

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი

## მანუქარ გვარამია

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი

ქიმიის დეპარტამენტი

დისერტაცია თემაზე:

### მოდელური მემბრანების გამოყენება სხვადასხვა პროცესის შესასწავლად და მათი დახასიათება ნეიტრონული გაბნევის და რეოლოგიური მეთოდებით

წარმოდგენილი ქიმიის დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად

სადოქტორო პროგრამის კოორდინატორი: შოთა სამსონია

ქიმ. მეცნ. დოქტორი, პროფესორი, აკადემიკოსი

სამეცნიერო ხელმძღვანელები:

ქიმ. მეცნ. დოქტორი, ასოც. პროფესორი (თსუ) მარინა რუხაძე

ფილოსოფიის დოქტორი ფიზიკაში

(იულისის ნეიტრონული გაბნევის კვლევითი ცენტრი) ჰენრიხ ფრილინგჰაუსი

ფილოსოფიის დოქტორი ქიმიაში

(იულისის ნეიტრონული გაბნევის კვლევითი ცენტრი) გაეტანო მანჯიაპია

თბილისი

2018 წელი

Manuchar Gvaramia

Faculty of Exact and Natural Sciences  
Chemistry Department

**Application of Model Membranes in Different Experiments and  
their Characterization with Neutron Scattering and Rheological  
Methods**

PhD Thesis

Supervisors:

Coordinator of Doctoral Program:

Doctor of Chemical Sciences,  
Professor, Full Member of the Georgian National  
Academy of Sciences

Shota Samsonia

Scientific Supervisor:  
Doctor of Chemical Sciences,  
Associate Professor

Marina Rukhadze

PhD in Physics  
JCNS (SANS and soft matter group leader)

Henrich Frielinghaus

PhD in Chemistry  
JCNS

Gaetano Mangiapia

Tbilisi  
2018

## Acknowledgement

This thesis would not have been possible without the help and support of numerous people at Juelich Center of Neutron Science and at Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, who have been with me in my PhD journey, that almost ended. I cannot possibly thank everyone enough. I thank Prof. Marina Rukhadze, for mentoring and encouraging me, without her constant support many things would not have been possible.

While the big part of getting here with a thesis, would not have been happened, had I not met Dr. Henrich Frielinghaus in the Juelich Center of Neutron Science (JCNS). If not for his willingness to have me work with him on this project, I would not have been able to take this small step into science. I am highly indebted to Dr. Henrich Frielinghaus who has been very patient and very brilliant. Finally, Dr. Gaetano Mangiapia has been the one, from whom I have learnt the art and science of experimentation that a successful experiment lies not only in planning well, but also in thinking through every small step you do. Dr. Gaetano Mangiapia who provided lots of information, who has instructed me in the fitting process, and assisted me in the neutron scattering and rheology experiment. As supervisors, both Henrich and Gaetano have taught me the value of working in teams. While their excitement with good science was infectious, their high standards, I can only hope to match some day.

And could I even imagine life without all the friends I made while in JCNS? Life in JCNS would not have been the same without a few friends nurtured for several years, and which shaped my thinking over these years.

My roommate Dr. Baohu Wu who is a good company.

I will cherish the time spent at JCNS, in the company of so many scientists, leaders in their respective fields.

I would like to thank Shota Rustaveli Georgian National Science Foundation for financial support. Finally, without love and support of my family, I would not be who I am today. Nothing in the world can match their devotion.

I dedicate my PhD thesis to my mother - Makvala Sharia.

*„Prediction is very difficult especially if it is about the future“.*

*Niels Bohr*

## მადლიერება

უამრავი ადამიანის თანადგომის გარეშე იულიხის ნეიტრონული გაბნევის კვლევით ცენტრსა და ივანე ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტში, ჩემი სადოქტორო ნამუშევარი ვერ განხორციელდებოდა. ეს ადამიანები იყვნენ ჩემს გვერდით სადოქტორო თემაზე მუშაობის მთელ პერიოდში, რომელიც თითქმის დასასრულს მიუახლოვდა. მე მადლობას ვუხდის პროფესორ მარინა რუხაძეს სამეცნიერო ხელმძღვანელობისთვის, გამხმნეებისთვის, მისი მუდმივი დახმარების და თანადგომის გარეშე ბევრი კარგი რამ ჩემს გარშემო არ მოხდებოდა.

უდიდესი ნაწილი ჩემი სადოქტორო თემის ვერ განხორციელდებოდა, რომ არ შევხვედრილიყავი დოქტორ ჰენრიხ ფრილინგჰაუსს იულიხის ნეიტრონული გაბნევის კვლევით ცენტრში, რომ არა მისი თანხმობა მემუშავა მის ჯგუფში კონკრეტულ სამეცნიერო პრობლემაზე, მე ვერ შევძლებდი ამ პატარა ნაბიჯის გადადგმას მეცნიერებაში. მადლიერი ვარ დოქტორ ჰენრიხ ფრილინგჰაუსის, რომელიც ამ პერიოდის განმავლობაში იყო ძალიან თავაზიანი, ყურადღებიანი და უბრალოდ არაჩვეულებრივი ადამიანი. მადლობას ვუხდის დოქტორ გაეტანო მანჯიაპიას, რომლისგანაც ვისწავლე ძალიან ბევრი რამ, კერძოდ, მან მასწავლა ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული მონაცემების ანალიზი სპეციალური კომპიუტერული პროგრამით, ასევე ის მეხმარებოდა ნეიტრონული გაბნევისა და რეოლოგიური ექსპერიმენტების ჩატარებაში.

რა თქმა უნდა, ძალიან გამიჭირდებოდა იმ რამოდენიმე წლის გატარება იულიხის ნეიტრონული გაბნევის ცენტრში, რომ არა ჩემი რამოდენიმე მეგობარი, რომლებთან ერთადაც წლების განმავლობაში ვმუშაობდი იულიხის ნეიტრონული გაბნევის კვლევით ცენტრში. მინდა განსაკუთრებულად ავღნიშნო ჩემი ოფისის თანაზიარი, შესანიშნავი ადამიანი დოქტორი ბაჰუ ვუ. ყველას მადლობა.

ძალიან მადლიერი ვარ იმ წლების, რომლებიც გავატარე იულიხის ნეიტრონული გაბნევის ცენტრში, თავიანთი სფეროს მსოფლიოს ლიდერი მეცნიერების გარემოცვაში.

მინდა მადლობა გადავუხადო შოთა რუსთაველის ეროვნულ სამეცნიერო ფონდს ფინანსური მხარდაჭერისთვის.

ბოლოს, რომ არა ჩემი ოჯახის მხარდაჭერა და სიყვარული მე არ ვიქნებოდი ის, რაც ვარ დღეს. ჩემს მიმართ ჩემი მშობლების მიერ გაწეული ამაგის გადახდა შეუძლებელია.

სადოქტორო ნაშრომს ვუძღვნი ჩემს დედას - მაყვალა შარიას.

## ანოტაცია

სამკურნალო საშუალებების ლიპიდურ ბიშრესთან ურთიერთქმედების დახასიათება წარმოადგენს უმნიშვნელოვანეს საფეხურს უჯრედულ მემბრანაზე წამლების მოქმედების მექანიზმების ასახსნელად, ამასთან წამლების გვერდითი ეფექტების შესასწავლად, რომლებსაც მნიშვნელოვანწილად განაპირობებს უჯრედული მემბრანების სტრუქტურული პარამეტრების ცვლილებები.

გამოკვლეულია სამკურნალო საშუალებების ბენზოკაინის და პრონანონოლის ურთიერთქმედების გავლენა ფოსფოლიპიდის საფუძველზე მომზადებული უჯრედული მემბრანის სტრუქტურაზე ნეიტრონული რეფლექტომეტრით, მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, მცირე და ულტრამცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით. შესწავლილია მოდელოური უჯრედული მემბრანის დინამიკური თვისებები, გაზომილია ფოსფოლიპიდური მემბრანის ფლუქტუაციები ფაზათაშორის ზედაპირთან ახლოს. შეფასებულია ფოსფოლიპიდის სხვადასხვა ფენების ლოკალური ურთიერთქმედება და ხახუნის მახასიათებელი პარამეტრები მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიის გამოყენებით, სადაც მიღევადი (ევანესცენციული) ტალღები იძლევა საშუალებას დაფიქსირდეს ფოსფოლიპიდის ფლუქტუაციები სხვადასხვა ფენებს შორის გამყოფ ზედაპირზე. კვლევის ამ მეთოდით შესაძლებელი გახდა აღმოგვეჩინა მოლეკულური ფლუქტუაციები მიკროელექტრონვოლტის უბანში. ნეიტრონული რეზონატორის გამოყენებით გამოვლენილ იქნა ფოსფოლიპიდური მემბრანის ადგენების ისეთი უბნები, რომლებიც ჩვენს კვლევებამდე არ იყო დეტექტირებული.

კომპლექსური სითხეების მოდელეზად მიკროემულსიების გამოყენება და მათ სიბლანტეზე ნანოზომის ნაწილაკების გავლენის შესწავლას თეორიული მნიშვნელობის გარდა, უდიდესი პრაქტიკული მნიშვნელობაც აქვს. სფერული ნანონაწილაკები იჩენენ სითხეების სიბლანტის მოდიფიკაციის უნარს. მათი დამატება სითხეებზე ძირითადად იწვევს სიბლანტის მატებას. არასფერული ნანონაწილაკების გავლენა სითხეების სიბლანტეზე უფრო რთულია, მაგრამ საბოლოო ეფექტი მათ შემთხვევაშიც არის სიბლანტის მატება. ჩვენ შემთხვევაში კომპლექსურ სითხეებზე დამატებული იქნა განსხვავებული დიამეტრის თევზისებრი ნაწილაკები კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე მათი გავლენის და ამ გავლენის მექანიზმის შესწავლის მიზნით. ჩვენს მიერ გამოვლენილია ნედლი ნავთობის სიბლანტის მკვეთრი შემცირება თევზისებრი ნანონაწილაკების თანაობისას. კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე თევზის მსგავსი ნანონაწილაკების ამ განსხვავებულმა ეფექტმა შეიძლება ჰპოვოს საინტერესო პრაქტიკული გამოყენება.

## Annotation

Cell membranes play a fundamental role in protecting the cell from its surroundings, in addition to host many proteins with fundamental biological tasks. Drugs can alter the structure of cell membranes. This in turn can affect their function and cause undesirable side effects. The structural changes in cell membranes caused by drugs have not yet been sufficiently investigated. A study of drug/lipid interactions is a necessary and important step to fully clarify the role and action mechanism of active ingredients, as well as to shed light on possible complications caused by drug overdose. In this thesis, the influence of Benzocaine and Propranolol drugs on the structure of L- $\alpha$ -phosphatidylcholines-based membranes has been investigated by means of neutron reflectivity, grazing incidence small angle neutron scattering, and small/ultra-small angle neutron scattering.

We present an approach to measure dynamic membrane properties of phospholipid membranes close to an interface. As an example we show results of the membrane dynamics of a phospholipid membrane multilayer-stack on a solid substrate (silicon). On this sample we were able to measure local interaction and friction parameters using *Grazing Incidence Neutron Spin Echo Spectroscopy* (GINSES), where an evanescent neutron wave probes the fluctuations close to a rigid interface. With this method it is possible to access length scales in the nano to micrometer region as well as energies in the  $\mu\text{eV}$  range. Using a new neutron resonator structure we achieved the required intensity gain for this experiment. During our investigations we found an excitation mode of the phospholipid membrane that has not been reported previously and only became visible using the new methodology.

Spherical particles are the most studied viscosity modifiers, they are well known to increase the viscosity only. Extended studies and theories on non-spherical particles find a more complicated behavior, but still a steady increase. Involving platelets in combination with complex fluids displays an even more complex scenario that we analyze experimentally and theoretically as a function of platelet diameter, to find the concepts behind. Using this toolbox we were able to decrease the viscosity of crude oils although solid particles were added. This apparent contradiction might find a wider range of applications.

## შინაარსი

შინაარსი.....	7
შესავალი.....	11
1. ლიტერატურის მიმოხილვა.....	14
1.1. ბიომემბრანების მნიშვნელობა და ძირითადი გამოწვევები მათი სტრუქტურის ფუნდამენტური შესწავლის პროცესში.....	14
1.1.1. ბიომემბრანის ამფიფილური მოლეკულები.....	16
1.2. ამფიფილური მოლეკულები გამხსნელებში .....	17
1.2.1. ამფიფილური მოლეკულების სპონტანური დრეკადობა და ჩალაგების მოდელი ...	19
1.2.2. ამფიფილური აგრეგატების გეომეტრიის ცვლილების ენერგეტიკული დახასიათება.....	21
1.3. უჯრედის და ბიომემბრანების ზოგადი დახასიათება .....	22
1.3.1. უჯრედული მემბრანა.....	24
1.3.2. ლიპიდები.....	25
1.3.3. ბიომემბრანების მოდელური სისტემები. ....	26
1.4. ლიპიდური ორმაგი შრე, ბიომემბრანები.....	27
1.4.1. ბიომემბრანების აგებულება და დინამიკა .....	27
1.4.2. ლიპიდების დინამიკა.....	29
1.4.3. ლატერალური წნევის ფორმები.....	30
1.4.4. ლიპიდური ორმაგი შრე როგორც სელექტიური გამტარი ბარიერი .....	30
1.5. მემბრანების ჰიდრატაცია.....	31
1.5.1. მემბრანების ლატერალური ჰეტეროგენულობა .....	32
1.5.2. ლიპიდებსა და პროტეინებს შორის ურთიერთქმედება.....	33
1.5.3. ფაზური გარდაქმნები .....	34

1.5.4. ლიპიდებსა და წამლებს შორის ურთიერთქმედება.....	36
1.5.5. ზოგადი დახასიათება მიკროემულსიების.....	39
1.6. თეორიული მიმოხილვა.....	40
1.6.1. მიკროემულსიები.....	41
1.6.2. ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები (ზან).....	41
1.6.3. მიცელები.....	42
1.6.4. სტრუქტურა და დინამიკა.....	42
1.6.5. ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური ფაზა.....	45
1.6.6. მიკროემულსიური ფაზათაშორისი ფენების ელასტიურობა და მოლუნვადობა.....	46
1.6.7. მიკროემულსიების ზომები.....	48
2. ნეიტრონული გაბნევის და სინათლის დინამიური გაბნევის, ზოგადი მიმოხილვა.....	48
2.1. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა.....	49
2.2. ნეიტრონული გაბნევა.....	50
2.3. გაბნევა ფიქსირებული ატომბირთვიდან.....	51
2.3.1. ნეიტრონული გაბნევა ნივთიერებიდან.....	55
2.3.2. დიდი ზომის მქონე მოლეკულების სტრუქტურის კვლევა გაბნევის ექსპერიმენტით.....	66
2.3.3. არაელასტიური გაბნევა.....	68
2.4. ფოტონ კორელაციური სპექტროსკოპია.....	71
2.5. თავის მოკლე რეზიუმე(შეჯამება).....	73
3. ექსპერიმენტული ნაწილი შედეგები და მათი განსჯა.....	74
3.1. მცირე კუთხეების ნეიტრონული და რენტგენის სხივების გაბნევა.....	74
3.2. ტოიბნერ-სტრეის მოდელი ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემებისთვის.....	76
3.3. წვეთოვანი სტრუქტურის მიკროემულსიური სისტემების ანალიზის სტრატეგია გაბნევის მეთოდებით.....	77
3.4. ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპია.....	78
3.4.1. მიკროემულსიების დინამიკა.....	83



3.5. რეფლექტომეტრიული მეთოდი.....	83
3.6. რეოლოგია.....	87
3.6.1. ძირითადი რეოლოგიური ტერმინების დახასიათება.....	88
3.6.2. განმარტებები.....	89
3.6.3. დინამიური სიბლანტე.....	90
3.7. ბენზოკაინისა და პროპანონოლის გავლენა ფოსფოლიპიდების ორმაგ ლიპიდურ შრეზე.....	91
3.7.1. ექსპერიმენტული ნაწილი.....	93
3.7.2. ნიმუშების მომზადება ნეიტრონ რეფლექტომეტრიული და მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტისთვის.....	94
3.7.3. ნიმუშების მომზადება მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტისთვის.....	95
3.7.4. ნეიტრონ რეფლექტომეტრი და მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტი.....	96
3.7.5. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტი.....	98
3.7.6. შედეგები.....	99
3.7.7. შედეგების განსჯა.....	108
3.7.8. დასკვნები ,თავი 3.7-ისთვის.....	124
3.8. კომპლექსური სითხეების სიბლანტის ცვლილება ნანონაწილაკების დამატებით.....	124
3.8.1. სამუშაოს ძირითადი მოტივაცია, ზოგადი მიმოხილვა. ....	125
3.8.2. თეორია.....	126
3.8.3. ლამელარული მემბრანების თეორია. ....	128
3.8.4. გამოყენებული მასალები. ....	129
3.8.5. გამოყენებული ინსტრუმენტები.....	130
3.8.6. რეოლოგიური შედეგები .....	131
3.8.7. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული შედეგები .....	133
3.8.8. რეოლოგიური ექსპერიმენტული შედეგების განსჯა.....	137
3.8.9. ნედლი ნავთობიდან მიღებული ექსპერიმენტული შედეგები .....	140

3.8.10. დამატებითი რეოლოგიური მონაცემები კომპლექსური სითხეების სიბლანტის ცვლილებაზე ნანონაწილაკების დამატებისას.....	143
3.8.11. დასკვნები, თავი 3.8-ისთვის.....	144
3.9. მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდი, როგორც ახალი შესაძლებლობა ტრიბოლოგიური მექანიზმის ნანოდონეზე დასახასიათებლად .....	144
3.9.1. მეთოდი.....	147
3.9.2. ექსპერიმენტული დეტალები.....	147
3.9.3. რეზონატორი.....	149
3.9.4. გამოყენებული მასალა..	150
3.9.5. ექსპერიმენტული ანალიზის სტრატეგია.....	151
3.9.6. შედეგები.....	151
3.9.7. შედარება კომპიუტერულ სიმულაციასთან.....	153
3.9.8. შედეგების განსჯა.....	155
დასკვნები.....	161
გამოყენებული ლიტერატურა: .....	163

## შესავალი

**ნაშრომის აქტუალობა.** ადვილად დეფორმირებადი (soft matter) ნივთიერებები ჩვენი ყოველდღიური პრაქტიკის ნაწილია. ადვილად დეფორმირებადი ნივთიერებები ფიზიკური მეცნიერების ახალი ინტერდისციპლინარული მიმართულებაა, რომელიც აერთიანებს ნივთიერებების შემდეგ კლასიკურ ტიპებს, ამფიფილური მოლეკულები, პოლიმერები, კოლოიდური სისტემები და ბიოლოგიური მოლეკულები. აქედან გამომდინარე კვლევის ეს მიმართულება დღესდღეისობით აქტუალურია და თემის ინტერდისციპლინური ხასიათის გამო განსხვავებული პროფესიის მეცნიერები მუშაობენ ამ სფეროში ბიოლოგიური, ქიმიური თუ ფიზიკური შინაარსის სამეცნიერო პრობლემებზე.

ნივთიერებათა ზომები, რომელსაც აერთიანებს კვლევის ეს მიმართულება, მერყეობს 1ნმ-დან 1მკმ ზომებში. მათ ადვილად დეფორმირებად ნივთიერებებს იმიტომ ვუწოდებთ, რომ მათი სტრუქტურის შემადგენელ ელემენტებს შორის არსებობს სუსტი ურთიერთქმედებები და ამ სისტემების სტრუქტურები გარე ზემოქმედების მიმართ არიან ძალიან მგრძობიარე. ადვილად დეფორმირებადი ნივთიერებების თვისებები რადიკალურად განსხვავდება მყარი ნივთიერებების თვისებებისგან. სპეციფიური კლასი ადვილად დეფორმირებადი ნივთიერებებში გახლავთ ბიოლოგიური მოლეკულები და კომპლექსური სითხეები, კომპლექსური სითხეების და ბიოლოგიური მოლეკულების გარკვეული ჯგუფის მოდელად ჩვენ შეგვიძლია განვიხილოთ მიკროემულსიები და მოდელური მემბრანული სისტემები.

ყოველი პროკარიოტული და ეუკარიოტული უჯრედი შეიცავს უჯრედულ მემბრანას, რომელიც მას იცავს გარე ფაქტორებისგან და წარმოადგენს სელექტიურ ბარიერს სხვადასხვა ტიპის მოლეკულებისთვის, ასევე უჯრედულ მემბრანას გარკვეული ინფორმაციული ტრასპორტის ფუნქციაც აქვს და უჯრედის შიგა და გარე ნაწილს შორის კომუნიკაციის საშუალებას წარმოადგენს. უჯრედში მიმდინარე უამრავ ბიოლოგიურ პროცესში უჯრედულ მემბრანას აქვს ძალიან მნიშვნელოვანი როლი. სხვადასხვა სახის დაავადებები როგორც არის სიმსივნე, ალცჰაიმერი, გარკვეული ფორმით დაკავშირებულია უჯრედული მემბრანის ბიოლოგიური ფუნქციის ცვლილებასთან, ხოლო ბიომოლეკულების ბიოლოგიური ფუნქცია იცვლება მხოლოდ მაშინ, როდესაც ადგილი აქვს მათი სტრუქტურის ცვლილებას. ბიომემბრანების ფუნქციაზე და ამ მოლეკულების დინამიკაზე ინტერესი საკმაოდ მაღალია, როგორც ქიმიკოსებში, ასევე ბიოლოგებში, ბიოფიზიკოსებში, ბიოტექნოლოგებში, ფარმაცოლოგებში, მედიცინაში და ა.შ. უჯრედული მემბრანის სტრუქტურული ცვლილებების შესწავლა მასზე სხვადასხვა გარემო პირობების ზემოქმედებისას არის საკმაოდ რთული სამეცნიერო პრობლემა, რაც განპირობებულია იმით რომ ბიომოლეკულა სადაც

მოთავსებულია უჯრედული მემბრანა კომპლექსური სისტემა და მისი დახასიათება ამგვარ სისტემაში ძალიან რთულია.

**სამუშაოს მიზანი.** დასმული პრობლემებისგან გამომდინარე, სადისერტაციო ნაშრომის მიზანს წარმოადგენდა უჯრედული მემბრანის მოდელური სისტემების შექმნა, განსხვავებული სტრუქტურის მქონე სამკურნალო წამლების ურთიერთქმედება შექმნილ მოდელებთან, წამლების გვერდითი ეფექტების შესწავლა და მათი დაკავშირება უჯრედული მემბრანის სტრუქტურულ პარამეტრებთან.

ნაშრომის მიზანს წარმოადგენდა აგრეთვე მიკროემულსიების, როგორც კომპლექსური სითხეების ერთ-ერთი საუკეთესო მოდელური სისტემის ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების სიბლანტეზე დამოკიდებულების შესწავლა.

