. Der Algorithmus von A. Jaster	27
3.3. Der Geometrische Cluster Algorithmus	28
3.4. Der Event Chain Algorithmus	36
4. Der Avalanche Algorithmus:Grundlegende Idee	39
5. Der Avalanche Move:Algorithmische Umsetzung	43
5.1. Teilchenlawinen und Verschiebungsgraphen	44
5.2. Realisation I:Equal-Probability-Sampling	49
5.2.1. Der Cluster Monte Carlo Schritt	49
5.2.2. Cluster und Independent Sets	53
5.2.3. Algorithmus zur Erzeugung aller Cluster eines Verschiebungsgraphen	55
5.2.3.1. Reduktion der Problemgröße	55
5.2.3.2. Sukzessive Erzeugung der Independent Sets	57
5.2.3.3. Selektion zusammenhängender Cluster	59
5.2.4. Analyse	65
5.2.4.1. Algorithmische Eigenschaften	65
5.2.4.2. Performance	75
5.3. Realisation II:Non-Equal-Probability-Sampling	84
5.3.1. Vorüberlegungen	85

5.3.2.	Der Cluster Monte Carlo Schritt	88
5.3.3.	Analyse	92
5.3.3.1.	Empirischer Nachweis der Korrektheit des Algorithmus	93
5.3.3.2.	Algorithmische Eigenschaften	99
5.3.3.3.	Performance	111
5.4.	Realisation III: Preferential Sampling	126
5.4.1.	Verallgemeinerung des Non-Equal-Probability-Sampling – Erweiterung des Phasenraumes	127
5.4.2.	Der Cluster Monte Carlo Schritt	128
5.4.3.	Bevorzugt ausgewählte Cluster harter Scheiben	130
5.4.3.1.	<i>A priori</i> Wahrscheinlichkeiten gemäß Verzweigungsgrad	131
5.4.3.2.	<i>A priori</i> Wahrscheinlichkeiten gemäß Position innerhalb des Verschiebungsgraphen	141
5.4.4.	Bevorzugt ausgewählte Cluster einer binären Mischung	146

II. Monte Carlo Simulationen zur Kinetik der Adsorption von Biomolekülen 157

6. Motivation und Einführung in die Proteinadsorption 159

6.1.	Experimentelle Ergebnisse	161
6.2.	Proteine	165
6.2.1.	Allgemeine Eigenschaften	165
6.2.2.	Experimentell verwendete Proteine	169
6.3.	Substrate	171
6.4.	Relevante Wechselwirkungen	173
6.4.1.	Elektrostatische Wechselwirkung	173
6.4.2.	Van der Waals-Wechselwirkung	174
6.4.3.	Hydrophobe Wechselwirkung	175
6.5.	Charakteristische Prozesse der Ausbildung eines Proteinfilms	176
6.5.1.	Konformationsänderungen	176
6.5.2.	Reorientierungseffekte	177
6.5.3.	Reversibilität	178
6.5.4.	Laterale Mobilität und zweidimensionale Ordnung	178
6.6.	Fragestellungen	179

7. Zur Wahl des numerischen Ansatzes 183

8. Das Simulationsmodell 187

8.1.	Charakterisierung des Modellansatzes	187
8.2.	Die Simulationsbox	189
8.3.	Wechselwirkungspotentiale	191
8.3.1.	Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung	193
8.3.2.	Teilchen-Oberflächen-Wechselwirkung	195

8.4.	Monte Carlo Schritte	197
8.4.1.	Translation der Teilchen	198
8.4.2.	Austausch mit einem Teilchenreservoir	199
8.4.3.	Der Zeitschritt	201
8.5.	Modellierung adsorptionsinduzierter Konformationsänderungen	201
8.5.1.	Interner Freiheitsgrad der Teilchenkonformation	202
8.5.2.	Konformationsabhängige Wechselwirkungen	203
8.5.3.	Monte Carlo Schritt zur Konformationsänderung	208
8.6.	Weitere Modellerweiterungen	209
8.6.1.	Laterale Mobilität adsorbierter Teilchen	210
8.6.2.	Fluktuationen in der Konformation: Polydispersität	210
8.6.3.	Teilchen mit innerer Struktur	211
8.7.	Messgrößen	213
8.8.	Ablauf der Simulation	215
9.	Simulationsergebnisse	217
9.1.	Irreversible Adsorption im Rahmen des Basismodells	218
9.1.1.	Adsorptionskinetik	218
9.1.2.	Struktur der Adsorptionsschicht und 2d-Ordnungsübergang . .	220
9.1.3.	Fazit	223
9.2.	Adsorptionsinduzierte Konformationsänderungen	224
9.2.1.	(Quasi-) Irreversible Konformationsänderungen: Konzentrationsabhängigkeit der stationären Bedeckung	226
9.2.2.	Reversible Konformationsänderungen als kollektives Phänomen	234
9.2.3.	Robustheit des kollektiven Phänomens adsorptionsinduzierter Konformationsänderungen	239
9.2.3.1.	Variation der Zeitskala für Konformationsübergänge . .	239
9.2.3.2.	Variation der lateralen Mobilität adsorbierter Teilchen .	242
9.2.3.3.	Variation der Proteinkonzentration	246
9.2.3.4.	Variation der Wechselwirkungen	248
9.2.4.	Fazit	261
9.3.	Geometrie und innere Struktur der Teilchen	266
9.3.1.	Polydispersität bzgl. des sterischen Radius	266
9.3.2.	Asphärische Geometrie der Wechselwirkungen	269
9.3.3.	Fazit	272
10.	Zusammenfassung und Ausblick	275
A.	Allgemeine simulationstechnische Details	289
B.	Die Performance des Standard Ein-Teilchen Algorithmus	295

C. Beispiele zur Cluster Auswahl auf dem Verschiebungsgraphen	299
C.1. Sukzessive Erzeugung der Independent Sets am Beispiel	299
C.2. Ein Beispiel zur ungleichwahrscheinlichen Cluster Auswahl	301
D. Wechselwirkungen innerhalb der DLVO-Theorie	305
D.1. Elektrische Doppelschicht-Wechselwirkung	306
D.1.1. Derjaguin-Methode	308
D.1.2. Linear Superposition Approximation (LSA)	309
D.2. Van der Waals-Wechselwirkung	312
E. Modellparameter und ihre Standardwerte im Überblick	315
Abbildungsverzeichnis	317
Tabellenverzeichnis	325
Literaturverzeichnis	327
Kurzzusammenfassung / Abstract	345