**ნაშრომის ძირითადი შედეგები, მათი სამეცნიერო და პრაქტიკული მნიშვნელობა.** გამოკვლეულია ბენზოკაინის და პროპანოლის მოქმედების პრინციპი ფოსფოლიპიდის ორმაგ ლიპიდურ შრეზე. დადგენილია, რომ ბენზოკაინს და პროპანოლს აქვს განსხვავებული ეფექტი ფოსფოლიპიდის ორმაგი ლიპიდური შრის სტრუქტურაზე, კერძოდ, ბენზოკაინი იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის მოლეკულის შიგა ნეგატიურ ღუნვადობას, რის შედეგადაც ადგილი აქვს ლიპიდური შრის ჰიდროფობური ჯაჭვის უფრო მჭიდრო ჩალაგებას და ჰიდროფილურ თავებს შორის დისტანციის შემცირებას. ასევე აღსანიშნავია, რომ ბენზოკაინის დამატებისას ადგილი აქვს ფოსფოლიპიდის მხოლოდ მცირე გადახრას იდეალური პარალელური ლამელარული განლაგებისგან.

პროპანოლის შემთხვევაში იმის გამო, რომ ის არის გარკვეული მუხტის მატარებელი, იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის მკვეთრ ღუნვადობას, რაც იდენტიფიცირდა ნეიტრონ-რეფლექტივური და მცირე სიღრმეებზე მოქმედი მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით. ლიპიდური ორმაგი შრის აღნიშნული ღუნვადობა იყო ფხვნილის მსგავსი ლამელარული სტრუქტურების ფორმირების ძირითადი მიზეზი. კლასიკური ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით ანალიზისას კი ჩანს, რომ ფოსფოლიპიდებზე პროპანოლის დამატება იწვევს უნილამელარული სტრუქტურების ფორმირებას. ფოსფოლიპიდების სტრუქტურის ასეთი მოდიფიკაცია შესაძლებელია გახდეს საფუძველი უჯრედული პროტეინების მობილობის ცვლილების, მათი ბიოლოგიური ფუნქციის შემცირების ან გაზრდის ან გახდეს უჯრედის სერიოზულად დაზიანების მიზეზი.

წამალი-ლიპიდის ურთიერთქმედების შესწავლა მნიშვნელოვანია, რათა გამოვლენილ იქნას წამლების მოქმედების ახალი პრინციპები, რომლებიც შეძლებენ წამლების ფიზიოლოგიური აქტივობების გაუმჯობესებას, რაც თავისთავად ნიშნავს მცირე დოზების მიღებას და ნაკლებ გვერდით ეფექტებს.

ჩვენი სამუშაოს მეორე ნაწილში ჩვენ შევძელით მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით დაგვედგინა მექანიზმი თუ როგორ ამცირებს ფირფიტისებური თიხის ნანონაწილაკები კომპლექსური სითხეების სიბლანტეს.

კერძოდ, მარტივი სითხეების შემთხვევაში თიხის ფირფიტისებრი ნაწილაკების დიამეტრის ზრდისას სითხის სიბლანტე იზრდება, ხოლო კომპლექსური სითხეების შემთხვევაში თიხის ფირფიტისებური ნაწილაკების ზრდისას სიბლანტე მცირდება. მარტივი სითხეების სიბლანტის ზრდა თიხის ფირფიტისებური ნაწილაკების დიამეტრის ზრდისას განპირობებულია იმით, რომ მემბრანა ხდება უფრო ძლიერი. ყოველ შემთხვევაში სიბლანტის ზრდა ორივე მოყვანილ სიტუაციაში არის უზარმაზარი, რაც ძალიან საინტერესოა პრაქტიკული გამოყენებისთვის.

კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე თეფშის მსგავსი ნანონაწილაკების ამ განსხვავებულმა ეფექტმა შეიძლება ჰპოვოს საინტერესო პრაქტიკული გამოყენება

ბიოლოგიური და სამედიცინო მეცნიერებისთვის. ძალიან მნიშვნელოვანია ბიოლოგიური მოლეკულების რეოლოგიური თვისებების გაგება და ასევე ამ მოლეკულების მრავალფენოვან სისტემების ფაზათაშორის ზედაპირებზე ხახუნის პროცესის მექანიზმების ფუნდამენტური გააზრება. მსგავსი ცოდნა იძლევა პრაქტიკული პრობლემების უკეთ გადაჭრის შესაძლებლობას, მაგალითად: მემბრანების დიფუზიის პროცესი წამლების გადატანისას, ან ზოგადად მემბრანების გამტარიანობის უნარი დამოკიდებულია მათ რეოლოგიურ თვისებებზე და ამ მემბრანის მრავალფენოვანი სისტემის ფენების ზედაპირებს შორის ხახუნის თავისებურებებზე. ჩვენ შევძელით გაგვეზომა ფოსფოლიპიდის სხვადასხვა ფენების ლოკალური ურთიერთქმედება და ხახუნის მახასიათებელი პარამეტრები მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიის გამოყენებით. სადაც ევანესცენცული ტალღები იძლევა საშუალებას დაფიქსირებული იქნეს ფოსფოლიპიდის ფლუქტუაციები სხვადასხვა ფენებს შორის გამყოფ ზედაპირზე. კვლევის ამ მეთოდით შესაძლებელია დავაფიქსიროთ ნანომეტრის ზომების მქონე მოლეკულები ხოლო ენერგეტიკული თვალსაზრისით ეს მეთოდი იძლევა საშუალებას დავაფიქსიროთ ისეთი მოლეკულური ფლუქტუაციები რომლებიც მდებარეობს მიკროელექტონ ვოლტის რეგიონში. ნეიტრონული რეზონატორის გამოყენება გვადლევს საშუალებას ნეიტრონების ინტენსივობა გავზარდოთ რამოდენიმე მაგნიტუდით. ჩვენი ამ ექსპერიმენტისას მიკვლევული იქნა ფოსფოლიპიდური მემბრანის ალგუნების უბანები რომელიც შესაძლებელი გახდა მხოლოდ ამ მეთოდის გამოყენებისას და ის დეტექტირებული არ იყო სხვა ექსპერიმენტული მეთოდით.

**სამეცნიერო პუბლიკაციები.** დისერტაციის ირგვლივ გამოქვეყნებულია 3 სამეცნიერო ნაშრომი იმპაქტ-ფაქტორის მქონე ჟურნალებში, ერთი ნაშრომი გაგზავნილია გამოსაქვეყნებლად.

**სამეცნიერო კონფერენციებში მონაწილეობა.** დისერტაციაში წარმოდგენილი შედეგები მოხსენდა 5 საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციას, საფრანგეთში, იტალიაში, პორტუგალიაში, ესპანეთში და გერმანიაში.

**ნაშრომის მოცულობა და სტრუქტურა.** სადისერტაციო ნაშრომი მოიცავს 180 გვერდს, შედგება შემდეგი ძირითადი თავებისგან: შესავალი, ლიტერატურის მიმოხილვა, ექსპერიმენტული ნაწილი, შედეგები და მათი განსჯა, დასკვნები. ციტირებული ლიტერატურის ნუსხა 216.

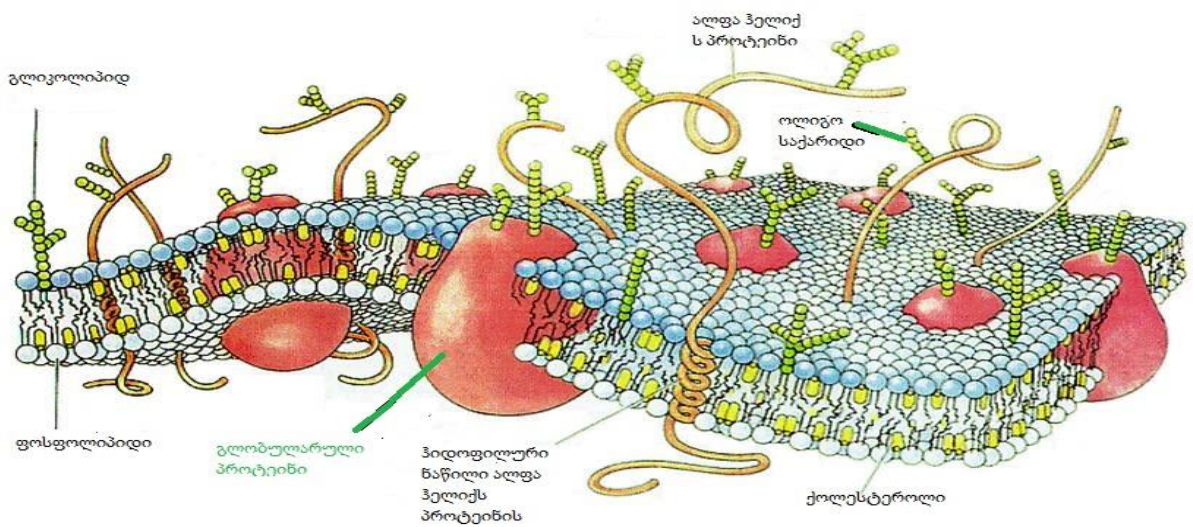
ნაშრომის ექსპერიმენტული ნაწილი შესრულდა იულიხის ნეიტრონული გაბნევის კვლევით ცენტრში, კერძოდ მიუნხენის კვლევით რეაქტორზე (FRM2), ექსპერიმენტის ნაწილი ასევე გაკეთებული იქნა LLB Saclay (საკლი, საფრანგეთი) კვლევით რეაქტორზე და აშშ-ის ნეიტრონულ ცენტრში (Oak Ridge Neutron Spallation Source).

## **1. ლიტერატურის მიმოხილვა**

### **1.1. ბიომემბრანების მნიშვნელობა და ძირითადი გამოწვევები მათი სტრუქტურის ფუნდამენტური შესწავლის პროცესში**

ბიომემბრანები წარმოადგენს მკაცრად შერჩევით გამტარ ბარიერებს, რომელთა სტრუქტურას წარმოადგენენ ორგანოზომილებიანი სითხური მოზაიკური მოდელის სახით, რომელიც აგებულია ფოსფოლიპიდებისგან და სპეციფიური პროტეინებისგან [2, 6]. ბიომემბრანების ტიპური სქემა გამოსახულია ნახ. 1.1. სპეციფიურ პროტეინებს ბიომემბრანების ბიოლოგიური ფუნქციის შესრულებაში ძალიან დიდი როლი ეკისრებათ. სპეციფიური პროტეინების საშუალებით უჯრედული მემბრანა ახერხებს ნივთიერებების შერჩევით ტრანსპორტს, განასხვავებს მათ მოლეკულური მუხტის მიხედვით და ასევე მონაწილეობას იღებს უჯრედში მიმდინარე ენერჯიების კონვერტაციაში. კერძოდ, რომ არა სპეციფიური პროტეინები, რომლებიც გვხვდება ბიომემბრანების შემადგენლობაში, უჯრედული მემბრანა ვერ მიიღებდა მონაწილეობას ზემოთ ჩამოთვლილ ძირითად ბიოლოგიურ პროცესებში. მიუხედავად მათი ასეთი დიდი მნიშვნელობისა, მაღალი

გარჩევითობით უჯრედული მემბრანის სპეციფიური პროტეინების 88 სტრუქტურაა ცნობილი, აქედან 9 სტრუქტურა მხოლოდ რამოდენიმე წლის წინ დადგინდა[9]. ეს არის ძალიან მცირე რიცხვი, თუ გავითვალისწინებთ ამ პროტეინების ჰიდროფილური ჯგუფების სტრუქტურებს, რომელთა რაოდენობაა მარტო 30000 [10] და ასევე პროტეინების მონაცემთა ბანკს. ([www.pdb.org](http://www.pdb.org).) ბიომემბრანების სპეციფიური პროტეინების სტრუქტურის დადგენა წარმოადგენს ერთ-ერთ მნიშვნელოვან გამოწვევას დღევანდელი სამეცნიერო საზოგადოებისთვის [2, 11].



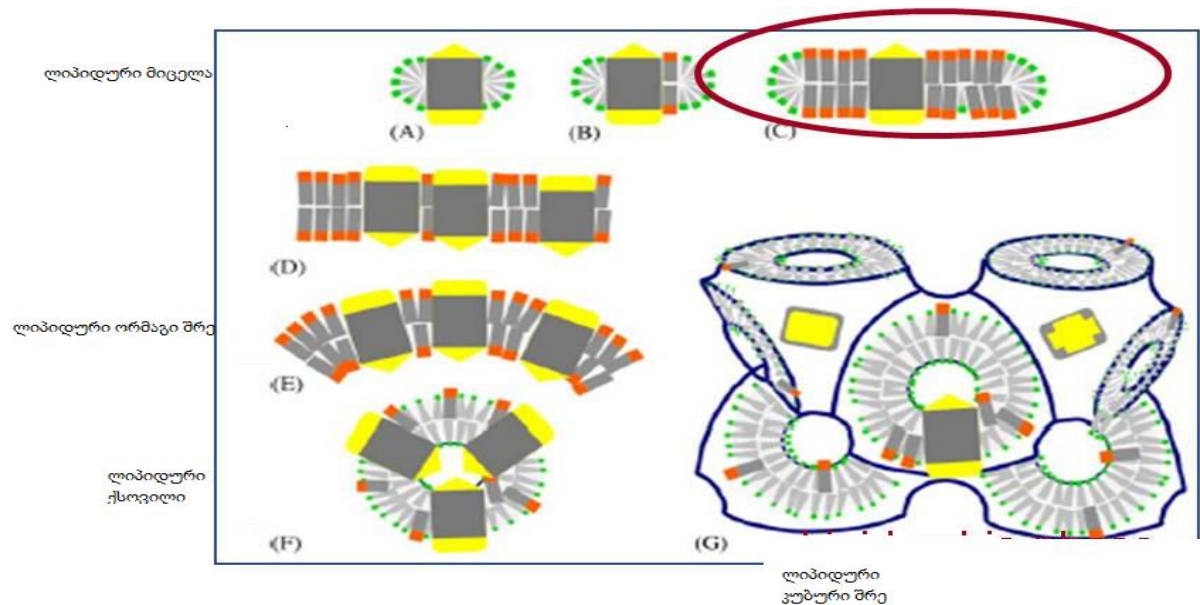
ნახაზი 1.1. მემბრანის ორმაგი ლიპიდური შრე, ფოსფოლიპიდითა და სპეციფიური პროტეინებით (სურათი აღებულია NIST -ის ოფიციალური ვებგვერდიდან).

ძირითად სირთულეს ბიომემბრანების სპეციფიური პროტეინების შესწავლისას ქმნის მათი ამფიფილური ბუნება ( ჰიდროფილური და ჰიდროფობური ნაწილების არსებობა მოლეკულაში), რაც განაპირობებს ამ მოლეკულების სპეციფიურ თვისებებს. აღნიშნული სპეციფიური თვისებების ფუნდამენტური გაგება იძლევა საშუალებას გავარკვიოთ წამლების მოქმედების მექანიზმი ბიომემბრანებთან. სწორედ ამისთვის საჭიროა დეტალურად იქნას შესწავლილი ის ფაზური გარდაქმნები რომლებსაც ადგილი ექნება წამლისა და მემბრანის ურთიერთქმედებისას, რათა შევძლოთ წამლით თერაპიისას შემდგომი პროცესების პროგნოზირება და უფრო

ეფექტური სამკურნალო საშუალებების სტრუქტურების შექმნა, რაც მნიშვნელოვანია როგორც გამოყენებითი, ასევე ფუნდამენტური კვლევების კუთხით.

### 1.1.1. ბიომემბრანის ამფიფილური მოლეკულები.

ბიომემბრანების ამფიფილური მოლეკულების შესასწავლად, მეცნიერები მიმართავენ რამოდენიმე ტაქტიკას. ერთერთი ასეთი ტაქტიკა არის მოდელური სისტემების შექმნა, რომელიც დიდი სიზუსტით მიმსგავსებული იქნება ბიომემბრანის ჩვენთვის შესასწავლად საინტერესო მოლეკულის აღნაგობასთან. ამ მიზნით დღეს ექსპერიმენტებში გამოყენებულ მოლეკულების ცხრილი ნაჩვენებია ნახაზზე 1.2.



სურათი 1.2. ბიომემბრანების შესწავლის სხვადასხვა ტაქტიკა მოცემულია ლიტერატურა (21).

უმარტივესი მოდელური სისტემებია მიცელები, დეტერგენტები და ფოსფოლიპიდები. მიცელების შემთხვევაში ადგილი აქვს ელასტიურობის მკვეთრ შემცირებას და სახეზეა ლიპიდური ორმაგი შრის სტრუქტურის ოდნავ სახეცვლილი ვარიანტი, რაც ბიომემბრანების მთლიანად იდეალურ მოდელურ სისტემადაც არ შეიძლება ჩაითვალოს. ამ კონკრეტულ შემთხვევაში უფრო ზუსტი მოდელური სისტემა არის ლამელარული სტრუქტურის მქონე ფოსფოლიპიდები, რომლებიც ზუსტად იმეორებენ იმ თვისებების უმეტესობას რაც დამახასიათებელია ბიომემბრანის ამფიფილური მოლეკულებისთვის.



## 1.2. ამფიფილური მოლეკულები გამხსნელებში

ფოსფოლიპიდები წარმოადგენს ბიოლოგიურ ამფიფილურ მოლეკულას, რომელსაც გააჩნია როგორც ჰიდროფილური ასევე ჰიდროფობური ნაწილი თავისი მოლეკულის შემადგენლობაში. ამფიფილური მოლეკულები ხშირად გამოიყენებიან, როგორც ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები და დეტერგენტები ( მათ აქვთ უნარი მოლეკულის ზედაპირული თვისებების ცვლილების) ამფიფილური მოლეკულების კლასიფიკაცია ეყრდნობა მათი ჰიდროფილური თავების მოლეკულურ მუხტს. ამის მიხედვით განარჩევენ იონურ, კათიონურ და ცვიტერიონურ ამფიფილებს. ამ მოლეკულებს ახასიათებთ თვითაგრეგაციის უნარი გამხსნელებში, რის საფუძველზეც ამ მოლეკულების უამრავი საინტერესო თვისებები და სხვადასხვა სახის გეომეტრიები აღმოჩენილი მეცნიერების მიერ. გარკვეული რაოდენობით ამფიფილური მოლეკულები ხსნადია წყალში, ხოლო წყალში ხსნადობის რაოდენობრივი ზღვარი დამოკიდებულია ამფიფილური მოლეკულის ნახშირბადოვანი ჯაჭვის სიგრძეზე, ჰიდროფილური ჯგუფის მუხტზე და გახსნის პირობებზე ( იგულისხმება ტემპერატურა და pH). თუ ამფიფილური მოლეკულური აგრეგატების რიცხვი იზრდება გამხსნელში, მაშინ ადგილი აქვს მიცელების ფორმირებას აგრეგირებული ამფიფილების მკაცრად განსაზღვრულ კონცენტრაციაზე. ხოლო იმ მინიმალურ კონცენტრაციას, რომელზედაც პირველად ფორმირდება გამხსნელში მიცელები, ეწოდება მიცელების წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაცია. სხვადასხვა ამფიფილური მოლეკულისთვის მიცელების წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაცია სხვადასხვაა. ორჯაჭვიანი ცვიტერიონურ ამფიფილებს მიცელების წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაცია აქვთ ძალიან დაბალი ( $10^{-10}$  მოლი) მაშინ, როცა ერთჯაჭვიან ზან-ებს მიცელების წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაცია აქვთ  $10^{-4} - 10^{-1}$  მოლი. ჰიდროფობური ძალები განაპირობებენ ფოსფოლიპიდები/ზან მოლეკულების აგრეგაციას, რომელიც განპირობებულია ენტროპიული ეფექტის ზრდით, რასაც იწვევს წყალბადური ბმით დაკავშირებული წყლის მოლეკულა [12, 13]. თავის მხრივ ჰიდროფობური ძალები მიისწრაფიან ამფიფილური მოლეკულის ჰიდროფილური ჯგუფებისგან გამოსაყოფად, მაგრამ აქვეა საწინააღმდეგო ძალები, რომლებიც ჰიდროფილური ძალების სახელითაა ცნობილი, რომელიც უზრუნველყოფს პოლარული მოლეკულების ამფიფილურ მოლეკულის თავებთან კონტაქტს და ამ ფორმით ახერხებს მცირე ნაწილებად აგრეგაციას. ტენფორდის და ისრაელაშვილის თეორიის მიხედვით მსგავსი აგრეგატების ფორმირება გახლავთ შებრუნებული რეაქცია ინდივიდუალურ მონომერებსა და აგრეგატებს შორის[14]

$$(1.1) \quad nA \Leftrightarrow An$$

სადაც  $A$  არის მონომერი ხოლო  $A_n$  აგრეგატი რომელიც შეიცავს  $n$  რაოდენობის მონომერს. წონასწორობის პირობებში ქიმიური პოტენციალი სხვადასხვა ზომის ( $n=1, 2, 3, \dots$ ) აგრეგატების ერთმანეთის ტოლია. მაშინ, ეს ყველაფერი შემდეგნაირად შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ.

$$(1.2) \quad \mu_1^0 + k_B T \log(X_1) = \mu_2^0 + k_B T \log\left(\frac{X_2}{2}\right) = \mu_n^0 + K_B T \log\left(\frac{X_n}{N}\right)$$

სადაც  $\mu_n^0$  არის თავისუფალი ენერგია  $n$  მონომერებისგან აგრეგირებული აგრეგატის, ხოლო  $X_n$  არის კონკრეტული აგრეგატის მოლური წილი გამხსნელში. როცა აგრეგატები არის ძალიან დიდი, მაშინ აღნიშნული ფორმულა შეიძლება გადავწეროთ შემდეგნაირად:  $\mu_n^0 - \mu_1^0 = k_B T \ln(\text{CMC})$ . ამ ფორმულიდან ჩანს, რომ თავისუფალი ენერგია და მიცელების წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაცია ურთიერთდაკავშირებული სიდიდეებია. თავისუფალი ენერგია  $\mu_n^0$  იცვლება სისტემაში აგრეგირებული  $n$  მონომერების რაოდენობის მიხედვით. ძირითადი პირობა იმისთვის, რომ აგრეგაციის პროცესი მოხდეს, აუცილებელია რომ თავისუფალი ენერგია  $\mu_n^0$  მცირდებოდეს აგრეგირებული  $n$  მონომერების რაოდენობის ზრდასთან ერთად. თავისუფალი ენერგიის და აგრეგირებული მონომერების რაოდენობის ურთიერთდამოკიდებულება აგრეგატების ფიზიკურ თვისებებზე მსჯელობის საშუალებას იძლევა, კერძოდ აგრეგატების ზომაზე და მათ პოლიდისპერსიულობაზე იძლევა წარმოდგენას[13].

მიცელური აგრეგატების ფორმირება კარგი გამოსავალია იმისთვის, რომ ამფიფილური მოლეკულის ჰიდროფობური და ჰიდროფილური ნაწილები არ იყვნენ ერთმანეთთან შეხებაში. ამ გზით აგრეგირებული მიცელური აგრეგატები შეიძლება იყოს სხვადასხვა გეომეტრიის, სფერული, ცილინდრული, ჰექსაგონალური და ა.შ. ენტროპიის ზრდა იწვევს მცირე მიცელური აგრეგატების წარმოქმნას ამფიფილების ჰიდროფილურ თავებთან, ხოლო ამ მონომერების კონცენტრაციის ზრდა სფერული მიცელებიდან გარდაიქმნება ცილინდრულ მიცელებად, ხოლო მონომერების კონცენტრაციის შემდგომი ზრდა გამოიწვევს ცილინდრული გეომეტრიის ლამელარულ გეომეტრიაში გადასვლას[15]. ეს არის ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებების თვით-აგრეგაციის ძირითადი მახასიათებელი, თუმცა ამფიფილების მიცელური აგრეგატების გეომეტრიულ ფორმას ძირითადად განსაზღვრავს თვით ამ მონომერების გეომეტრიული ფორმა და მათი აგრეგაციის ბმის სიდიდე. მონომერების ბმის სიდიდე და მათი სპონტანური დრეკადობა, რომელიც განსაზღვრავს აგრეგატების ლოკალურ გეომეტრიას, იქნება განხილული შემდეგ თავში.

### 1.2.1. ამფიფილური მოლეკულების სპონტანური დრეკადობა და ჩალაგების მოდელი

ამფიფილური მოლეკულების თვითაგრეგაცია როგორც „საწინააღმდეგო ძალების“ ეფექტი, ამფიფილური მოლეკულის კუდის ჰიდროფობური ძალები და ამფიფილური მოლეკულის თავების[12] გეომეტრიული ჩალაგება, ფუნდამენტურად იქნა გამოსახული ზან-ების მონომერის ჩალაგების პარამეტრით.  $P = V/|a|$  სადაც  $V$ ,  $a$ ,  $l$  წარმოადგენს ამფიფილური მოლეკულების მოცულობას, თავის ზომას და კუდის სიგრძეს[13, 15]. მარტივი ერთ კომპონენტანი სისტემებისთვის ჩალაგების პარამეტრსა და აგრეგატების გეომეტრიულ ფორმას შორის არსებობს შემდეგი ურთიერთდამოკიდებულება:

$V/|a| < 1/3$  გლობულარული მიცელები

$1/3 < V/|a| < 1/2$  წაგრძელებული მიცელები

$1/2 < V/|a| < 1$  ორმაგი შრე ( ლამელა)

ამ ურთიერთდამოკიდებულებით ნათლად ჩანს, რომ ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებების აგრეგატების გეომეტრიული ფორმები პირდაპირ არის დამოკიდებული ზან-ების ჰიდროფილურ და ჰიდროფობურ ჯგუფებზე. ჰიდროფილური თავის ზომები დიდი აქვთ ამფიფილურ მოლეკულებს, რომლებსაც ჰიდროფილურ თავებად აქვთ დიდი ზომის ქიმიური ჯგუფები მიბმული ან მათი ჰიდროფილური თავები ატარებს გარკვეულ მუხტს, შედეგად კი ადგილი აქვს ცილინდრული ან სფერული მიცელების ფორმირებას. ხოლო ის ამფიფილური მოლეკულები, რომლებსაც აქვთ უფრო გრძელი ან ორჯაჭვიანი ნახშირწყალბადური კუდები, ლამელარული ფორმის მიცელური აგრეგატების ფორმირებას იწვევენ. ამფიფილური მონომერების ჩალაგების პარამეტრი შეიძლება შეიცვალოს მარილების დამატებისას, ისინი იწვევენ ელექტროსტატიკურ ზიზღს ამფიფილური მოლეკულის თავებს შორის, რაც იწვევს მათი  $a$  (ჰიდროფილური თავების ზომა) სიდიდის შემცირებას და ადგილი აქვს სხვადასხვა გეომეტრიის ფორმის მქონე მიცელების ფორმირებას იონური ზედაპირული ნივთიერების თანაობისას [30]. იგივე ეფექტი ანუ ვგულისხმობთ ამფიფილური მოლეკულების ჩალაგების პარამეტრის ცვლილებას, შეიძლება გამოიწვიოს თუ სხვადასხვა ჩალაგების პარამეტრის მქონე ზედაპირულად აქტიურ ნივთიერებას და ლიპიდს შევურევთ ერთმანეთს. მაგალითად თუ ერთმანეთს შეურევთ ზან-ის ჩალაგების პარამეტრი  $v/|a|=3$ , ხოლო ლიპიდის ჩალაგების პარამეტრი  $v/|a|=1$ , მაშინ ეფექტური ჩალაგების პარამეტრი შეგვიძლია გამოვთვალოთ შემდეგი ფორმულით:

$$(1.3) \quad \left(\frac{V}{al}\right)_{eff} = \frac{(1/3)X_s + 1(X_L)}{X_s + X_L}$$

სადაც  $x_s$  და  $x_l$  ზედაპირულად აქტიური ნივთიერების და ლიპიდის მოლური წილებია შესაბამისად. ამფიფილური მოლეკულების ფაზების ამგვარი განვითარება გვხვდება უამრავ სხვადასხვა სისტემებში[15].

ამფიფილური მოლეკულის მონომერებისგან, მოლეკულური ურთიერთქმედებით მიცელების ფორმირებისას ადგილი აქვს თავისუფალი ენერგიის  $\mu_n^0$  შემცირებას [13, 16, 17]. ჰიდროფობური ურთიერთქმედება ამფიფილურ მოლეკულის ნახშირწყალბადოვან ჯაჭვზე იწვევს მათ აგრეგაციას, ხოლო საწინააღმდეგო ძალები მოქმედებს ამფიფილური მოლეკულის ჰიდროფილურ თავებზე, რაც იწვევს მათ განზიდვას ნახშირწყალბადური ჯაჭვისგან. ამ დროს სისტემის ჯამური თავისუფალი ენერგია შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგი ფორმულით.

$$(1.3) \quad \mu_n^0 = \gamma \cdot \alpha + (C / \alpha)$$

სადაც  $\gamma$  არის ეფექტური ზედაპირული დაჭიმულობა წყლის მოლეკულასა და ნახშირწყალბადებს შორის, ხოლო  $C$  არის მუდმივა. როგორც ამ ფორმულიდან ჩანს, თავისუფალი ენერგიის შემცირება ხელს უწყობს ოპტიმალური რადიუსის მქონე მიცელური აგრეგატების ჰიდროფილური თავების ფორმირებას. ამფიფილური მოლეკულების ჩალაგების პარამეტრით ზოგჯერ შესაძლებელია გარკვეული წარმოდგენის შექმნა მიცელების გეომეტრიაზე, თუმცა ეს მეთოდი არ უნდა იქნას აღქმული როგორც უნიკალური მეთოდი ამფიფილური აგრეგატების გეომეტრიის შესაფასებლად [15]. ჩვენ ასევე შეგვიძლია ვთქვათ რომ ჩალაგების პარამეტრის სიდიდესა და ამფიფილური მოლეკულების ლოკალურ მოლუნვის სიდიდეს შორის არსებობს ფუნქციური კავშირი რომელიც შემდეგნაირად შეგვიძლია გამოვსახოთ.

$$(1.4) \quad \frac{V}{al} = 1 - Hl + \frac{Kl^2}{3}$$

სადაც  $H$  და  $K$  არიან ძირითადი  $(C_1+C_2)$  და გაუსის  $(C_1C_2)$  მოლუნვის პარამეტრები, შესაბამისად ისეთი ზედაპირებისთვის რომელთაც აქვთ მოლუნვის რადიუსი  $R_1^{-1} = C_1$  და  $R_2^{-1} = C_2$ . მაგალითად  $R$  რადიუსის მქონე სფერული ნაწილაკისთვის (ძირითადი და გაუსური მოლუნვის სიდიდე არის  $1/R$  და  $1/R^2$ ) სადაც ამფიფილური მოლეკულის ჯაჭვის სიგრძე რადიუსის ტოლია მაშინ ჩალაგების პარამეტრი  $P=1/3$ . ფორმულა 1.5 გვაჩვენებს რომ მთავარი და გაუსური მოლუნვის სიდიდეები შეიძლება შეიცვალოს იმგვარად

რომ არ ქონდეს ზეგავლენა ჩალაგების პარამეტრის სიდიდის ცვლილებაზე. ზოგადად ჩალაგების პარამეტრი წარმოადგენს ამფიფილური მოლეკულის ლოკალური “მოლუნვადობის შემზღვეველს“ მაშინ როდესაც ამფიფილური მოლეკულების აგრეგატების გეომეტრიულ ფორმა დამოკიდებულია თავისუფალი ენერჯის მინიმალური სიდიდეზე.

### 1.2.2. ამფიფილური აგრეგატების გეომეტრიის ცვლილების ენერგეტიკული დახასიათება

მოლეკულების ფავორიტული (ენერგეტიკულად მომგებიანი) გეომეტრიული ფორმიდან სხვა გეომეტრიულ ფორმაში გადაყვანა მოითხოვს ენერჯის დახარჯვას. შესაძლებელია ამ ენერჯის სიდიდის მიახლოებითი გამოთვლა. ფავორიტული გეომეტრიული ფორმა, გულისხმობს აგრეთვე მოლეკულის ფავორიტული ჩალაგების პარამეტრს  $p = V/al$ , მისი სხვა გეომეტრიაში გადასვლის ენერგეტიკულ გზაზე შეიძლება წარმოდგენა შევიქმნათ ამფიფილური მოლეკულების მოლუნვის ენერჯით, რომელიც მოწოდებული იქნა ჰელფრიხის მიერ[4].

$$(1.5) \quad f_{bend} = k \left( \frac{V}{al_0} - \frac{V}{al} \right)^2$$

სადაც  $p = (V/al)$  ძირითადი, აქტუალური ჩალაგების პარამეტრია ამფიფილური მოლეკულისთვის გარკვეულ აგრეგირებულ სისტემაში, ხოლო  $k$  იძლევა წარმოდგენას ამფიფილური მოლეკულის ელასტიურობის სიდიდეზე.

ზოგადად ჩვენ შეგვიძლია ვთქვათ რომ მოლუნვის ენერჯის თეორული მოდელი იძლევა შესაძლებლობას ავლწეროთ ლამელარული, ორმაგი ლიპიდური, ვეზიკულას და სხვა მსგავსი აგრეგირებული სისტემებისთვის. აგრეთვე ეს თეორიული მოდელი გვაძლევს შესაძლებლობას აგრეგირებული ზედაპირების თავისუფალი ენერჯია გამოტახული იქნეს ძირითადი და გაუსური მოლუნვის სიდიდეებით

$$(1.6) \quad f = \frac{1}{2} k \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - \frac{2}{r_0} \right)^2 + \bar{k} \left( \frac{1}{R_1 R_2} \right)$$

სადაც  $k$  და  $\bar{k}$  არის ძირითად და გაუსის მოლუნვასთან დაკავშირებული მუდმივები. რომელებიც აღწერილია ფორმულა 1.5-ში.

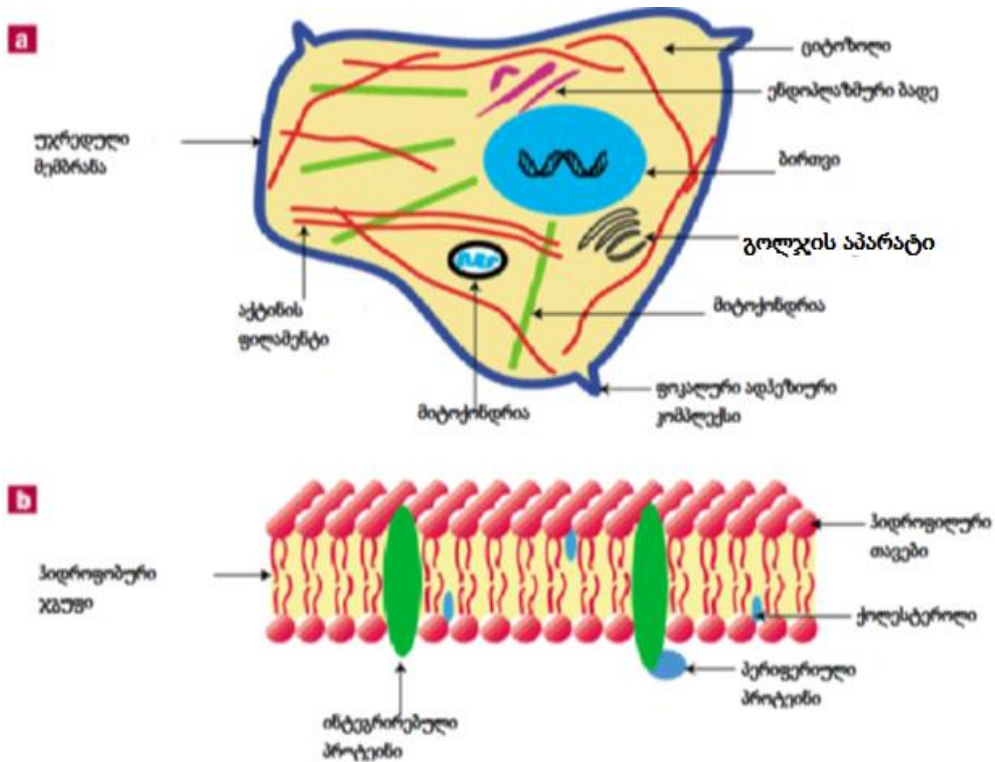
სპონტანური მოლუნვის კოეფიციენტი  $1/r_0$  ნულისგან განსხვავებულია, როცა გვაქვს ლიპიდური ორმაგი შრის ორივე დაბოლოებაზე არასიმეტრიული ჯგუფები მიბმული. ამფიფილური მოლეკულების მორფოლოგიაზე

წარმოდგენის შექმნა შესაძლებელია ელასტიურობის მუდმივის და მოლუნვის მუდმივის სიდიდეებით. ენერგია, რომელიც საჭიროა ორმაგი შრის სპონტანური მოლუნვის თავიდან ასაცილებლად პირდაპირპროპორციულია  $k$  სიდიდისა, ხოლო ენერგია რომელიც საჭიროა ორმაგი შრის დეფორმაციისთვის პირდაპირპროპორციულია  $\bar{k}$  სიდიდის [15]. თეორიულად თუ  $-2k < \bar{k} < 0$  (თუ ჩავთვლით რომ  $k$  არის დადებითი) მაშინ მემბრანები წარმოქმნიან ლამელარულ ფორმებს, ხოლო როცა  $\bar{k} < k$  მაშინ მემბრანებს ურჩევნიათ სფერული გეომეტრიის ფორმირება. როგორც ვხედავთ  $\bar{k}$  თამაშობს გიდის როლს მემბრანების გეომეტრიული ფორმების ტრანსფორმაციაში, მაგრამ მას არ აქვს არანაირი ზეგავლენა ფიქსირებული გეომეტრიის მქონე მემბრანებში მიმდინარე მოლუნვის ფლუქტუაციებზე [15].

### 1.3. უჯრედის და ბიომემბრანების ზოგადი დახასიათება

ყოველი ცოცხალი სისტემა ხასიათდება თავისთავად მიმდინარე სპეციფიური ბიოლოგიური პროცესებისგან, რაც მათ განასხვავებს არაორგანული არაცოცხალი სისტემებისგან. ცოცხალი სისტემების ერთ-ერთ უმცირეს ნაწილაკად მიჩნეულია უჯრედები, რომელთაც აქვს მათთვის დამახასიათებელი სპეციფიური ბიოლოგიური ფუნქცია და ცოცხალი ორგანიზმის სხვადასხვა უჯრედი ერთმანეთისგან განსხვავდება სტრუქტურითა და ბიოლოგიური ფუნქციით. უმარტივესი მაგალითი გახლავთ უმარტივესი ბაქტერიები და სისხლის წითელი უჯრედები განსხვავებული ბიოლოგიური ფუნქციებით. უფრო რთული ფუნქციების და სტრუქტურის უჯრედებს ვხვდებით ცოცხალი ორგანიზმის ქსოვილებში და ორგანოებში, რომელთა ბიოლოგიური ფუნქციაც გაცილებით რთულია. უჯრედები ერთმანეთისგან განსხვავდება არქიტექტურით უნილამელარული პროკარიოტული უჯრედებიდან (მაგ., ბაქტერიები) ეუკარიოტულ უჯრედებამდე, რომლებიც შეიცავენ ბირთვს და სხვადასხვა ორგანოებს თავიანთი არქიტექტურის შემადგენლობაში (ნახაზი 1.1). ძირითადი განსხვავება პროკარიოტული და ეუკარიოტული უჯრედის გახლავთ თავიანთ სტრუქტურაში სხვადასხვა განყოფილებების არსებობა ან არარსებობა, რომელიც განაპირობებს უჯრედის ღრუს გაყოფას სხვადასხვა დისკრეტულ ნაწილებად ლიპიდური ორმაგი შრით. ზოგადად, პროკარიოტული უჯრედების არქიტექტურა უფრო მარტივია, ვიდრე ეუკარიოტული უჯრედების. აქედან გამომდინარე, განსხვავებულია მათი ბიოლოგიური ფუნქციებიც. ის განყოფილებები, რომლებიც ეუკარიოტულ უჯრედებში არის და არ არის წარმოდგენილი პროკარიოტულ უჯრედებში, განაპირობებენ განსხვავებებს ბიოლოგიურ ფუნქციებში. კერძოდ, ეუკარიოტული უჯრედის რიგი განყოფილებები პასუხსმგებელია სტუმარ მოლეკუ-

ლებთან ურთიერთქმედებაზე ხოლო რიგი განყოფილებები პასუხისმგებელია ინფორმაციის გადაცემაზე. უფრო ნათლად რომ წარმოვიდგინოთ პროცესი, შეიძლება მოვიყვანოთ მაგალითი. წარმოვიდგინოთ ოჯახი, რომლის ერთი წევრი მასპინძლობს სტუმარს ხოლო მეორე წევრი ეუბნება ოჯახის სხვა წევრებს, რომ დღეს მათ ეყოლება სტუმარი. დაახლოებით ამის მსგავსად არის ბიოლოგიური ფუნქციები გადანაწილებული ეუკარიოტული უჯრედის სხვადასხვა განყოფილებებს შორის[1-3].



სურათი 1.1

ა) გამოსახულია ტიპური ეუკარიოტული უჯრედი თავისი

შემადგენელი სუბელემენტებით.

ბ) გამოსახულია ბიომემბრანა რომელიც შედგება ფოსფოლიპიდის ორმაგი შრისგან, რომელსაც

აქვს პოლარული ჰიდროფილური თავები და არაპოლარული ჰიდროფობური კუდები, რომელთა

მექანიკურ ელასტიურ თვისებებს განაპირობებს ინტეგრირებული პროტეინები და ქოლესტეროლი.

### 1.3.1. უჯრედული მემბრანა

უჯრედული მემბრანის ბიოლოგიური ფუნქცია ყველა უჯრედისთვის მეტ-ნაკლებად გახლავთ მსგავსი. ისინი წარმოადგენს გარკვეულ ბარიერებს, რომლებიც იცავს უჯრედის შიგთავსს გარშემომყოფი მოლეკულებისგან, ისინი სელექტიურად არჩევენ მოლეკულებს, რომლებსაც შეუძლიათ უჯრედის შიგთავსში შესვლა. უჯრედული მემბრანის სისქე უმეტეს შემთხვევებში 3 ნმ-ის ტოლია. ისინი თავიანთი მოლეკულის შემადგენლობაში შეიცავენ ინტეგრირებულ პროტეინებს, ლიპიდებს და სხვა ქიმიური სტრუქტურის მქონე მოლეკულებს. უჯრედული მემბრანის შემადგენელი მოლეკულების ქიმიური სტრუქტურები სპეციფიურია თითოეული უჯრედის მემბრანისთვის და თითოეული ბიოლოგიური ქსოვილისთვის. ორგანიზმში მათი ლოკალიზაცია განაპირობებს მათი ქიმიური შემადგენლობის სპეციფიურობას და ეს უკანასკნელი განაპირობებს მათ სპეციფიურ ბიოლოგიურ თვისებებს [18]. უჯრედულ მემბრანებში ჩვენ გვხვდება პერიფერიული ან ინტეგრირებული პროტეინები, ისინი ბიომემბრანებთან დაკავშირებული არიან სპეციფიური გზით და მათ მნიშვნელოვანი როლი შეაქვთ მემბრანების ქიმიური ფუნქციის ფორმირებაში [19]. უჯრედული მემბრანის ერთერთი ძირითადი შემადგენელი მოლეკულა გახლავთ ლიპიდები. ისინი არიან ამფიფილური მოლეკულები, რაც იმას ნიშნავს რომ მათ აქვთ როგორც ჰიდროფილური ასევე ჰიდროფობური ჯგუფები თავიანთი მოლეკულის შემადგენლობაში. ჰიდროფობური ჯგუფები ცდილობენ თვითაგრეგაციას მაშინ, როცა ლიპიდების ჰიდროფილური თავები მიმართულია ორგანიზმში არსებული ჰიდროფილური წყლის გარემოსკენ. ამფიფილური მოლეკულების სკონტანური აგრეგაციის პროცესი წინააღმდეგობაშია თერმოდინამიკის მეორე კანონთან. როგორც ვიცით დახურულ თერმოდინამიკურ სისტემებში ენტროპია აღწევს მაქსიმუმს და სისტემის მოწესრიგებული ნაწილი იღებს რაღაც საშუალო მნიშვნელობას მაშინაც კი როდესაც სისტემა არის სტატიკური [20]. ხოლო თერმოდინამიკურად ღია სისტემების შემთხვევაში ენერგია რომელიც განიბენევა სისტემიდან შესაძლოა რომ გამოყენებული იქნეს ენტროპიის შესამცირებლად. ღია თერმოდინამიკური სისტემები არის ძირითადი ადგილი სადაც ხდება უჯრედის ფორმირება და მისი სტრუქტურის ჩამოყალიბება. ჯერ ისევ არ არის ნათელი უჯრედის გაყოფის შემდეგ უჯრედის ლატერალური ორგანიზაციის ფორმირება ხდება *de novo* თუ ტემპლეიტური სინთეზის შედეგად. მიუხედავ ამისა დღეს მიღებულია რომ უჯრედის ლატერალურ ორგანიციას ძალიან დიდი როლი შეაქვს უჯრედის ბიოლოგიური ფუნქციის განსაზღვრაში.

ბოლო წლებში უჯრედული მემბრანის არქიტექტურის შესახებ შეიცვალა ხედვა და დღეს მეცნიერები უჯრედული მემბრანის სტრუქტურის მოდელად



განიხილავენ ე.წ. „სითხურ-მოზაიკურ“ მოდელს (fluid-mosaic), რომელიც პირველად შემოთავაზებული იყო ზინგერის და ნიკოლსენის მიერ [21]. ბიომემბრანის ეს მოდელი კარგად ხსნის მემბრანის ქიმიური შემადგენლობასა და მის ბიოლოგიურ ფუნქციას შორის კავშირს [22]. უფრო კონკრეტულად მემბრანის ამ მოდელში ყურადღება გამახვილებულია ბიომემბრანის სტრუქტურის დინამიურ რეორგანიზებაზე, მემბრანის სისქის არაჰომოგენურობაზე, მისი შემადგენელი პროტეინების და სხვა ქიმიური ჯგუფების განლაგებასა და დინამიკაზე, რომლებიც საბოლოო ჯამში ქმნიან კონკრეტული ბიოლოგიური ფუნქციის მქონე სისტემას, რომელიც ჩვენთვის ცნობილია ბიომემბრანის სახელით [23, 24, 25]. ბიომემბრანის შემადგენელი ჯგუფების როლის განსაზღვრა გვხმარება უფრო ნათლად დავინახოთ მემბრანის ბიოლოგიური ფუნქცია ან მისი დისფუნქციით გამოწვეული პრობლემები [26]. მაგ., ლიპიდების მოუწესრიგებელი განლაგება ადამიანის ორგანიზმში იწვევს ათეროსკლეროზს. აქედან გამომდინარე ბიომემბრანების შემადგენელ თითოეულ კომპონენტს თავისი დიდი წვლილი შეაქვს მემბრანების ბიოლოგიური თვისებების შესრულებაში ხოლო თუ რომელიმე კომპონენტი გარკვეული გარე ფაქტორების გამო იცვლის განლაგებას, ფორმას, ორგანიზებულობას, სტრუქტურას და ა.შ., ეს იწვევს სხვადასხვა სახის ბიოლოგიურ დისფუნქციას, რომლის ერთერთი ფორმა ზემოთ მაგალითის მოყვანით განვიხილეთ.

### 1.3.2. ლიპიდები

ბიოლოგიური ლიპიდების უმეტესობა გახლავთ წყალში უხსნადი ქიმიური მოლეკულები. ცხიმები და ცილები გამოიყენება როგორც ენერჯის მარაგად ხოლო ფოსფოლიპიდები, გლიკოლიპიდები და სტეროლები გამოიყენება როგორც გარკვეული ბიოლოგიური ფუნქციის მქონე მოლეკულები, რომლებიც განსაზღვრავენ ბიომემბრანების ბიოლოგიურ ფუნქციებს. ბიოლიპიდების ნაწილი სტეროლების მსგავსად, გამოიყენება როგორც ბიოლოგიური სიგნალების გადამცემი მოლეკულები.

ლიპიდები, რომლებიც განსაზღვრავენ ან გარკვეული როლი შეაქვთ ბიომემბრანების ბიოლოგიური ფუნქციის გახორციელებაში შეიძლება დავაჯგუფოთ 3 ძირითად კლასად, რომლებიც ერთმანეთისგან განსხვავდებიან როგორც ქიმიური სტრუქტურით, ასევე ბიოლოგიური ფუნქციით: ფოსფოლიპიდები, გლიკოლიპიდები და უბრალოდ ლიპიდები, რომლებიც გვხვდება არქებაქტერიებში (ნახაზი 1.2). ლიპიდები ერთმანეთისგან განსხვავდებიან აცილური ჯაჭვის სიგრძით და ორმაგი ბმების რაოდენობით, რომელიც ზოგადად წარმოდგენილია 20-24

ნახშირბადის ატომით და 2-4 ორმაგი ბმით. ასევე ლიპიდების მოლეკულების თავებთან ჩანაცვლებული ჯგუფები განსხვავდება ერთმანეთისგან, ჩანაცვლებული შეიძლება იყოს სერინი, გლიცეროლი, ეთანოლამინი, ინოზიტოლი და ქოლინი. იმისდამხედვით თუ როგორი მუხტის მატარებელია ლიპიდების თავებთან ჩანაცვლებული ჯგუფი, შეიძლება შეგვხვდეს ცვიტერიონური ან ანიონური ლიპიდები.

### 1.3.3. ბიომემბრანების მოდელოური სისტემები.

ბიომემბრანების საკმაოდ მნიშვნელოვან ნაწილს წარმოადგენენ ლიპიდები, მათი ჰეტეროგენურობა ქმნის გარკვეულ სიძნელებებს ექსპერიმენტული მეთოდებისთვის, რომელთა მეშვეობით მიიღება მნიშვნელოვანი ინფორმაციები. იმისთვის რომ ეს სიძნელებები თავიდან ავიცილოთ ხშირად მიმართავენ მათი მოდელირების სტრატეგიას. ამისთვის ვიყენებთ ჩვენთვის საინტერესო ლიპიდებს, რომელთა წყალში შეტანა იწვევს ბიომემბრანების მსგავსი გეომეტრიის მქონე სტრუქტურების სპონტანურ ფორმირებას. ეს გეომეტრიები წარმოდგენილია ნახაზზე 1.3. სადაც გამოსახულია მიცელური, ლიპიდური ორმაგი შრე და ვეზიკულას მქონე სტრუქტურები. სხვა გეომეტრიის მქონე სტრუქტურები შეიძლება ჩამოყალიბდეს ლიპიდების-თვის სპეციფიური პირობების შექმნისას, როგორც გახლავთ კონცენტრაციის მატება, pH-ის ცვლილება ან ტემპერატურის ვარირებით შეგვიძლია მივიღოთ ჰექსაგონალური, კუბური და შებრუნებული ჰექსაგონალური სტრუქტურები, ასევე შესაძლებელია მივიღოთ უფრო ნაკლებად ორგანიზებული სტრუქტურები და შებრუნებული მიცელები. ჩამოთვლილი სტრუქტურებიდან ზოგიერთ მათგანს აქვს მცირე მსგავსება ბიოლოგიური მოლეკულების სტრუქტურებთან, ხოლო ზოგი მათგანის სტრუქტურა იმდენად მსგავსია რომ ისინი შეიძლება გამოყენებული იქნეს სხვადასხვა ბიოლოგიური მოლეკულის მოდელოურ სტრუქტურებად. შედეგად შესაძლებელი ხდება ამ მოდელოური ბიომოლეკულების ისეთი მნიშვნელოვანი თვისებების შესწავლა, როგორცაა მათი მოლეკულების ელასტიურობა და მოლუნვის ფაქტორი, სხვადასხვა ბიომოლეკულების ენდო და ეგზოციტოზი. მოდელოური ბიომოლეკულების თვისებების ცვლილება დამოკიდებულია სხვადასხვა შიგა და გარე ფაქტორებზე. მოდელირების სტრატეგიის უპირატესობა მდგომარეობს იმაში, რომ აღნიშნული შიგა და გარე ფაქტორების ცვლილება და ვარირება შესაძლებელი ექსპერიმენტში, ასევე შესაძლებელია ამ ფაქტორების გავლენით გამოწვეული სტრუქტურული ცვლილებების მონიტორინგი, რაც ბიომოლეკულების შემთხვევაში მათი ბიოლოგიური თვისებების ცვლილებაზე წარმოდგენის შექმნის შესაძლებლობას იძლევა.

#### 1.4. ლიპიდური ორმაგი შრე, ბიომემბრანები.

უჯრედული მემბრანის სტრუქტურის ერთერთი მნიშვნელოვანი შემადგენელი ნაწილი გახლავთ ლიპიდური ორმაგი შრე. ბიომემბრანების ორმაგი ლიპიდური შრე აგებულია ათასობით სხვადასხვა ლიპიდისგან, ლიპიდური ორმაგი შრის ლიპიდური შემადგენლობა განსხვავდება იმისდამიხედვით თუ რომელი ბიოლოგიური ორგანოს მემბრანა გვაქვს მხედველობაში [27]. სისხლის პლაზმის ბიომემბრანის ლიპიდური ორმაგი შრის შემადგენლობა განსხვავდება მიტოქონდრიის და სხვა ბიოლოგიური ორგანოს მემბრანის ლიპიდური ორმაგი შრის ქიმიური შედგენილობისგან. ზოგადად ბიომემბრანები შეიცავენ უამრავ პერიფერიულ და ინტეგრირებულ პროტეინებს თავიანთი სტრუქტურის შემადგენლობაში, ყოველ ბიოლოგიურ ორგანოს აქვს მისთვის დამახასიათებელი სპეციფიური ფოსფოლიპიდური შემადგენლობა [28], ამასთან, ბიომემბრანების ფიზიკური მდგომარეობა იცვლება ბიოლოგიური ორგანოს ცვლილებისას, ყველა ბიოლოგიურ ორგანოს აქვს მისთვის დამახასიათებელი ბიომემბრანის ქიმიური შემადგენლობა, რაც განსაზღვრავს მათ ბიოლოგიურ თვისებებს [29]. ქოლესტერინის შემცველობაც განსხვავებულია სხვადასხვა ბიოლოგიური ორგანოს ბიომემბრანებში, მაგალითად პლაზმური მემბრანა შეიცავს ქოლესტერინის ყველაზე დიდ რაოდენობას ხოლო მიტოქონდრიების მემბრანები შეიცავენ ქოლესტერინის ყველაზე მცირე რაოდენობას, შიდა მიტოქონდრიულ მემბრანებში გვხვდება უარყოფითად დამუხტული კარდიოლიპინი (cardiolipin) რომელიც შეიცავს 4 აცილურ ჯაჭვს [28]. ზოგიერთი უჯრედული მემბრანა მდიდარია ერთი კონკრეტული სპეციფიური სტრუქტურის მქონე ლიპიდით, რომელიც განსაზღვრავს მათ ფიზიოლოგიურ თვისებებს. ზოგადად სხვადასხვა ბიოლოგიური ორგანოების ბიომემბრანები განსხვავდებიან ერთმანეთისგან ქიმიური შემადგენლობით, რაც განაპირობებს მათ განსხვავებულ ბიოლოგიურ ფუნქციას.

##### 1.4.1. ბიომემბრანების აგებულება და დინამიკა

ბიომემბრანების თხევად მოზაიკური მოდელის თანახმად, რომელიც წარმოდგენილი იყო ზინგერის [21] (Singer) და ნიკოლსონის [6] მიერ (Nicolson, 1972), ბიოლოგიური მემბრანები წარმოადგენენ თხევად მატრიცას და მემბრანული პროტეინები და ლიპიდები დიფუნდირდებიან თავისუფლად. დღევანდელი წარმოდგენა ბიომემბრანებზე არის საკმაოდ განსხვავებული ბევრ ასპექტში [30, 31]. კერძოდ ნათელი გახდა, რომ მემბრანული კომპონენტები იგულისხმება ლიპიდები და პროტეინები

თავისუფლად არ დიფუნდირდებიან მემბრანულ მატრიცაში, მათი დიფუზია არის ლიმიტირებული სხვადასხვა ფაქტორით, როგორც არის ციტოქრომი და ბიომემბრანის ძირითადი ქიმიური კომპონენტების მჭიდრო შეერთება [18]. ბიომემბრანების შემადგენელი ლიპიდური ნაწილის სტრუქტურული ორგანიზაციის შესახებ უამრავი ექსპერიმენტული მონაცემები იქნა შეგროვებული გასული ათწლეულების განმავლობაში [30, 32, 33]. პლაზმურ მემბრანებში მემბრანული ლიპიდების განაწილება მემბრანის შიდა და გარე ნაწილებს შორის არის ასიმეტრიული და ძირითადად წარმართება ატფ-ზე დამოკიდებული სისტემით რის შედეგად ვიღებთ მემბრანის გარე ნაწილს გამდიდრებულს ქოლესტერინით და სფინგოლიპიდებით ხოლო მემბრანის შიგა ნაწილს გაღარიბებულს ფოსფატიდსერინისგან [28, 34]. ფოსფატიდსერინის გადაადგილება ლიპიდურ ორმაგ შრის სპეციფიურ ნაწილში მნიშვნელოვანია სისხლის ქსოვილების თრომბოციტების აგრეგაციისთვის [35]. დღეს არსებობს მოსაზრება, რომ ბიომემბრანების ლატერალურ ორგანიზაციას მნიშვნელოვანი როლი შეაქვს მათ ფიზიოლოგიურ ფუნქციაში [30, 36-38], ასევე ექსპერიმენტული მონაცემებით დადგენილია, რომ ქოლესტერინის შემადგენლობის და სიბლანტის ცვლილება ჰიპოკამპში და თავის ტვინის ქერქის რეგიონში ზეგავლენას ახდენს სწავლისა და მეხსიერების პროცესთან [39]. მეტასტაზური პოტენციალი არის კორელაციაში პლაზმური მემბრანის შიგა და გარე ნაწილის თხევადობასთან [40] ბიომემბრანების ლიპიდური კომპოზიცია იცვლება, როდესაც ადგილი აქვს ადამიანის პროსტატური უჯრედის მეტასტაზს, ლიპიდური კომპოზიციის ცვლილება იმისდამიხედვით ხდება თუ რამდენად დიდია ან მცირეა პროსტატის სიმსივნური უჯრედის გამოვლინება [41]. ასევე დადგენილია მემბრანების ჰიდროფობური ჯგუფების სიბლანტის ცვლილების ზეგავლენა ადამიანის ჯამრთელობაზე [42].

ბიომემბრანების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების შესწავლა ძალიან მნიშვნელოვანია სხვადასხვა გარემო პირობების ცვლილებისას, როგორცაა ტემპერატურის ცვლილება, ცხიმოვანი მჟავების კონცენტრაციის ცვლილება, როდესაც ადამიანები დიეტას მიმართავენ ან როცა ატარებენ წამლების და მათი კონცენტრაციების ვარიაციების ზეგავლენის მონიტორინგს. თითოეული ეს კომპონენტი მეტნაკლებად ახდენს მემბრანების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების ცვლილებას, რაც თავისთავად უკავშირდება ადამიანის ჯანმრთელობის ცვლილებას, სხვანაირად რომ ვთქვათ, ბიომემბრანების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების ცვლილება იწვევს მათი ბიოლოგიური თვისებების ცვლილებას. ასევე ექსპერიმენტული მონაცემებით დადგენილია, რომ ბიოლოგიური მემბრანები მათზე წამლების და სხვა გარემო პირობების ცვლილებისას ზოგჯერ ლამელარული სტრუქტურიდან გადადიან

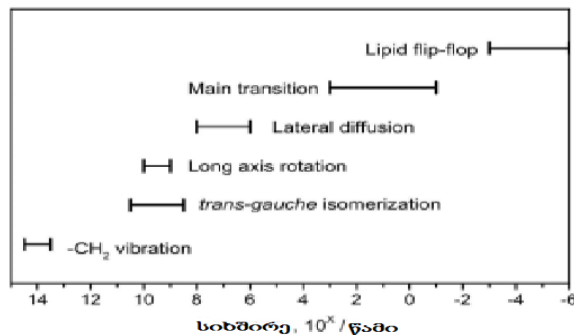
არალამელარულ სტრუქტურაში [43], რაც თავისთავად იწვევს ცვლილებებს ბიოლოგიურ ორგანიზმში. ჩვენი მიზანია, ბიომემბრანებისა და წამლების ურთიერთქმედებით გამოწვეული სტრუქტურული თუ დინამიური ცვლილებების ფიქსაცია, რაც მნიშვნელოვანი იქნება მკურნალობის უფრო ეფექტური საშუალებების შესაქმნელად და ეს მონაცემები სასარგებლოდ გამოადგებათ ჩვენ სხვა კოლეგებს რომლებიც სამკურნალო საშუალებების ეფექტურ ქიმიურ სტრუქტურებს ქმნიან.

#### 1.4.2. ლიპიდების დინამიკა.

##### შიდა და მოლეკულათშორისი დინამიკა.

ლიპიდური ორმაგი შრე არის საკმაოდ დინამიკური სტრუქტურა, ლიპიდების დინამიკა შეიძლება გავყოთ ორ ნაწილად კონფორმაციული და ტრანსლაციური.. საიდანც ვღებულობთ ინფორმაციას მოლეკულათშორისი გადაადგილების შესახებ და დროის კონკრეტულ მომენტში ბიომემბრანაში ლიპიდის ადგილმდებარეობის შესახებ. ტრანსლაციური დინამიკის სიდიდე გაცილებით ნელია ვიდრე კონფორმაციული დინამიკა.

იხილეთ სურათი 1. ლიპიდების კონფორმაციული და ტრანსლაციური დინამიკის მახასიათებელი სიხშირეები [18].



ლიპიდების დინამიკა მკაცრად დამოკიდებულია უამრავ ფაქტორზე, როგორებიცაა აცილური ჯგუფის ჯაჭვის სიგრძე, მოლეკულის შემადგენლობაში ცის-ორმაგი ბმების რაოდენობა, ჰიდრატაციის ხარისხი, ტემპერატურა და ბიომემბრანის ფაზური მდგომარეობა [33]. ზოგადად დღეს ხშირად ვიყენებთ ტერმინს „თხევადი მემბრანები“ რაც მეტნაკლებად ასახავს ბიომემბრანების რეალურ ფიზიკურ-ქიმიურ სურათს, რაშიც თავისი წვლილი შეაქვს კონფორმაციულ (მიკროსიბლანტე) და ტრანსლაციურ (ლატერალური დიფუზია) დინამიკას.

### 1.4.3. ლატერალური წნევის ფორმები.

ლატერალური წნევის განაწილება არ არის თანაბარი ბიომემბრანის მთელ ზედაპირზე, რაც განპირობებულია მრავალი მიზეზით. ერთ-ერთი ამ მიზეზთაგანი არის თერმული მოძრაობა, რომელიც იწვევს აცილური ჯგუფების არაორგანიზებულ განაწილებას ბიომემბრანაში, რაც თავის მხრივ იწვევს ლატერალური წნევის არათანაბარ განაწილებას ბიომემბრანების ზედაპირზე. წყლის მოლეკულების ურთიერთქმედება ლიპიდების ჰიდროფილურ თავებთან ზრდის ლატერალურ შეჭიდულობას ჰიდროფილურ თავებს შორის, ბიომემბრანის გაფართოების ხარჯზე. ბიომემბრანების ლატერალური გაფართოება ბალანსირებულია ზედაპირული დაჭიმულობით, რომელიც წარმოქმნილია ბიომემბრანის ჰიდროფობური (ნახშირწყალბადური ჯაჭვი) და ჰიდროფილური (წყალი) ჯგუფების ზედაპირებით, რაც გამოწვეულია იმით რომ ჰიდროფილურ და ჰიდროფობურ ჯგუფებს შორის ქიმიური კონტაქტი შეზღუდულია მათი განსხვავებული კონსტანტების გამო [44, 45]. ბიომემბრანებში ზედაპირული დაჭიმულობა წარმოადგენს ჰიდროფობური ეფექტის მკაფიო გამოვლინებას [12]. ზოგიერთ შემთხვევებში შეიძლება ადგილი ჰქონდეს ჰიდროფილურ თავებს შორის მიზიდულობას, პოლარულ ჯგუფებს შორის დამყარებული წყალბადური ბმის ხარჯზე [46]. საშუალო ლატერალური წნევა ბიომემბრანების შემთხვევაში მერყეობს 20მნ/მ-დან 56მნ/მ. (მნ/მ=მეგანიუტონ/მეტრ-კვადრატზე.) ყველაზე ხშირად ლატერალური წნევის რეალური სიდიდეა 30-დან 40მნ/ნ-მდე [47].

### 1.4.4. ლიპიდური ორმაგი შრე როგორც სელექტიური გამტარი ბარიერი

ლატერალური წნევის სხვადასხვა ფორმები იძლევა საშუალებას გამოვსახოთ ბიომემბრანები, როგორც შერჩევითად გამტარი ბარიერები, სხვადასხვა ქიმიური მოლეკულებისთვის. წყლის მოლეკულის გამტარობის ძირითად ბარიერად ბიომემბრანებში გვევლინება პირველი 7-8 ნახშირბადის ატომი ბიომემბრანის კარბონილ ეთერის ჯგუფით [48]. ამ ნახშირბადის ატომებს აქვთ ყველაზე დაბალი თავისუფლების ხარისხი ბიომემბრანის შემადგენელ სხვა ატომებთან შედარებით [49]. ლიპიდური ორმაგი შრის გამტარობა დამოკიდებულია ლიპიდური ორმაგი შრის ზედაპირზე მყოფი ატომების და ლიპიდური ორმაგი შრის გულში არსებული ნახშირწყალბადების ჩალაგების კოეფიციენტზე [50]. მაგალითად, ბენზენის განვლადობა (განაწილების კოეფიციენტი) ლიპიდურ ორმაგ შრეში დამოკიდებულია ფოსფოლიპიდების შემადგენლობაში მყოფი აცილური ჯაჭვის ჩალაგების კოეფიციენტზე, კერძოდ თუ ეს ჩალაგების კოეფიციენტი იზრდება 1.5-დან 90%-მდე, მაშინ

ბენზოლის განვლადობა მცირდება რამოდენიმე ერთეულით. ზოგადად ლიპიდური ორმაგი შრის განვლადობაზე ზეგავლენას ახდენს სხვადასხვა ფაქტორი: ტემპერატურა, ქოლესტერინის შემცველობა, ფოსფოლიპიდის შემადგენლობაში მყოფი აცილური ჯგუფის ნახშირწყალბადის ჯაჭვის სიგრძე.

### 1.5. მემბრანების ჰიდრატაცია.

ლიპიდურ ორმაგ შრეს თუ მოვათავსებთ წყალში, წყლის მოლეკულები ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილურ თავებთან ასოცირდებიან, დაჯგუფდებიან და წარმოქმნიან ჰიდრატაციულ შრეს. ლიპიდურ ჰიდროფილურ თავებთან ბმული წყალი თავისი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებებით განსხვავდება ჩვეულებრივი წყლის მოლეკულისგან. კერძოდ ბმული წყლის გაყინვის ტემპერატურა ძირითადი წყლის მოლეკულისგან განსხვავებით გახლავთ 0°C-ზე დაბალი, ასევე განსხვავებულია ელგამტარობა, სიმკვრივე [51]. ექსპონენტურად მცირდება ბმული წყლის თვისებებზე ზეგავლენა რაც უფრო იზრდება მანძილი ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილურ თავებსა და წყლის მოლეკულებს შორის, ასევე გასათვალისწინებელია ისიც, რომ ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდრატაციულ შრეში მყოფი წყლის მოლეკულების თვისებები ჰომოგენური არ გახლავთ [51] ჩვენ შეგვიძლია ვთქვათ, რომ ჰიდრატაციული შრე არ არის ბიომემბრანის სტატიკური მდგომარეობა, ის უფრო არის დინამიური ბუნების.

ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილური თავების ჰიდრატაცია მნიშვნელოვან ზეგავლენას ახდენს ფოსფოლიპიდების სტრუქტურაზე და ფუნქციაზე [52]. წყლის მოლეკულების განაწილება ლიპიდურ ორმაგ შრეში არ გახლავთ ჰომოგენური პროცესი, ასევე ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილური თავები ზოგჯერ არიან გარკვეული მუხტის მატარებელი, რაც გავლენას ახდენს წყლის მოლეკულების განლაგებაზე ჰიდრატაციულ შრეში. დღეს ჩვენ ვთანხმდებით რომ ლიპიდური ორმაგ შრეში ჰიდრატაციული შრის სტრუქტურა შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ როგორც ჰიდრატაციული კლასტერის მსგავს სტრუქტურად (არაპოლარულ გამხსნელში ფორმირებული ერთმანეთთან ასოცირებული ყინულის კრისტალების მსგავსი სტრუქტურა, რომელიც ცნობილია ჰიდრატაციული კლასტერის სახელით) [53]. წყლის მოლეკულების ასოციაცია ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილურ თავებთან განაპირობებს მემბრანის დიპოლური მომენტის პოტენციალს [54]. ჰიდრატაციულ შრეში წყლის მოლეკულების რაოდენობა დამოკიდებულია ლიპიდის ფაზურ მდგომარეობაზე [55], ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილური თავების ტიპზე [55], აცილური ჯაჭვის

კომპოზიციაზე და მათში ცის-ორმაგი ბმების რაოდენობაზე. სხვადასხვა ქიმიური მოლეკულები როგორცაა სტეროლი ზრდის მემბრანის ჰიდრატაციას, ასევე სხვადასხვა დანამატები გავლენას ახდენენ ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდრატაციაზე. ლიპიდური ორმაგი შრის დეჰიდრატაცია ამცირებს ლიპიდების ფაზურ გარდაქმნებს ლამელარული სტრუქტურიდან ჰექსაგონალურ სტრუქტურებში [56]. წყლის გამოძევება ქიმიური სისტემის გარკვეული ნაწილებიდან ხორციელდება ძირითადად ორი მექანიზმით. ერთი გზაა როდესაც გასახსნელი მოლეკულის ჰიდრატაციული რადიუსი ბევრად დიდია, ვიდრე წყლის მოლეკულის რადიუსი, ის ვერ ახერხებს წყლის მოლეკულაში შესვლას ამ ზომითი ბარიერის გამო, მეორე გზაა როდესაც ადგილი აქვს შერჩევით ჰიდრატაციას ანუ ზოგიერთ მოლეკულას უფრო მეტად უყვარს წყლის მოლეკულასთან ურთიერთქმედება, ვიდრე გამხსნელთან, რაც იწვევს მათ განცალკევებას სისტემის ძირითადი ნაწილისგან. ზოგჯერ ბიომემბრანებში თავისთავად სპონტანურად შეიძლება მიმდინარეობდეს როგორც შერჩევითი ურთიერთქმედება წყლის მოლეკულასთან, ასევე ზომითი ბარიერული პროცესის მიმდინარეობა [57].

წყლის სტრუქტურაზე სხვადასხვა დანამატების გავლენის შესწავლით დადგენილია რომ არსებობს დანამატების ორი ჯგუფი ერთ მათგანს ჩვენ ვუწოდებთ ქაოტროპებს (სტრუქტურის დამანგრეველებს), ხოლო მეორე მათგანს კოსმოტროპებს (სტრუქტურის შემქნელებს). იმისდა მიხედვით თუ როგორი გავლენას მოახდენენ ისინი წყალბადურ ბმებზე, ჩვენ შეგვიძლია დავუკვირდეთ ამ ორ პროცესს ქაოტროპული ან კოსმოტროპული დანამატების შედეგს. ამ ცვლილებების სიდიდე დამოკიდებულია სისტემაში არსებული კოსმოტროპული თუ ქაოტროპული დანამატების რაოდენობაზე [58, 59]. კოსმოტროპები იწვევენ ზედაპირული ფართობის შემცირებას, მაშინ როცა ქაოტროპებს აქვთ საწინააღმდეგო ეფექტი. ზოგადად დანამატები რომლებიც აკუმულირდებიან ზედაპირზე, იწვევენ ზედაპირული დაჭიმულობის შემცირებას.

### 1.5.1. მემბრანების ლატერალური ჰეტეროგენულობა

ბიომემბრანების ასევე მათი მოდელოური სისტემების ლატერული ორგანიზაცია არ არის ჰომოგენური სისტემა და მათი ზომები იცვლება რამოდენიმე ნანომეტრიდან რამოდენიმე მიკრომეტრამდე [38] ბიომემბრანები თავიანთი მოლეკულის ზედაპირზე ახდენენ სხვადასხვა ქიმიური მოლეკულების ე.წ. „დომენების“ (სამფლობელოების) ფორმირებას, ერთერთი ასეთი ქიმიური მოლეკულა რომელიც ახდენს ბიომემბრანის ზედაპირზე დომენების ფორმირებას გახლავთ ლიპიდები, ლიპიდების ეს დომენები



სხვადასხვა ბიომემბრანის შემთხვევაში ერთმანეთისგან განსხვავდება ლიპიდების შემადგენლობით და ფიზიოლოგიური თვისებებით. ლიპიდების ეს დომენები ჩვენ გვხვდება როგორც ბიომემბრანაში, ასევე მოდელოზ სისტემებში, მათ აქვთ საკმაოდ დიდი ფიზიოლოგიური აქტიურობა და სწორედ მათი ეს ფიზიოლოგიური აქტიურობა იძლევა მოტივაციას მეცნიერებისთვის, რომ შესწავლილ იქნეს ის ქიმიურ-ფიზიკური პირობები, როდესაც ადგილი აქვს ბიომემბრანებში ამ სახით დომენების შექმნას [60].

ლიპიდური მემბრანები, რომლებიც შეიცავენ დამუხტულ ფოსფოლიპიდებს, დომენების ფორმირების და ფაზური გამოყოფის შემცირება შესაძლებელია კალციუმის იონის შეტანით, პოლიკათიონებით, ელექტრული ველით და pH-ის ვარირებით. ბიომემბრანების ლატერალური ორგანიზაციის ცვლილების მიზეზი გამოწვეულია აგრეთვე მემბრანების შიგა პროტეინებისა და ლიპიდებს შორის ურთიერთქმედებით. ლატერალური ჰეტეროგენულობის შემცირებაც შესაძლებელია სპირტების დახმარებით [61]. ფოსფოლიპიდების აცილური ჯგუფის განსხვავებული სიგრძეც განაპირობებს მიკროდომენების ფორმირებას [62]. ბიომემბრანების მოწესრიგებულ სტრუქტურაზე დიდ გავლენას ახდენს ფოსფოლიპიდების ჰიდროფობური ჯგუფების სისქე და ბიომემბრანის შიდა-ინტეგრირებული პროტეინი, რაც ექსპერიმენტულადაც იქნა დადასტურებული [62].

### 1.5.2. ლიპიდებსა და პროტეინებს შორის ურთიერთქმედება.

ლიპიდებსა და პროტეინებს შორის ურთიერთქმედების შესწავლა და დახასიათება საკმაოდ მნიშვნელოვანია ბიომემბრანაში მიმდინარე პროცესებზე დაკვირვებისას, სწორედ მათი ურთიერთქმედების შედეგად ხდება პროტეინების გარკვეული ბიოლოგიური ფუნქციების გააქტიურება ბიომემბრანებში. ასევე ლიპიდებსა და პროტეინებს შორის ურთიერთქმედების შესწავლა დაგვეხმარება გარკვეული წარმოდგენები შევიქმნათ ბიომემბრანებსა და წამლებს შორის ურთიერთქმედების მექანიზმებზე და ბიომემბრანაზე წამლების გავლენაზე .

უამრავი მემბრანული თვისება იქნა იდენტიფიცირებული, რომლებზეც გავლენას ახდენენ პერიფერიული და ინტეგრირებული პროტეინები. ზოგიერთ პროტეინებს ბიომემბრანებში ჭირდებათ სპეციფიური ლიპიდური ადგილები სადაც ისინი მოახდენენ თავიანთი თვისებების ოპტიმალურ აქტივაციას [63]. ფოსფოლიპაზა A<sub>2</sub> შეიძლება ვთქვათ რომ არის ერთერთი ყველაზე მეტად შესწავლილი მემბრანული პროტეინი, რომელზედაც ნაჩვენებია თუ რა გავლენა აქვს მემბრანის ლატერალურ ჰეტეროგენურობას მის აქტიურობაზე. ზოგადად რომ ჩამოვაცალიბოთ, ბიომემბრანაში როგორც

ვიცით ლიპიდური ინტერფეისები ერთმანეთთან არიან დაკავშირებული, ზოგჯერ ეს ლიპიდური ინტერფეისების ერთმანეთთან დაკავშირება არ არის იდეალური და წარმოიქმნება სტრუქტურული დეფექტები, სწორედ ამ სტრუქტურული დეფექტების წარმოქმნა ხელს უწყობს ფოსფოლიპაზა A<sub>2</sub> აქტიურობის გაზრდას. მსგავსად ამისა ფოსფოლიპაზა C-ს აქტიურობა იზრდება Tm ტემპერატურასთან ახლოს [64]. HII მიდრეკილების ბიომემბრანული სისტემებს აქვთ ტენდენცია არალამელარული სტრუქტურების ფორმირების [65]. ზოგიერთი პერიფერიული პროტეინების აქტიურობა როგორებიც არის პროტეინ კინაზა, ფოსფოქოლაინციტიდილტრანსფერაზა და აგერთვე ზოგიერთი ინტეგრალური პროტეინები, როგორცაა როდოპსინი, ინსულინი რეცეპტორ კინაზას [65] აქვს HII მიდრეკილებისაკენ ტენდენცია.

მემბრანული ლიპიდების დინამიკამ შეიძლება გავლენა მოახდინოს ინტეგრალური პროტეინების კონფორმაციულ მდებარეობაზე [44], აგრეთვე პერიფერიული მემბრანული პროტეინებსა და მემბრანის ზედაპირებს შორის ურთიერთქმედებაზე [33]. მემბრანული დინამიკის ცვლილების სიდიდე ზოგჯერ მნიშვნელოვან როლს თამაშობს ამათუ იმ პროტეინის ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების ცვლილებაში. ლიპიდური მემბრანის თხევადობა ასევე მნიშვნელოვან როლს თამაშობს ბიომემბრანის ფუნქციაში, ხოლო ფაქტორები, რომლებიც ზრდიან ლიპიდური მემბრანის თხევადობას, როგორც გახლავთ ტემპერატურა, მცირე რაოდენობით ქოლესტერინი, ცისორმაგი ბმების რაოდენობა და გარკვეული სტრუქტურის მქონე წამლების ურთიერთქმედება, იწვევენ DnaA პროტეინების აქტივაციას [66].

ჰიდროფობური სხვაობა ლიპიდებსა და ინტეგრალურ მემბრანულ პროტეინებს შორის ახდენს გავლენას მემბრანის ლატერალურ ორგანიზაციაზე, მაგრამ ასევე ჰიდროფობური სხვაობა ლიპიდებსა და პროტეინებს შორის ახდენს დიდ გავლენას პროტეინების აქტიურობაზე, როგორც ეს ნანახი იქნა ლეიცილის ტრანსპორტირებისას.

### 1.5.3. ფაზური გარდაქმნები.

ჩვენ ძალიან ხშირად გამოვსახავთ ლიპიდების ფაზურ კლასიფიკაციას დიდი ლათინური ასოებით, რომლებიც გვაძლევენ საკმაოდ ნათელ ინფორმაციას ლიპიდების სტრუქტურის გეომეტრიის შესახებ (ერთ, ორ და სამ განზომილებიან სიბრტყეში).

L= ერთ განზომილებიანი ლამელა

H= ორ განზომილებიანი ჰექსაგონალი

HI=ნორმალური, წყალი-ზეთში სისტემა.

HII= შებრუნებული ზეთი-წყალში სისტემა

R= რომბოჰედრალი

Q= კუბი

C= სამ განზომილებიანი კრისტალი

Lc= კრისტალური ლამელა

M= მოუწესრიგებელი მიცელური ფაზა.

კლასიფიკაციაში გამოიყენება პატარა ლათინური ასოები ლიპიდების ნახშირწყალბადური ჯაჭვის მდგომარეობის აღსაწერად.

$\alpha$  = მოუწესრიგებელი, ქაოტური, სითხე.

$\beta$  = არადახრილი ნაწილობრივ მოწესრიგებული გელი

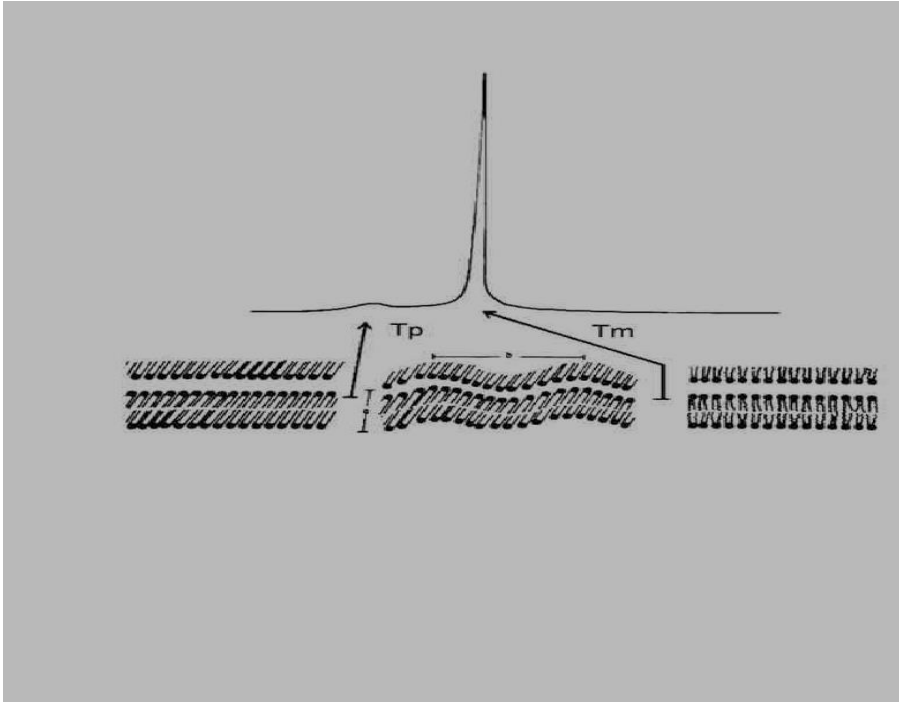
$\beta'$  = დახრილი ნაწილობრივ მოწესრიგებული გელი

$\delta$  = სპირალური ნაწილობრივ მოწესრიგებული გელი

ფოსფოლიპიდები ძირითადად გვხვდება ორი ძირითადი თერმოტროპული და ლიოტროპული ფორმით [67]. ბიომემბრანები კი ძირითადად არიან თხევად ლამელარულ მდგომარეობაში. აქედან გამომდინარე ამ თავში ძირითადად განხილული იქნება გელი-სითხე ფაზური გარდაქმნები (სურ.3). გელის ფაზაში ნახშირწყალბადური ჯაჭვის განივკვეთის ფართობი დაახლოებით არის 20 ანგსტრემი [45]. ფაზურ გარდაქმნასთან ახლოს ლიპიდური მოლეკულები განიცდიან ოდნავ გადახრას, როგორც ეს ნაჩვენებია სურ.3-ზე. ეს განლაგება და კონფიგურაცია ხელს უწყობს ლიპიდების ჰიდროფილური თავების ზედაპირული ფართობის და ჰიდრატაციის გაზრდას [45].

ლიპიდური ორმაგი შრე დამატებით ფართოვდება როდესაც ადგილი აქვს გელი(L $\alpha$ )-სითხე(L $\beta$ ) ფაზურ გადასვლას [45].

ამ გადასვლისას ზედაპირული ფართობი ყოველი მოლეკულისთვის იზრდება 15-30%-ით ორმაგი ლიპიდური შრის სისქის შემცირების ხარჯზე. სრულად ჰიდრატირებული ლიპიდების ფაზური გადასვლის ტემპერატურა (T $m$ ) დამოკიდებულია ჰიდროფილურ თავებზე, ჰიდროფობური ჯაჭვის განზავებაზე, აცილური ჯაჭვის სიგრძეზე [58]. T $m$  იზრდება პირდაპირპროპორციულად ნახშირბად-ატომების რაოდენობის ზრდისას და მცირდება ცის-ორმაგი ბმების რაოდენობის ზრდისას [58].



სურ: 3.  $T_p$ -ით გამოსახულია ტემპერატურა ფაზურ გადასვლამდე,  $T_m$ -ით გამოსახულია ძირითადი გადასვლის ტემპერატურა. მარცხნიდან მარჯვნივ მოცემულია: გელი, გარდამავალი ტალღოვანი და თხევადი ფაზა.

ფოსფოლიპიდების ფაზური გარდაქმნის ძირითად ტემპერატურაზე, ფლუქტუაცია გელ-თხევად ფაზებს შორის იწვევს ბიომოლეკულის თვისებების გარკვეულ ცვლილებებს მაგალითად, ფოსფოლიპიდების ბმის ელასტიურობა, ფოსფოლიპიდების გამტარიანურობა და ფოსფოლიპაზის აქტიურობა განსხვავებულია სხვადასხვა ფაზაში[68].

#### 1.5.4. ლიპიდებსა და წამლებს შორის ურთიერთქმედება

*რატომ არის საინტერესო ლიპიდებსა და წამლებს შორის ურთიერთქმედების შესწავლა?*

დღეს პრაქტიკაში გამოყენებული წამლების უმრავლესობა ამფიფილური ბუნებისაა, აქვთ თვითაგრეგაციის და სხვადასხვა ფორმით ბიომემბრანებთან ურთიერთქმედების უნარი (Schreier et al; 2000). წამლებისთვის მთავარ ბარიერს პასიური დიფუზიისას წარმოადგენს უჯრედული მემბრანა, გასაკუთრებით კი მისი ლიპიდური ორმაგი შრე. ლიპიდური ორმაგი შრის განსხვავებულობა გავლენას ახდენს უჯრედულ მემბრანაში წამლების ტრანსპორტზე და მათ აკუმულაციაზე. ლიპიდური ორმაგი შრეში პასიურ დიფუზიაზე მოქმედი ფაქტორების მექანიზმების შესწავლა საკმაოდ მნიშვნელოვანია ბიოსამედიცინო პრაქტიკისთვის უფრო კონკრეტულად კი

წამლის ეფექტური სტრუქტურების შესაქმნელად. წამალი-ლიპიდის ურთიერთქმედების შესწავლა მნიშვნელოვანია სამკურნალო საშუალებების ფიზიკურ-ქიმიური დახასიათებისთვის, რადგან წამლების ლიპიდებთან ურთიერთქმედების ფორმა იძლევა გარკვეულ ინფორმაციას სამკურნალო საშუალებების ფიზიკურ-ქიმიურ თვისებებზე, რასაც თავისთავად აქვს გარკვეული გავლენა წამლების პასიურ ტრანსპორტზე უჯრედულ მემბრანაში. ლიპიდსა და წამალს შორის ურთიერთქმედებისას წამლის შეკავშირებამ ლიპიდთან შეიძლება გამოიწვიოს რომელიმე მემბრანული პროტეინის ფუნქციის აქტივაცია, მსგავსი თვისებები ექსპერიმენტულად დადასტურებულია ფოსფოლიპაზა A2 -ის შემთხვევაში [69]. მსგავსი ეფექტი აღწერილია პროტეინ კინაზა C-სთვის [70]. წამალი-ლიპიდის ურთიერთქმედების მექანიზმის შესწავლა მოიცავს როგორც თვით პირდაპირი ურთიერთქმედების დახასიათებას, ასევე ამ ურთიერთქმედებით გამოწვეული გვერდითი ეფექტების შესწავლასაც. ლიპიდებსა და წამლებს შორის ურთიერთქმედების დახასიათება ასევე მნიშვნელოვანია ლიპოსომური წამლის გადამტანი სისტემების შექმნისთვის. ბიომემბრანისა და ანესთეზიური სამკურნალო საშუალებების ურთიერთქმედების შესწავლა აგრეთვე მნიშვნელოვანია ამ წამლების მოქმედების მექანიზმის დასახასიათებლად. ბოლო წლების განმავლობაში მსგავსი მიზნებისთვის შესწავლილი იყო სხვადასხვა ბიოლოგიური მემბრანის განსხვავებული ლიპიდური ნაწილები, მიღებული ინფორმაცია საკმაოდ მნიშვნელოვანია ჩვენთვის საინტერესო ბიოლოგიური მოლეკულების თვისებების კონტროლის მიზნით.

ადამიანის ორგანიზმის მიერ წამლების აბსორბციისთვის აუცილებელია წამლებმა მოახერხონ პლაზმური მემბრანის ბარიერის გადალახვა. წამლების უმეტესობა ახერხებს პლაზმური მემბრანის გადალახვას პასიური დიფუზიით ლიპიდური ორმაგი შრის გავლით. წამლის აბსორბციის ძირითადი ნიშანი წამლის ლიპიდთან ურთიერთქმედებაა. წამალი ამ ბარიერის გავლის შემდეგ სისხლის წრიული მოძრაობით გადაადგილდება ორგანიზმში. წამლის აღნიშნული განაწილება შეიძლება იყოს ლიმიტირებული სხვადასხვა ფაქტორებით, მაგ., სისხლის ქსოვილის ბარიერები, უფრო კონკრეტულად სისხლი-ტვინის ბარიერი [71]. სისხლი-ტვინის ბარიერი ფორმირდება ენდოთელიური უჯრედების მჭიდრო შეერთებით ტვინის კაპილარებთან, სადაც უამრავი პროტეინია ჩართული ამ მჭიდრო შეერთების საქმეში [71]. სისხლი-ტვინის ბარიერი მეტაბოლურად ძალიან აქტიურია და შეიცავს უამრავ ტრანსპორტულ პროტეინს [71]. თუმცა ყველა სამკურნალო საშუალებამ, რომლებიც გაივლის ამ ბარიერს უპირველეს ყოვლისა უნდა გაიაროს ლიპიდური ენდოთელიური უჯრედის ლიპიდური

ორმაგი შრე [71]. აქედან გამომდინარე, წამალი-ლიპიდი ურთიერთქმედებას აქვს უდიდესი მნიშვნელობა წამლების მთელ ორგანიზმში განაწილების პროცესზე. აგრეთვე თუ სამკურნალო საშუალებების სამიზნე ლიპიდები მდებარეობენ უჯრედის შიგნით და წარმოადგენენ უჯრედს შიგნით ლიპიდებს, მაშინ ამ წამლების გამტარობა პლაზმური მემბრანის მიერ ძალიან მნიშვნელოვანია, რათა სამკურნალო საშუალება მივიდეს თავის სამიზნე ჯგუფთან და განახორციელოს ის სამკურნალო ეფექტი, რისთვისაც ეს წამალი შეიქმნა. სხვადასხვა ბიოლოგიური ორგანოს უჯრედს აქვს განსხვავებული პლაზმური მემბრანის კომპოზიცია და ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები, აქედან გამომდინარე წამალი-ლიპიდის ურთიერთქმედების შესწავლა, მათი თავისებურებების დახასიათება და ამ ცოდნის გამოყენება მნიშვნელოვანია ეფექტური სტრუქტურის მქონე წამლების შესაქმნელად. უამრავი სამკურნალო საშუალება იწვევს უჯრედულ მემბრანაში ლიპიდების აკუმულაციას, რასაც უმეტეს შემთხვევაში თან სდევს ტოქსიკური გვერდითი ეფექტი ადამიანის ორგანიზმისთვის ე.წ. ფოსფოლიპიდოზი. ფოსფოლიპიდოზი გავლენას ახდენს უჯრედული მემბრანის გამტარუნარიანობაზე და ტრანსპორტის ფუნქციაზე და იწვევს მის დეგრადაციას. ტოქსიკურობა გამოვლინდება პათოლოგიური ეფექტში, რაც ნიშნავს სხვადასხვა ბიოლოგიური ფუნქციის პათოლოგიას, კერძოდ, რქოვანასთან დაკავშირებული ლეიკომა ხდება გაუმჭვირვალე, მცირდება გლომელარული ფილტრაცია და ადგილი აქვს პულმონარულ ფიბროზს [72]. საბედნიეროდ ბუნება პრობლემასთან ერთად იძლევა ამ პრობლემის მოგვარების გასაღებსაც. ჩვენმა უფროსმა ძალიან დაკვირვებულმა კოლეგებმა სამკურნალო საშუალებების ტოქსიკურობის შემცირების გზებს მიაგნეს რამოდენიმე წლის წინათ [73]. კერძოდ, რიგი სამკურნალო საშუალებების ლიპოსომებში კაფსულაცია იწვევს ტოქსიკურობის შემცირებას [73], აგრეთვე იზრდება წამლების ეფექტურობა რადგან ლიპოსომებში წამლების კაფსულაცია იწვევს მათი სიცოცხლის ხანგრძლივობის ზრდას [74], აგრეთვე სისხლის ქსოვილების უჯრედები ლიპოსომაში კაფსულირებული ზოგიერთი წამლების მიმართ უფრო გამტარია, ვიდრე ჩვეულებრივი წამლებისთვის, ასევე ლიპოსომაში კაფსულირებული ზოგიერთი წამალი ჩვეულებრივი წამლებისგან განსხვავებით ახერხებენ უჯრედის სხვადასხვა სიღრმემდე მისვლას, რაც იწვევს უჯრედის შიგნით მათი კონცენტრაციის ზრდას, რაც ზრდის მათ ეფექტურობას კონკრეტული ბიოლოგიური მოლეკულის ბიოლოგიური ფუნქციის აღდგენის საქმეში. დღეს ლიპოსომაში კაფსულირებული წამლები დიდი წარმატებით გამოიყენება კლინიკურ პრაქტიკაში [74].

### 1.5.5. ზოგადი დახასიათება მიკროემულსიების

სიტყვა მიკროემულსია საერთოდ არ იძლევა ამ სისტემების ბუნებასა და თვისებებზე რაიმე ინფორმაციას. მიკროემულსია სისტემაა, რომელიც შედგება ორი ერთმანეთში უხსნადი წყლის და ზეთის ფაზისგან, ზან-ის (ზედაპირულად აქტიური ნივთიერება) დახმარებით კი მიიღება წყალი-ზეთში ან ზეთი-წყალში მიკროემულსიური წვეთები, რომლებიც ერთმანეთისგან განცალკევებულია ზან-ის მოლეკულით. ეს მიკროემულსიური წვეთები ზოგიერთმა შეიძლება იფიქროს რომ არის დიდი ზომის, რამოდენიმე მიკრომეტრის ზომის, მაგრამ რეალურად ისინი 3 ერთეულით მცირე ზომისაა და უმეტეს შემთხვევაში მათი ზომები მერყეობს რამოდენიმე ათეული ნანომეტრიდან ასეულ ნანომეტრამდე. ყველაზე საინტერესო გახლავთ ამ მიკროემულსიური წვეთების მდიდარი ფაზური თვისებები, სწორედ ეს მდიდარი ფაზური თვისებები ქმნის მათ საინტერესოს და ძალიან გამოყენებადს ჩვენი ყოველდღიური პრაქტიკული პრობლემების გადაჭრის საქმეში. პირველად 1948 წელს ვინსორმა [75] გაამახვილა ყურადღება მიკროემულსიის ფაზურ თვისებებზე და მოგვარდა მისი ხედვა მიკროემულსიებში მიმდინარე პროცესების შესახებ, როგორც ვინსორ 1,2,3,4 ფაზების სახელით, თითოეულ ვინსორის ფაზურ რიცხვს შეესაბამება მიკროემულსიის გარკვეული ფაზების რაოდენობა, კერძოდ, ვგულისხმობთ ერთ, ორ და სამ ფაზიან მიკროემულსიურ სისტემებს.

მიკროემულსიის განმარტება უფრო მოგვიანებით 1959 წელს მოწოდებული იყო შულმანის მიერ [76]. რეალური სამეცნიერო შინაარსის კითხვები ამ სისტემების შესახებ სათავეს იღებს 1943 წლიდან, როდესაც მსჯელობდნ გაფანტული სუბმიკროსკოპული მიცელური ფაზის შესახებ [77]. მიკროემულსიის ფაზური თვისებები უფრო დეტალურად დახასიათებული იქნა 1960 და 1970-იან წლებში ფრაიბერგის (Friberg) და შიმოდას (Shimoda) მიერ [78-83].

კომერციული გამოყენება მიკროემულსიური სისტემების დაიწყო 1970 წლიდან, როდესაც ოკეანეებში თუ ზღვებში დაღვრილი ნავთობ პროდუქტების ამოწვლილვა იყო აქტუალური თემა [83]. ამ პერიოდიდან მოყოლებული მათი კომერციული გამოყენება ძალიან სწრაფად გავრცელდა სხვადასხვა მიმართულებით [78, 84]. ფარმაცევტულ სფეროში დღესაც ერთერთი აქტუალური კითხვაა წამლის ეფექტური გადამტანი საშუალებების შექმნა, მიკროემულსიური სისტემები ამ მიმართულებით საკმაოდ ეფექტურად გამოიყენება, ბიოტექნოლოგიაში მიკროემულსიები გამოიყენება ენზიმატურ რეაქციებში და პროტეინების იმობილიზაციისთვის [85-87]. ნანონაწილაკების პოლიმერიზაციის გზით მიღება, კოსმეტიკური

საშუალებების და საკვები დანამატების მრეწველობა მიკროემულსიური სისტემების გამოყენების დამატებითი მაგალითებია.

მიკროემულსიური სისტემების გამოყენების ერთ-ერთი საინტერესო სფერო დაბინძურების მოშორებაა. ამ მიმართულებით ბოლო რამოდენიმე დეკადის განმავლობაში საკმაოდ მზარდი მეცნიერული ინტერესი შეინიშნება, მაგრამ მიუხედავად ამისა სამეცნიერო პუბლიკაციების სიმწირე შეინიშნება, რაც იმას ნიშნავს, რომ ამ სფეროში ახალი პრაქტიკული კითხვებისთვის დიდი შესაძლებლობებია.

პირველი მსოფლიო ომის დროს სპეციალური სამსახურის აგენტები ორივე მხრიდან იყენებდნენ სხვადასხვა მომწამლავ ქიმიურ ნივთიერებებს ერთმანეთის საწინააღმდეგოდ [88]. უფრო მოგვიანებით მეორე მსოფლიო ომის და ცივი ომის დროს განვითარდა ქიმიური იარაღის წარმოება, კიდევ უფრო მოგვიანებით ტოკიოში 1995 წელს ტერორისტული თავდასხმისას ერთ-ერთ მეტროს სადგურზე გამოყენებული იყო მომწამლავი ქიმიური ნივთიერება. აქედან გამომდინარე ძალიან მნიშვნელოვანია ისეთი სისტემების შექმნა, რომლებიც მოახდენს ამ მომწამლავი ნივთიერებების მომაკვდინებელი ეფექტის მაქსიმალურად შემცირებას და სწორედ ამ მიმართულებით მიკროემულსიურ სისტემებს ძალიან დიდი პერსპექტივა აქვთ. უფრო მეტიც გერმანელი სამხედროები უკვე 1980 წლიდან იყენებენ მიკროემულსიურ სისტემებს, როგორც ეფექტურ დაბინძურების მოსაშორებელ საშუალებებს (დეკონტამინატებს) [89]. მიკროემულსიების ამგვარ ეფექტურობას განაპირობებს ის, რომ მათ შეუძლიათ როგორც წყლის, ასევე ზეთის ფაზის, როგორც ჰიდროფილური, ასევე ჰიდროფობური ჯგუფების შეთავაზება ერთ სისტემაში სტუმარი მოლეკულებისთვის. თუმცა, რამდენადაც ეფექტურია ეს სისტემები სხვადასხვა პრაქტიკული პრობლემების მოგვარებისას, სწორედ იმდენადვე რთულია მათი სტრუქტურის დახასიათება და მათი თვისებების შესწავლა. რადგან მიკროემულსიური სისტემების ზომები მერყეობს რამოდენიმე ნანომეტრის ფარგლებში დასახასიათებლად ის მოითხოვს ძალიან რთულ ექსპერიმენტულ მეთოდებს, როგორც გახლავთ ნეიტრონული გაბნევა, აგრეთვე აუცილებელია თეორეტიკოსების მხრიდან გაწეული იქნეს დიდი შრომა მიღებული ექსპერიმენტული შედეგებისთვის მყარი თეორიული მოდელის შესაქმნელად და შედეგების ადეკვატური ინტერპრეტაციისთვის.

## 1.6. თეორიული მიმოხილვა

მოცემულ თავში განხილული იქნება მიკროემულსიური სისტემების ძირითადი პრინციპები და მათი თვისებები. ასევე თავ 2-ში დეტალურად



იქნება განხილული კვლევის სხვადასხვა მეთოდები, რომლებიც გამოიყენება მიკროემულსიური სისტემების სტრუქტურის და დინამიკის შესასწავლად.

### 1.6.1. მიკროემულსიები

მიკროემულსიებს აქვთ საკმაოდ საინტერესო სტრუქტურები, ისინი ადამიანის თვალისთვის გამოიყურებიან გამჭვირვალე ტრანსპარენტულ სისტემებად, რადგან მათი წვეთების (აგრეგატების) ზომები 50-ჯერ ნაკლები სიდიდისაა, ვიდრე სინათლის ხილული უბნის ყველაზე მოკლე ტალღის სიგრძე. საინტერესოა ისიც, რომ მიკროემულსიის შემადგენელი კომპონენტების განსხვავებული კონცენტრაციული შერევით შესაძლებელია სხვადასხვა სტრუქტურის სისტემების მიღება, კერძოდ, ცილინდრული, ჰექსაგონალური, ლამელარული და ა.შ. სტრუქტურების ასეთი მრავალფეროვნება განპირობებულია იმით, რომ მიკროემულსიებს აქვთ მდიდარი ფაზური თვისებები, რომლებიც იქნება განხილული შემდეგ თავებში [90].

### 1.6.2. ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები (ზან)

ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები ამფიფილური მოლეკულებია, რომლებიც შეიცავენ როგორც ჰიდროფილურ, ასევე ჰიდროფობურ ჯგუფებს თავიანთი მოლეკულის შემადგენლობაში, ზან-ები მიკროემულსიური სისტემების ერთ-ერთი ძირითადი შემადგენელი კომპონენტია. ზოგადად, ზანის მოლეკულის ნახშირწყალბადური ჯაჭვი ჰიდროფობური ჯგუფია, ხოლო ზან-ის მოლეკულის ჰიდროფილური ნაწილი კი განსაზღვრავს თუ როგორი ტიპის არის ზედაპირულად აქტიური მოლეკულა. ანიონურია ზანები, სადაც ჰიდროფილური ნაწილი ზანის მოლეკულის არის ანიონური (მაგალითებია სულფატი, სულფონატი და ფოსფატი) ისინი ძირითადად გამოიყენებიან სარეცხ საშუალებებად, კათიონური ზან-ებში ჰიდროფილური ნაწილი არის კათიონური, მათ იყენებენ კოსმეტიკაში და სანიტარულ მიზნებისთვის. ცვითერიონური ზან-ები გახლავთ მოლეკულები, რომელთა ჰიდროფილური თავები შეიცავენ როგორც დადებითად, ასევე უარყოფითად დამუხტულ ჯგუფებს, ასეთი ზან-ები გამოიყენება შამპუნის, სხეულის მოვლის საშუალებების და სხვა მსგავსი ჰიგიენური პროდუქტების წარმოებაში. ასევე არსებობს არაიონური ზან-ები, რომელთა ჰიდროფილურ ჯგუფს (პოლიოქსიეთილენური ჯგუფი) არ გააჩნია არანაირი მუხტი (მაგ., ჰიდროქსილური, კარბოქსილური, ეთერული და პოლიალკილური ჯგუფის მქონე ზან-ები).

### 1.6.3. მიცელები

რადგან ზან-ები ამფიფილური ბუნების მოლეკულებია, ისინი ახერხებენ ხსნარებში მიცელების ფორმირებას. მიცელების ფორმირებას ხსნარებში ადგილი აქვს ზან-ების გარკვეულ კონცენტრაციაზე და ამ კონცენტრაციას მიცელის წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაცია ეწოდება. მიცელები წარმოადგენენ მოლეკულების კლასტერებს, რომლებიც ფორმირდება ამ მოლეკულების აგრეგაციის შედეგად. აგრეგირებული მიცელების გეომეტრიული ფორმა შეიძლება იყოს სხვადასხვა, კერძოდ სფერული, ცილინდრული და ა.შ. მიცელის წარმოქმნის კრიტიკული კონცენტრაციაზე სისტემის ფაზათაშორისი ზედაპირი მთლიანად არის ზან-ის მოლეკულის მიერ დაფარული, მიცელის წარმოქმნის კრიტიკულ კონცენტრაციამდე სისტემის ზედაპირული დაჭიმულობა მცირდება, კრიტიკული კონცენტრაციის შემდგომ კი ზედაპირული დაჭიმულობის სიდიდე გადის პლატოზე და ზან-ის მოლეკულებს აღარ აქვთ გავლენა ზედაპირული დაჭიმულობის პარამეტრის ცვლილებაზე. მიცელებს ასევე შეუძლიათ მაკროსკოპული პარამეტრების ცვლილება, მაგ., როგორცაა სითხეების დინების თვისება.

### 1.6.4. სტრუქტურა და დინამიკა

მიკროემულსიების ძირითადი შემადგენელი კომპონენტებია ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები, წყალი, ზეთი და თანაზედაპირულად აქტიური ნივთიერებები. ზოგიერთი ზედაპირულად აქტიური ნივთიერება მიკროემულსიას არ წარმოქმნის თანაზედაპირულად აქტიური ნივთიერების გარეშე, ხოლო ზოგი ზანი არ საჭიროებს თანაზანს მიკროემულსიის ფორმირებისთვის. მიკროემულსიები თერმოდინამიკურად სტაბილური სისტემებია. იმისდამიხედვით თუ რა რაოდენობით იქნება მიკროემულსიის შემადგენელი კომპონენტები ერთმანეთთან შერეული, განსხვავებული იქნება მიკროემულსიის ფაზების რაოდენობაც, სხვადასხვა კონცენტრაციული შერევით ჩვენ შეიძლება დავაფიქსიროთ როგორც ერთ ფაზიანი უბნები, ასევე ორ, სამ და ოთხ ფაზიანი მიკროემულსიური უბნები. მოკლედ კომპონენტების შერევის თანაფარდობაზე არის დამოკიდებული მიკროემულსიური ფაზების რაოდენობა. მიკროემულსიის შემადგენელი კომპონენტის წილის რაოდენობრივი გამოსახვისთვის მარტივი მათემატიკური კომბინაციებით სარგებლობენ:

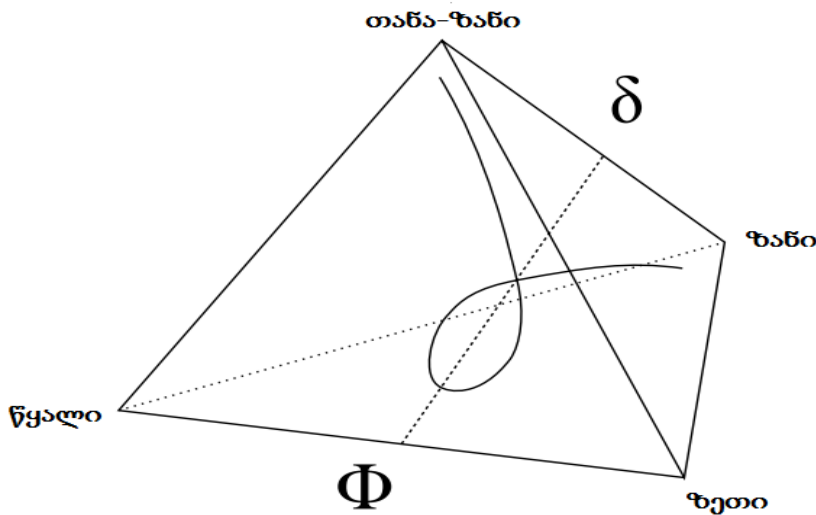
$$(1.7) \text{ ზეთის ფაზური წილი } \phi = \frac{m_{oil}}{m_w + m_{oil}}$$

$$(1.8) \quad \text{ზან-ის მასური წილი} \quad \gamma = \frac{m_{surf}}{m_w + m_{oil} + m_{surf}}$$

$$(1.9) \quad \text{თანაზან-ის მასური წილი} \quad \delta = \frac{m_{cosurf}}{m_{oil} + m_w + m_{surf} + m_{cosurf}}$$

იმ შემთხვევაში, როდესაც მიკროემულსია შედგება ოთხი კომპონენტისგან მაშინ ფაზური თვისებები ამ სისტემის შეიძლება ავლწეროთ ფაზური ტეტრაპედრონით, რომელიც გამოსახულია სურათზე. იმისდამიხედვით რომელი ზანი არის გამოყენებული, ფაზურ დიაგრამას შეიძლება ჰქონდეს განსხვავებული სახე. მაგ., როდესაც ვიყენებთ შაქრებზე დაფუძნებულ ზან-ებს  $C_i$   $G_j$  მაშინ ტეტრაპიდრონი იცვლება ფაზურ პრიზმად. როდესაც ვიყენებთ  $C_i$   $E_j$  ზანს, მაშინ იმისთვის რომ მივიღოთ ერთ ფაზიანი მიკროემულსიური სისტემა თანა-ზანის სისტემაში დამატება არ არის აუცილებელი. სურათზე მოცემულია ფაზური დიაგრამა შაქრების საფუძველზე დამზადებული ზედაპირული ნივთიერებებისგან მიღებული მიკროემულსიური სისტემისთვის.

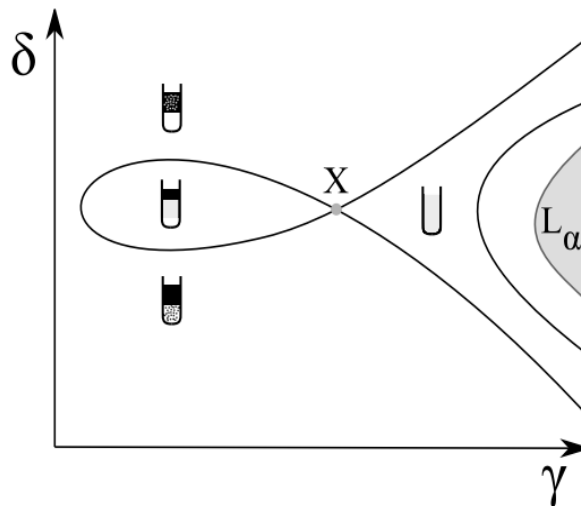
სურათი 3: Kahlweit-Fish-ის თეორიის საფუძველზე აგებული ფაზური ტეტრაპიდრონი [90].



როგორც ხედავთ ფაზური დიაგრამის საბოლოო შედეგს აქვს თევზის ფორმა, სწორედ ამ სახელით არის ის ცნობილი სამეცნიერო საზოგადოებაში და მას ჩვენ ვუწოდებთ კალვეიტ-ფიშის დიაგრამას. მიკროემულსიის ერთფაზიანი სტრუქტურა ამ დიაგრამაზე მდებარეობს თევზის კუდში: ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიები, წყალი-ზეთში, ზეთი-წყალში და ლამელარული სტრუქტურები [91]. ეს ფაზები ასევე ცნობილია ვინსორის ფაზების სახელით, თითოეულ ამ სტრუქტურათაგანს შეესაბამება ვინსორის ფაზის სპეციფიური

რიცხვი [75]. ყოველივე ამის დემონსტრირება უფრო ნათლად შეგვიძლია წარმოვაჩინოთ შემდეგ სურათზე.

სურათზე 4 წარმოდგენილია კალვეიტ-ფიშის დიაგრამა მიკროემულსიური სისტემებისთვის, სადაც თევზის თავში მოქცეულია 3 ფაზიანი სისტემები, თევზის კუდში მოქცეულია ერთ ფაზიანი სისტემები. თევზის კუდის ზედა ნაწილში მოთავსებულია წყალი-ზეთში, ხოლო თევზის კუდის ქვედა ნაწილში მოთავსებულია ზეთი-წყალში მიკროემულსიური სისტემები [90]. ეს დიაგრამა მართებულია სპეციფიური ზანით მომზადებული სისტემისთვის. სხვადასხვა ზანს შეესაბამება სპეციფიური ფაზური დიაგრამა.

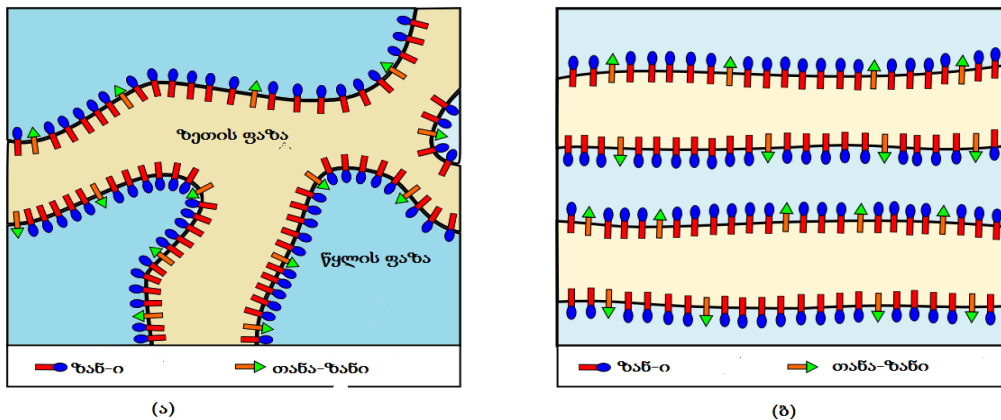


როგორც დიაგრამიდან ჩანს თევზის თავში მოთავსებულია 3 ფაზიანი უბნები, წყლის, ზეთის და მიკროემულსიური ფაზის. ხოლო თევზის კუდში როგორც ხედავთ მოთავსებულია ერთ ფაზიანი სისტემები სადაც მიკროემულსიის შემადგენელი ყველა კომპონენტი ერთმანეთან არიან სოლუბილიზირებული. აქვე ნახავთ ლამელარულ ფაზას რომელიც აღნიშნულია  $L_{\alpha}$  სიმბოლოთი და ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიურ ფაზასაც, რომელიც მოთავსებულია აგრეთვე კუდის ნაწილში.

ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სტრუქტურა მდებარეობს X წერტილის მარჯვნივ თევზის კუდისკენ, ის შედგება ექვივალენტური რაოდენობის წყლისა და ზეთის ფაზისგან რომლებიც ერთმანეთან დაკავშირებულია ზან-ით. აქვე არის წყალი-ზეთში მიკროემულსიური სისტემები, ისინიც თევზის კუდის ნაწილში მდებარეობენ ლამელარული სტრუქტურის ზემოთ, ხოლო ზეთი-წყალში მიკროემულსიური სისტემები მდებარეობენ ლამელარული სტრუქტურის ქვემოთ.

როგორ მიკროემულსიურ სტრუქტურას მივიღებთ დამოკიდებულია ძალიან ბევრ ფაქტორზე, შემადგენელი კომპონენტების ტიპზე, თუ რა რაოდენობით შევურევთ ამ კომპონენტებს ერთმანეთს, სისტემაში არსებულ თანა-ზანზე და მის ტიპზე, ტემპერატურაზე, მუხტზე და სხვადასხვა დანამატებზე. შემდეგ სურათზე წარმოდგენილი იქნება ურთიერთუწყვეტი და ლამელარული სტრუქტურები.

სურათი 4: ა) ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემა, ბ) ლამელარული სისტემა.



ძალიან მარტივი მეთოდი იმისთვის რომ გავიგოთ რომელი სტრუქტურის მიკროემულსიურ სისტემასთან გვაქვს საქმე, არის კონდუქტომეტრული ანალიზი[92]. ზეთი-წყალში და ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიურ სისტემებში ელგამტარობა არის გაცილებით მაღალი ხოლო წყალი-ზეთში მიკროემულსიური სისტემისთვის ელგამტარობა არის შედარებით დაბალი. ლამელარულ სტრუქტურებში ელგამტარობა უფრო დაბალია, ვიდრე ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიების შემთხვევაში. ლამელარულ სისტემებზე კონდუქტომეტრულ ანალიზი ცოტა სპეციფიურია. თუ ელგამტარობა იქნება გაზომილი ლამელარული სტრუქტურის პერპენდიკულარულად, მაშინ ჩვენ მივიღებთ უფრო დაბალ ელგამტარობის სიდიდეს, ვიდრე ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემებისთვის არის დამახასიათებელი. ხოლო თუ ელგამტარობა გაზომილი იქნება ლამელარული სტრუქტურის სიბრტყეში, მაშინ ელგამტარობის სიდიდე იქნება უფრო მაღალი, ვიდრე არის ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიების შემთხვევაში [29].

#### 1.6.5. ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური ფაზა

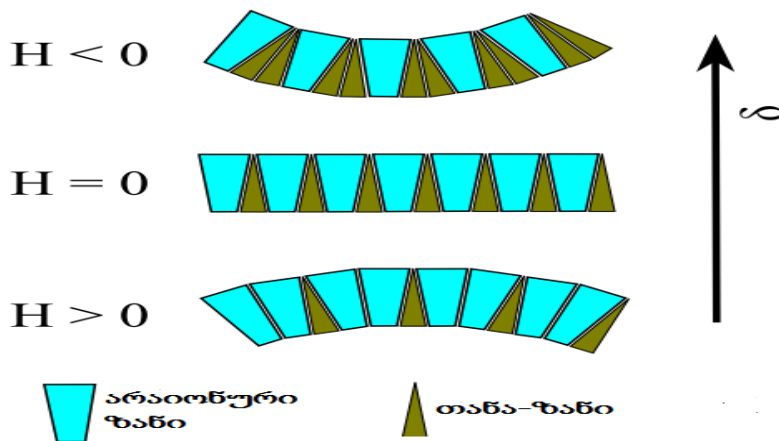
კარლვეიტ-ფიშის დიაგრამაზე (სურათი4) ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური ფაზები გვხვდება x წერტილის მარჯვენა მხარეს, როგორც ავლნიშნეთ ამ

დიაგრამას აქვს თევზის ფორმა, ხოლო მუდმივი მიკროემულსიური ფაზა მოთავსებულია ამ თევზის ფორმის დიაგრამის კუდში. მუდმივი მიკროემულსიური ფაზის სტრუქტურის ვიზუალიზაცია შესაძლებელია ყინულის მსხვრევის ელექტრონული მიკროსკოპის (FFEM) გამოყენებით. ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემები გვთავაზობენ დიდ შიგა ფაზათაშორის ზედაპირს, რაც შესაძლებელია გამოყენებული იქნეს წამლის ტრანსპორტირებისთვის. წყლისა და ზეთის ფაზა ამ სისტემაში არის თანაბარი მოცულობის რომელიც ერთმანეთთან დაკავშირებულია ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებით ან თანაზედაპირულად აქტიური ნივთიერებით. ყველაზე კარგად ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემა ფორმირდება, როდესაც წყლისა და ზეთის ფაზა სისტემაში არის ზუსტად ერთმანეთის ტოლი ანუ  $\phi = 0.5$  [93]. მუდმივი მიკროემულსიური ფაზები შეიძლება იქნეს დეტექტირებული კონდუქტომეტრული ანალიზით ხოლო ზომები შეიძლება დადგინდეს მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევით ან მცირე კუთხეების რენტგენული სხივების გაბნევის ექსპერიმენტით. ასეთი სისტემების დინამიკას ხშირად უწოდებენ თავისუფალ კოლექტიურ მოძრაობას, რომელიც შეიძლება გაიზომოს ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიით, სინათლის დინამიური გაბნევით და ბირთულ მაგნიტური რეზონანსით [94, 95].

#### 1.6.6. მიკროემულსიური ფაზათაშორისი ფენების ელასტიურობა და მოლუნვადობა

მიკროემულსიური სისტემის შიგა ფენების ელასტიურობა და ლუნვადობა დამოკიდებულია მრავალ ფაქტორზე, ერთ-ერთი ამ ფაქტორთაგანია თანაზედაპირულად აქტიური ნივთიერების რაოდენობა. ზოგიერთ ზან-თან შედარებით თანა-ზანის მოლეკულების ჰიდროფილური თავები გაცილებით მცირე ზომისაა სწორედ ეს იწვევს მოლუნვადობის კოეფიციენტის H-ის ცვლილებას პოზიტიური ნიშნიდან ნეგატიურ სიდიდემდე.

სურათზე 5 გამოსახულია არაიონური ზან-ი, რომლის მოლუნვის კოეფიციენტი დამოკიდებული თანა-ზანის  $\delta$  კონცენტრაციაზე.



$H$  შეიძლება გამოთვლილი იქნეს ლოკალური მოღუნვის პარამეტრის გათვალისწინებით  $c_1 = \frac{1}{R_1}$ ,  $c_2 = \frac{1}{R_2}$  სადაც  $R_1, R_2$  არის მოღუნვის რადიუსი.

$$(1.10) \quad H = \frac{1}{2}(c_1 + c_2)$$

როცა  $H > 0$  მაშინ ზეთი-წყალში მიკროემულსიური სისტემები ფორმირდება, როცა  $H$  აღწევს უარყოფით სიდიდეს მაშინ წყალი-ზეთში სისტემები ფორმირდება, ხოლო როცა  $H=0$ , მაშინ ადგილი არ აქვს ზანის ფენების მოღუნვას, აქ უნდა გავითვალისწინოთ გაუსის მოღუნვის კოეფიციენტი  $K$ :  
 $K = c_1 \cdot c_2$

როდესაც  $K$  არის უარყოფითი, მუდმივი მიკროემულსიური სისტემების ფორმირებას აქვს ადგილი, ხოლო როდესაც  $K$  არის დადებითი, მაშინ მიკროემულსიის ზედაპირი არის ბრტყელი და ადგილი აქვს ლამელარული სტრუქტურის ფორმირებას. ზან-ის მოლეკულის მოღუნვაზე ზეგავლენას ახდენს ზედაპირულად აქტიური ნივთიერების ტიპი და თანაზედაპირულად აქტიური ნივთიერების რაოდენობა, ტემპერატურა და სხვადასხვა მუხტისა და ბუნების მქონე დანამატები. ამგვარი გზით ფორმირებული მუდმივი მიკროემულსიური სისტემების ზომები შეიძლება დახასიათებული იქნეს სტრეის მეთოდის გამოყენებით, უფრო კონკრეტულად კი სპეციფიური მახასიათებელი სიგრძის  $\xi$  გამოყენებით [96].

$$(1.11) \quad \xi = \sqrt{\frac{2}{c_1^2 + c_2^2}}$$

ექპერიმენტულად დადასტურებულია რომ  $\xi$  დაახლოებით პერიოდულობის კოეფიციენტის ნახევრის  $d$ -ს ტოლია,  $d$  სიდიდით გამოსახულია მუდმივ მიკროემულსიურ სისტემაში არსებული წყლისა და ზეთის ფაზებს შორის მანძილი [36].

### 1.6.7. მიკროემულსიების ზომები

მიკროემულსიური სისტემები ჩვეულებრივი შეუიარაღებელი თვალისთვის წარმოადგენს გამჭვირვალე ტრანსპარენტულ სისტემებს, ეს გამოწვეულია იმით, რომ ამ სისტემების სტრუქტურის ზომები მერყეობს რამოდენიმე ნანომეტრის ფარგლებში. ასეთი მცირე ზომის სტრუქტურების დასახასიათებლად კვლევის ყველაზე ძლიერი მეთოდებია მცირე კუთხეების რენტგენის სხივების გაბნევა და მცირე კუთხეების ნეიტრონების გაბნევა, რომლებიც იყენებენ მოკლე ტალღებს. კვლევის ამ მეთოდებს შეუძლიათ საკმაოდ დეტალური ინფორმაციის მოცემა მიკროემულსიური სტრუქტურის შესახებ. არსებობს ასევე ყინულის მსხვრევის ელექტრონული მიკროსკოპი FFEM (Freeze Fraction electron microscopy), კვლევის ამ მეთოდსაც იყენებენ მიკროემულსიების დასახასიათებლად მაგრამ აქ საჭიროა საკვლევი ნიმუშის გაყინვა, რაც ზოგიერთი მიკროემულსიური სისტემის შემთხვევაში იწვევს სტრუქტურის ცვლილებას და ოთახის ტემპერატურაზე არსებული სტრუქტურისგან შეიძლება იყოს მკვეთრად განსხვავებული. მიკროემულსიური სისტემები ჰეტეროგენული სისტემებია, ისინი შედგება რამოდენიმე კომპონენტისგან, ამ სისტემების ზომებზე ძირითადად მსჯელობა ხდება კორელაციური სიგრძის საშუალებით  $\xi$  და თითოეული დომენის სიდიდით  $d$ . ეს სიდიდეები დამოკიდებულია იმაზე, თუ როგორი ზედაპირულად აქტიური ნივთიერება იქნა გამოყენებული და როგორია თანაფორდობა  $\phi$  და  $\gamma$  ფაზებს შორის.

## 2. ნეიტრონული გაბნევის და სინათლის დინამიური გაბნევის, ზოგადი მიმოხილვა

ბოლო ათწლეულებია მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა და მცირე კუთხეების რენტგენის სხივების გაბნევა საკმაოდ პოპულარული კვლევის მეთოდებია პროტეინების სტრუქტურის შესწავლის სფეროში. ბოლო წლებში საკმაოდ დაიხვეწა კვლევის აღნიშნული მეთოდების ინსტრუმენტული ნაწილი, როგორც სინქროტრონული, ასევე ბირთვული რეაქტორების ბაზაზე. ყოველწლიურად უმჯობესდება აგრეთვე სპეციალური კომპიუტერული პროგრამების ეფექტურობა მიღებული ექსპერიმენტული შედეგების



გასაანალიზებლად. დღეისდღეობით კვლევის აღნიშნული მეთოდები პრაქტიკულად უკონკურენტოა ბიოლოგიური ნიმუშების სტრუქტურის კვლევაში. ბოლო წლებში, კვლევის გაბნევის მეთოდები სულ უფრო მცირე და მცირე მოცულობის ნიმუშებს მოიხმარენ საანალიზოდ. კერძოდ, მცირე კუთხეების რენტგენის სხივების გაბნევის მეთოდში 10-20მკლ, ხოლო იგივე კონცენტრაციის პროტეინის საანალიზოდ მცირე კუთხეების ნეიტრონულ გაბნევაში 100-300 მკლ ნიმუშია საჭირო. მცირე კუთხეების გაბნევის მეთოდი, საკმაოდ მნიშვნელოვანია მემბრანული პროტეინების კვლევის საქმეში, რომელიც გვაძლევს საკმაოდ მნიშვნელოვან სტრუქტურულ და გეომეტრიულ ინფორმაციას სხვადასხვა მემბრანული პროტეინების შესახებ, რომლებითაც აგებულია უამრავი ბიოლოგიური უნილამელური და მულტილამელური სისტემები. მიუხედავად ამისა, დღეს, გაბნევის მეთოდებს, მემბრანული პროტეინების შესწავლისას აქვთ რამოდენიმე მნიშვნელოვანი გამოწვევა. ჯერ ერთი, გაბნევის ექსპერიმენტისას ძნელია მონოდისპერსული მემბრანული სისტემის მომზადება და მეორე სირთულეა მულტიკომპონენტისგან შედგენილი ბიომემბრანული სისტემიდან გაბნევის ექსპერიმენტით მიღებული შედეგებიდან, მხოლოდ მემბრანული პროტეინის სტრუქტურის ამოწვლილვა.

## 2.1. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა

როგორ შეგვიძლია ნიმუშში განვსაზღვროთ ატომების მდებარეობა და მოძრაობა? ამისთვის საჭიროა, როგორმე მოვახერხოთ ნიმუშის “შიგნით ჩახედვა” და მისი მიკროსამყაროს დანახვა. ამის შესაძლებლობას იძლევა ნეიტრონები, მათ არა აქვთ მუხტი და მათი დიპოლური მომენტი არის ნულის ტოლი ან იმდენად მცირე რომ მათი გაზომვა შეუძლებელია. სწორედ ამ თვისებების გამო ნეიტრონებს შეუძლიათ ნიმუშის მოლეკულებში უფრო ღრმად შეღწევა ვიდრე სხვა დამუხტულ ნაწილაკებს. ნეიტრონები ნიმუშის მოლეკულების ბირთულ ცენტრებთან ურთიერთქმედებენ. ბირთული ძალები სხვა ელექტრულ ძალებთან შედარებით ძალიან მცირე მანძილზე მოქმედებენ კერძოდ რამოდენიმე ფემტომეტრზე. ზოგიერთ საანალიზო ნიმუშში სადაც გაბნევის ცენტრების ანუ ბირთვების ზომა 100,000 ჯერ ნაკლებია ვიდრე ამ ბირთვებს შორის მანძილი, ასეთ შემთხვევებში ნეიტრონების უმეტესობა ისე ტოვებს ნიმუშს, რომ არც გაბნევას აქვს ადგილი და არც ადსორბციას. მსგავსად ბუნებაში მიმდინარე მოვლენებისა, ნეიტრონულ გაბნევასაც აქვს როგორც დადებითი ასევე უარყოფითი მხარეები. დადებით მხარედ შეგვიძლია მივიჩნიოთ ის, რომ ნეიტრონები ნიმუშში ყველაზე ღრმად აღწევენ (მიუხედავად იმისა რომ მათ ზოგჯერ უწევთ ჯერ კონტეინერის გავლა რომელშიც მოთავსებულია მაგალითად თხევადი ნიმუშები და მერე ნიმუშთან

ურთიერთქმედება) და გვამლევინ შესაძლებლობას, რომ ნიმუშის მიკროსამყარო უფრო სიღრმისეულად დავინახოთ. უარყოფითად შეიძლება ჩაითვალოს ის, რომ ნეიტრონები მას შემდეგ რაც შეაღწევენ ნიმუშში ძალიან მცირე რაოდენობით განიბნევიან. ნაკლოვანებაა ის, რომ ნეიტრონული გაბნევა მცირე ინტენსიურობით ხასიათდება, მაგალითად ყველაზე დიდ ბირთულ რეაქტორებზე არსებულ ხელსაწყოებზე ნიმუშის 1მმ ზედაპირზე 1 წამში მოსული ნეიტრონების რაოდენობა არის  $10^8$ , ხოლო იგივე სიმძლავრის სინქროტრონზე, რენტგენის სხივების ინტენსივობა ნიმუშის 1მმ ზედაპირზე, 1წამში გახლავთ  $10^{18}$ . ამ ორი სუსტი მხარის კომბინაცია, მცირე რაოდენობით გაბნევა და ლიმიტირებული ინტენსივობა საანალიზო ნიმუშის ზედაპირზე, ნეიტრონულ გაბნევას ხდის სიგნალ ლიმიტირებულ მეთოდად. მიუხედავად ამისა ნეიტრონული გაბნევა რჩება პრაქტიკული ექსპერიმენტისთვის მნიშვნელოვან კვლევის მეთოდად, იმიტომ რომ ნიმუშის სტრუქტურის შესახებ ის ინფორმაცია რაც ამ მეთოდით მიიღება სხვა უფრო იაფი გზით შეუძლებელია მიღებულ იქნას. დღესდღეისობით არ არსებობს ერთი უნიკალური ინსტრუმენტი რომელიც ნეიტრონული გაბნევის ყველა ასპექტს მოიცავდეს, სწორედ ამიტომ დღეს ჩვენ გვაქვს ნეიტრონული გაბნევის ინსტრუმენტების მრავალფეროვნება, რომელთაგან თითოეულ მათგანზე მცდელობაა გადაიჭრას ნეიტრონული გაბნევის კონკრეტული პრობლემები, კერძოდ ისინი ფოკუსირებული არიან მიიღონ უფრო მეტი ნეიტრონული ინტენსიურობა ინსტრუმენტზე, რათა მოახერხონ ნიმუშის უფრო ზუსტი დახასიათება.

მიუხედავად ამ ბევრი უნიკალური თვისებისა, ნეიტრონული გაბნევა არის ერთ-ერთი მეთოდი იმ მრავალი მეთოდიდან, რომელიც გამოიყენება ნიმუშების სტრუქტურული ანალიზისას. ყველა სხვა მეთოდი როგორც არის რენტგენის სხივების გაბნევა, ელექტრონული მიკროსკოპია და ბირთულ მაგნიტური რეზონანსი წარმოადგენს დამატებით მეთოდებს ნიმუშის სტრუქტურის სრული სურათის დასანახად.

## 2.2. ნეიტრონული გაბნევა

ნეიტრონული გაბნევის არსის ასახსნელად, თავდაპირველად განხილული იქნება გაბნევა ერთი ბირთვიდან, ხოლო შემდეგ მსჯელობა განზოგადდება ყველა იმ ატომბირთვზე, რომლისგანაც შედგება საკვლევი საანალიზო თხევადი თუ მყარი ნიმუშები. ასეთი განხილვა იძლევა საშუალებას განვიხილოთ ნეიტრონული დიფრაქცია, რომელიც გამოიყენება საკვლევ ნიმუშებში ატომების მდებარეობის დასადგენად, განვიხილოთ აგრეთვე არაელასტიური ნეიტრონული გაბნევა, რომელიც იძლევა ინფორმაციას

ნიმუშში ატომების ვიბრაციასა და გადაადგილებაზე. განხილვის განსხვავებულ ჭრილში გადაყვანით, შესაძლებელია აღიწეროს მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის საფუძვლები, რომელიც გამოიყენება დიდი ზომის ნაწილაკების სტრუქტურული დახასიათებისთვის, როგორცაა კოლოიდური სისტემები, პოლიმერები და ბიოლოგიური მოლეკულები, აგრეთვე განხილულ იქნას ნეიტრონული რეფლექტომეტრი, რომელიც იძლევა ინფორმაციას მრავალშრიანი სისტემების სტრუქტურის შესახებ და აგრეთვე სისტემის ზედაპირზე მოლეკულების თუ ატომების განლაგების შესახებ. აქვე მიმოიხილება ნეიტრონული გაბნევის ის მეთოდი, რომელიც დამოკიდებულია ატომბირთვების სპინურ მდგომარეობაზე, ასევე განიხილება პოლარიზაციული ნეიტრონული გაბნევა, რომელიც გვაძლევს ინფორმაციას ნიმუშების ვექტორ მაგნეტიზაციის შესახებ.

### 2.3. გაბნევა ფიქსირებული ატომბირთვიდან

ნეიტრონული გაბნევა ბირთვიდან, არის კვანტურ მექანიკური პროცესი. რეალურად პროცესი აღიწერება ნეიტრონისა და ატომბირთვის ტალღური ფუნქციით. საბედნიეროდ ამ კვანტურ მექანიკური გამოთვლების საბოლოო შედეგების გაგება ადვილია, ყველა იმ ტექნიკური დეტალური საფეხურის გვერდის ავლით, რომელიც საჭიროა გამოთვლების საბოლოო შედეგების მისაღებად. ამ ძალიან რთული პროცესის აღსაწერად მნიშვნელოვანია მოქნილი და აპრობირებული თეორიული მოდელის გამოყენება. კერძოდ, იგულისხმება, რომ ზოგ შემთხვევაში ნეიტრონები დახასიათდება ტალღური ფუნქციით, რომელიც მოგვცემს ინფორმაციას კონკრეტულ დროის მომენტში ნეიტრონის სივრცეში ადგილმდებარეობის შესახებ და ზოგ შემთხვევაში კი ნეიტრონები განიხილება, როგორც ნაწილაკი (კორპუსკულა). ტალღურ-ნაწილაკური სტრატეგია და ელექტრომაგნიტური დუალიზმი სუბატომური ნაწილაკების დახასიათების საფუძველს წარმოადგენს.

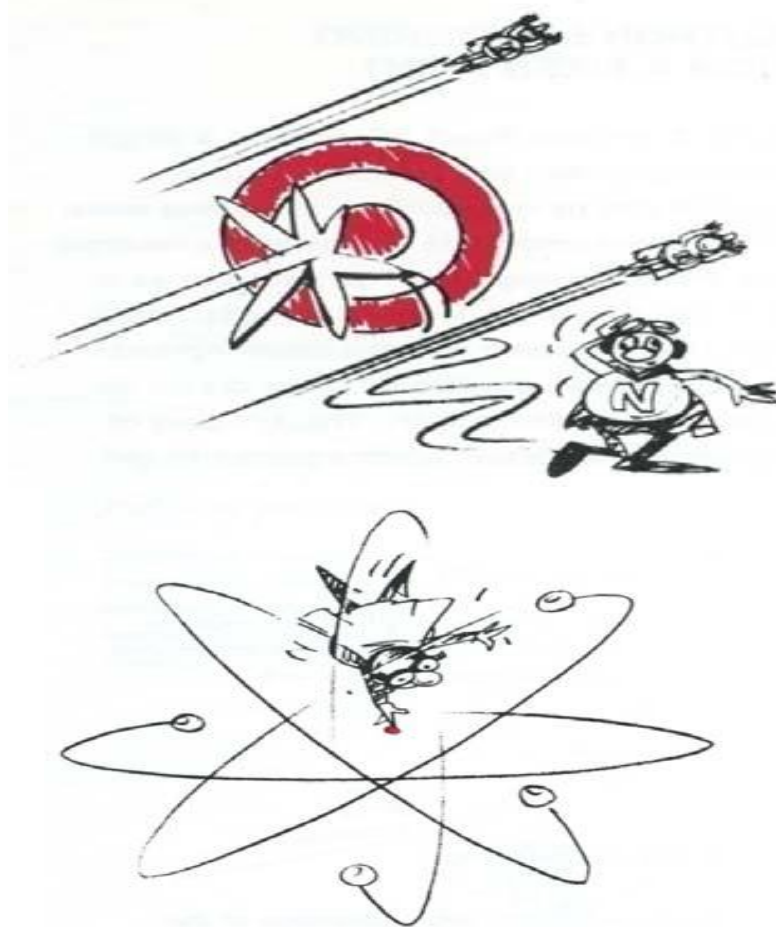
ძირითადად გაბნევის ექსპერიმენტში გამოყენებული ნეიტრონების ენერგია და აირადი ნივთიერების მოლეკულების ენერგია ერთმანეთის ტოლია. აგრეთვე სიხშირეებიც, რომლითაც ნეიტრონები გადაადგილდებიან ძალიან ახლოსაა აირადი ნივთიერების მოლეკულების სიხშირეებისთან, რამოდენიმე კმ წამში. კვანტური მექანიკა გვეუბნება, რომ ნეიტრონის ტალღის სიგრძე უკუპროპორციულად არის დამოკიდებული ნეიტრონის გადაადგილების სიჩქარეზე, უმეტესწილად გაბნევის ექსპერიმენტში გამოყენებული ნეიტრონების ტალღის სიგრძე  $\lambda$  0.15მ-დან 15მ-მდე ინტერვალშია. ძირითადად გაბნევის ექსპერიმენტში ჩვენ ვიყენებთ ნეიტრონის ტალღურ ვექტორს  $\vec{k}$ , რომელიც არის  $2\pi/\lambda$  და გვაძლევს ინფორმაციას ნეიტრონის ტრაექტორიის

შესახებ. ტალღური ვექტორის სიდიდე დამოკიდებულია ნეიტრონულ სიხშირეზე შემდეგი ფორმულით:

$$\vec{K} = 2\pi mv / h, \text{ სადაც } h \text{ პლანკის მუდმივაა, ხოლო } m \text{ ნეიტრონის მასა}$$

თავისუფალი ატომბირთვიდან ნეიტრონების გაბნევა შეიძლება აღიწეროს, ნეიტრონისა და ატომბირთვის ურთიერთქმედების ალბათობით,  $\delta$ , რომელის იზომება ბარნებში (1 ბარნი =  $10^{-28}$  მ<sup>2</sup>).  $\delta$  სიდიდე ატომბირთვის ის ეფექტური არეა, სადაც გაივლის ნეიტრონი. ნეიტრონი, რომელიც გაივლის ამ არეს, ურთიერთქმედებს ატომბირთვთან და განიხნევა იზოტროპულად ნებისმიერი მიმართულებით.

გაბნევა ძირითადად არის იზოტროპული, რადგან ნეიტრონისა და ატომბირთვს შორის ურთიერთქმედება ძალიან მცირეა, ატომბირთვის მცირე ზომის გამო ნეიტრონის ტალღის სიგრძესთან შედარებით. ამრიგად, გაბნევის ექსპერიმენტში ატომბირთვი განიხილება, როგორც წერტილოვანი გამბნევი ცენტრი.

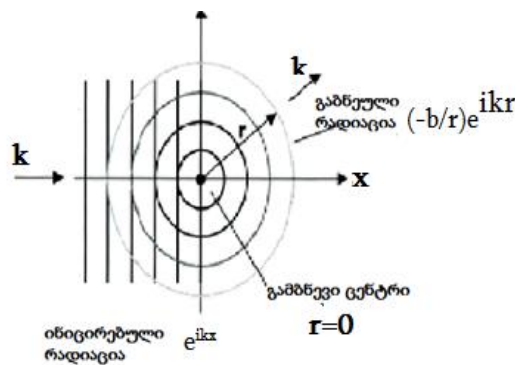


ატომბირთვის ეფექტური არეა, რომელიც შეთავაზებულია ინიცირებული ნეიტრონებისთვის საკონტაქტოდ. წერტილოვანი გამბნევი: ობიექტი რომელიც

ინიცირებულ რადიაციას იზოტროპულად განაზღვრავს ნებისმიერი მიმართულებით და რომლის ზომაც ინიცირებული რადიაციის ტალღის სიგრძესთან შედარებით გაცილებით მცირეა.

წარმოვიდგინოთ, რომ ნეიტრონს რომელსაც ჩვენ მივმართავთ დროის კონკრეტულ შუალედში ფიქსირებული ატომბირთვისაკენ, აქვს შემდეგი განსაზღვრული სიდიდის მქონე ტალღური ფუნქცია,  $e^{ikr}$  სხვა სიტყვებით ამგვარ ნეიტრონებს შეგვიძლია ვუწოდოთ სფერული ტალღები, რომლებსაც აქვთ განსაზღვრული ამპლიტუდა. გავითვალისწინოთ ისიც, რომ მოცემული ტალღური ფუნქციის კვადრატული მოდული არის კონკრეტული სიდიდე, რომელიც თანაბარია ატომბირთვის ყველა მიმართულებით  $r$ . ამგვარად, ნეიტრონს აქვს თანაბარი ალბათობა იმოდროს ნებისმიერი მიმართულებით, მაგრამ განსაზღვრული მომენტი  $mv = \hbar v / 2\pi$ .

ნახაზზე 2.2 გამოსახულია ტალღა, რომელიც მიმართულია კოორდინატა სისტემის  $x$  მიმართულებით. ნეიტრონული ტალღის გაბნევის ამპლიტუდა დამოკიდებულია ნეიტრონისა და ატომბირთვს შორის ურთიერთქმედების სიდიდეზე. რადგან გაბნეული ტალღა არის იზოტროპული, მისი ტალღური ფუნქცია შეიძლება დაიწეროს შემდეგნაირად  $(-b/r)e^{ikr}$  თუ გამბნევი ატომბირთვი მდებარეობს კოორდინატა სათავეში.



**სურათი 2.2** ინიცირებული ნეიტრონების ნაკადი რომელიც მიმართულია კოორდინატა სისტემის  $x$  ღერძზე მდებარე გამბნევი ცენტრის მიმართულებით, შეიძლება გამოვსახოთ როგორც სფერული ტალღა  $e^{ikx}$ , რომელსაც აქვს განსაზღვრული ამპლიტუდა. იმიტომ რომ ნეიტრონი გამბნევი ცენტრს, ანუ ატომბირთვს აღიქვამს როგორც წერტილოვან სიდიდეს, ამიტომ გაბნევა იქნება იზოტროპული. შედეგად ნეიტრონისა და ატომბირთვის ურთიერთქმედებისას, ნეიტრონი განიბნევა სფერულად ყველა მიმართულებით განსაზღვრული ამპლიტუდით  $b/r$ . რაც ვიზუალურად

ნაჩვენებია ნახაზზე 2.2-ზე. მსჯელობის დასაწყისში აღნიშნული იყო, რომ განიხილებოდა ფიქსირებული ატომბირთვიდან გაბნევა, რაც ნიშნავს, რომ ადგილი აქვს ელასტიურ გაბნევას, ანუ ენერგიის მიმოცვლა ნეიტრონსა და გაბნევის ცენტრს შორის არ ხდება, რის გამოც ინიცირებულ და გაბნეულ ნეიტრონებს ტალღური ვექტორის  $K$ -ს ერთნაირი სიდიდე ახასიათებთ.

ნახაზიდან 2.2 ნათლად ჩანს, რომ გაბნეული ნეიტრონების ტალღური ფუნქციიდან,  $1/r$  ფაქტორი გამოსახავს გაბნეული ნეიტრონების უკუპროპორციულობის კვადრატის კანონზომიერებას, რომელიც მართებულია ყველა სხვა ტალღური მოძრაობისთვის. ეს წინადადება მარტივად შემდეგნაირად შეგვიძლია გავიგოთ. ნეიტრონული ნაკადის ინტენსიურობა, რომელიც გამოხატულია ტალღური ფუნქციის კვადრატით, მცირდება რაც უფრო დიდია მანძილი ინიცირებული ნეიტრონების ნაკადსა და გაბნევის ცენტრს შორის. გაბნევის სიდიდე  $b$  რომელიც გამოსახულია მუდმივით, გვაძლევს ინფორმაციას ნეიტრონისა და ატომბირთვის ურთიერთქმედების სიდიდეზე.  $b$ -ს უარყოფითი ნიშანი გვაძლევს ინფორმაციას იმის შესახებ, რომ ნეიტრონსა და ატომბირთვს შორის განზიდვის ურთიერთქმედება არის დადებითი სიდიდე.

იმის გათვალისწინებით, რომ განიხილება ფიქსირებულ ატომბირთვსა და ნეიტრონის ურთიერთქმედების შემთხვევა, შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ ნეიტრონების ენერგია იმდენად მცირეა, რომ ისინი ვერ შეძლებენ ატომბირთვის შიგა ენერგეტიკული მდგომარეობის შეცვლას, ანუ მთელი გაბნევის პროცესი მიმდინარეობს ენერგიების ყოველგვარი ცვლილების გარეშე, ასეთ პროცესს ელასტიური გაბნევა ეწოდება. ამრიგად, რადგან გაბნევის პროცესში ინიცირებული და გაბნეული ნეიტრონების ენერგია არ იცვლება, შესაბამისად არ შეიცვლება მათი ტალღური ვექტორი  $k$ , რომელიც ინიცირებული და გაბნეული ნეიტრონების შემთხვევაში ერთმანეთის ტოლია. ყოველივე ამის გათვალისწინებით გაბნევის ეფექტური განივკვეთი შეგვიძლია ჩავწეროთ შემდეგნაირად  $\delta = 4\pi b^2$ . გაბნევის სიდიდე  $b$  წარმოდგენილია, როგორც ატომბირთვის რადიუსის ნახევარი, სადაც დიდი ალბათობით ნეიტრონებს ექნებათ ურთიერთქმედება. ძირითადად  $b$  არის ენერგიისგან დამოუკიდებელი სიდიდე, რომელიც უნდა გაიზომოს ექსპერიმენტულად. დღესდღეისობით ძალიან ბევრი ელემენტისთვის ეს სიდიდეები გაზომილია და ცხრილური მონაცემები ამ სიდიდეებზე შეგვიძლია მარტივად ავიღოთ შემდეგი ვებგვერდიდან. <https://www.ncnr.nist.gov/resources/sldcalc.html> ან გამოვიყენოთ სპეციალური ბარნ ცხრილები. ნეიტრონული გაბნევის სიდიდე არ არის კორელაციაში ელემენტის ატომურ რიცხვთან და ის იცვლება ერთი და იგივე ელემენტის იზოტოპიდან იზოტოპზე გადასვლისას მაგ., წყალბადის ატომს და მის იზოტოპს რენტგენის სხივების გაბნევისას აქვთ გაბნევის ძალიან

დაბალი სიდიდე, რადგან მათ აქვთ ერთი ელექტრონი, ხოლო ნეიტრონული გაბნევისას ეს სიდიდე საკმაოდ დიდია და წყალბადის ატომის იზოტოპების გაბნევის სიდიდე მკვეთრად განსხვავდება ერთმანეთისგან. ნეიტრონული გაბნევის ეს თვისება გვაძლევს საშუალებას მოვახდინოთ ჩვენთვის საინტერესო მოლეკულების მონიშვნა იზოტოპური ატომებით და მივიღოთ დეტალური ინფორმაცია ჩვენთვის საინტერესო სისტემების სტრუქტურის შესახებ.

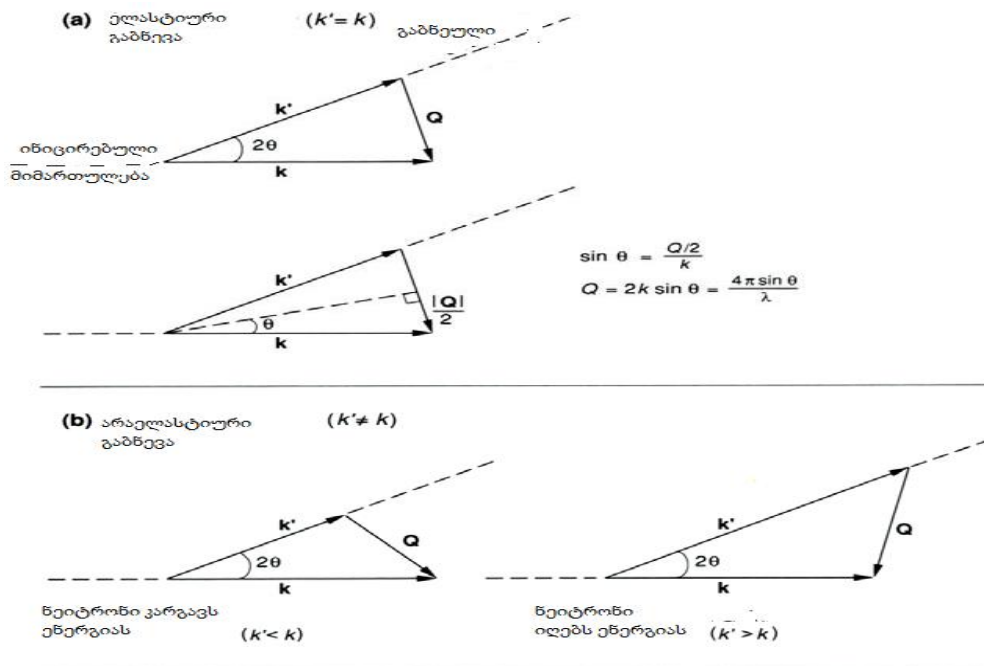
### 2.3.1. ნეიტრონული გაბნევა ნივთიერებიდან.

ნივთიერებებიდან ნეიტრონული გაბნევის შესახებ ინფორმაციის მიღებისას, ამ ნივთიერების შემადგენელი, თითოეული მოლეკულის მიერ გაბნეული ნეიტრონები იკრიბება. ამ რთული კვანტურ-მექანიკური გათვლების საბოლოო შედეგების გაგება საკმაოდ ადვილია, მიუხედავად იმისა რომ გამოთვლების საბოლოო შედეგის მისაღებად საჭიროა უამრავი რთული საფეხურის გავლა. აღნიშნული რთული კვანტურ-მექანიკური საფეხურების გვერდის ავლით განვიხილავთ მხოლოდ საბოლოო შედეგს. ნივთიერებებიდან ნეიტრონების გაბნევას აქვს გავლენა როგორც ნეიტრონების, ასევე ნივთიერების ენერჯიასა და მომენტის ცვლილებაზე. გაბნევის ექსპერიმენტი ყოველთვის არ არის ელასტიური პროცესი, როგორც ამას ადგილი აქვს ერთი ფიქსირებული ატომის შემთხვევაში, რადგანაც ზოგიერთ ნივთიერებაში ატომები და მოლეკულები გადაადგილდებიან თავისუფლად და მოუწესრიგებლად ნებისმიერი მიმართულებით. ნეიტრონებთან შეჯახებისას მოლეკულებმა შესაძლოა შეიცვალონ მიმართულება (ბილიარდის მაგალითი დაგვეხმარება ამ პროცესის ვიზუალური წარმოსახვისთვის), ხოლო იმ შემთხვევაში თუ მოლეკულები ნეიტრონებთან ურთიერთქმედებისას უკვე მოძრაობენ და ოსცილირებენ მაშინ ისინი მოახდენენ ნეიტრონების ენერჯიაზე გავლენას, რის შედეგადაც გაბნევისას შეიცვლება ნეიტრონების ენერჯია, ხოლო სისტემის ჯამური ენერჯია უცვლელი დარჩება. იგულისხმება, რომ თუ გაბნევისას ნეიტრონი დაკარგავს ენერჯიის რაღაც ნაწილს, მაშინ იგივე რაოდენობის ენერჯიას მოიგებს ატომბირთვი ისე, რომ სისტემის სრული ენერჯია დარჩება უცვლელი.

ფორმულიდან 2.1-დან ნათლად ჩანს, რომ ამ პროცესის მიმდინარეობისას ადგილი ექნება ნეიტრონების მომენტის ცვლილებას, რომელიც შეგვიძლია შემდეგი ფორმულით გამოვსახოთ, ამასთან, ნეიტრონის ტალღური ვექტორი ატომბირთვთან შეჯახებამდე და შეჯახების შემდეგ ერთმანეთისგან განსხვავებული იქნება. ეს სხვაობა შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგი გზით.

$$(2.1) \quad h\bar{Q} / 2\pi = h(\bar{k} - \bar{k}') / 2\pi$$

სადაც  $\vec{k}$ , არის ინიცირებული საწყისი ნეიტრონების ტალღური ვექტორი, ხოლო  $\vec{k}'$  გაბნეული ნეიტრონების ტალღური ვექტორი. ხოლო სიდიდე  $Q = \vec{k} - \vec{k}'$  ცნობილია როგორც გაბნევის ვექტორი, ხოლო გაბნევის ვექტორის დამოკიდებულება  $Q$ ,  $\vec{k}$ , და  $\vec{k}'$  სიდიდეებზე შეიძლება გამოვსახოთ გაბნევის სამკუთხედით, რომელიც მოცემულია ნახაზზე 2.3. კუთხე  $2\theta$  რომელიც გამოსახულია გაბნევის სამკუთხედზე ცნობილია ნეიტრონების გაბნევის კუთხის სახელით.<sup>1</sup>



გაბნევის ექსპერიმენტისას ნივთიერების მიერ გაბნეული ნეიტრონების ინტენსიურობა გამოსახულია ცვლადი  $Q$  და  $E$  სიდიდეების ფუნქციის სახით  $I(Q, E)$ . ძალიან ხშირად ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტის შედეგების  $I(Q, E)$  ფორმით გამოსახვა ცნობილია ნეიტრონული გაბნევის კანონის სახელით. 1954 წელს ვან ჰოვმა (1) შემოგვთავაზა რომ ნეიტრონული გაბნევის კანონის ჩამოყალიბება შესაძლებელია აგრეთვე ინტენსივობის დროზე დამოკიდებულების სახით. კერძოდ, ამ ფორმით შედეგების გამოსახვისას შესაძლებელია დროის ნებისმიერ მომენტში დავაკვირდეთ ატომების გადაადგილებას და მათ ადგილმდებარეობას საანალიზო ნიმუშში. ვან ჰოვის კანონით შესაძლებელია  $I(Q, E)$  ფუნქციის ფურიე გარდაქმნით, სისტემაში

გაბნევის სამკუთხედზე გამოსახული  $2\theta$  ნეიტრონების გაბნევის კუთხეა. ელასტიური გაბნევისას სადაც  $k=k'$  გაბნევის სამკუთხედზე მცირედი ტრიგონომეტრიული მანიპულაციებით ვნახავთ რომ  $Q = 2\pi \sin \theta / \lambda$ .



ვიპოვოთ ორი ერთმანეთისგან გარკვეული მანძილით დაშორებული ატომების ადგილმდებარეობა.

ვან ჰოვის შრომამ, შესაძლებლობა მისცა ფერმის შემოეთავაზებინა ახალი ხედვა ნეიტრონის და ატომბირთვის ურთიერთქმედების შესახებ, კერძოდ, ნეიტრონსა და ატომბირთვს შორის ფაქტობრივად არსებული ურთიერთქმედება შეგვიძლია ჩავანაცვლოთ ეფექტური პოტენციური ურთიერთქმედებით, რომელიც გაცილებით მცირე სიდიდეა, ვიდრე ნეიტრონსა და ატომბირთვს შორის არსებული ფაქტობრივი ურთიერთქმედების სიდიდე. ეგრეთწოდებული ფსევდო პოტენციური ურთიერთქმედების შედეგად მიიღება იგივე გაბნევის პროცესი, რა პროცესიც მიიღება ფაქტიური ურთიერთქმედების შედეგად. ფსევდო პოტენციური ურთიერთქმედება არის საკმარისად სუსტი, რათა გაბნევის პროცესი დავახასიათოთ ბორნის (2) ალბათობის თეორიით, რომელიც შემდეგნაირად შეიძლება ჩამოვყალიბოთ: ალბათობა იმისა, რომ  $\vec{K}$  ტალღური ვექტორის მქონე ნეიტრონი, გაბნეული  $V(\vec{r})$  პოტენციით, გარდაიქმნება  $\vec{K}'$  გაბნეული ნეიტრონის ტალღურ ვექტორად, პროპორციულია შემდეგი სიდიდის

$$(2.2) \quad \left| \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} d\vec{r} \right|^2 = \left| \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} V(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2$$

ამ ფორმულაში გამოყენებული  $V(\vec{r})$  პოტენციალი, არის ფერმის ფსევდო პოტენციალი, რომელიც გვამღევს შესაძლებლობას, მოლეკულათა ანსამბლში განვსაზღვროთ კონკრეტული N ატომის მდებარეობა  $\vec{r}_j$  შემდეგი ფორმულით:

$$(2.3) \quad V(\vec{r}_j) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_j b_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j),$$

სადაც  $m$  არის ნეიტრონის მასა, ხოლო  $\delta(\vec{r})$  არის დირაკის დელტა ფუნქცია, რომელიც იღებს რიცხვით მნიშვნელობას  $\vec{r}$  პოზიციაზე და ნულოვან მნიშვნელობას ყველა დანარჩენ პოზიციაზე. ფორმულა 2.3-ში  $b_j$  გაბნევის ეფექტური განივკვეთის ფართობია. ვან ჰოვმა შეძლო რომ გაბნევის კანონი  $I(\vec{Q}, E)$  გამოესახა შემდეგი ფორმით.

$$(2.4) \quad I(\vec{Q}, E) = \frac{1}{h} \frac{k'}{k} \sum_{i,j} b_i b_j \int_{-\infty}^{+\infty} \langle e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}_i(0)} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_j(t)} \rangle e^{i-(E/\hbar)t} dt.$$

ამ ფორმულაში ატომები გამოსახული  $i$  სიმბოლოთი არიან  $r_i$  პოზიციაზე  $t(0)$  დროში, ხოლო ატომები გამოსახული  $j$  სიმბოლოთი, არიან  $r_j$  პოზიციაზე

დროის  $t$  მომენტში. ფორმულა 2.4-ით გამოვსახავთ ნიმუშში ატომის ყველა მდებარეობის ჯამს. ამ სპეციალური მათემატიკური  $\langle \rangle$  სიმბოლოთი გამოსახულია ის, რომ გამოსათვლელია თერმოდინამიკური ალბათობა ყველა იმ კონფიგურაციის შესახებ, რომელიც ჩვენმა ნიმუშმა შეიძლება მიიღოს. ვან ჰოვის გამოთვლების დეტალური საფეხურები მოცემულია რამოდენიმე სახელმძღვანელოში (გამოთვლების დეტალები იხილეთ შემდეგ სახელმძღვანელოში: „The Theory of Thermal Neutron Scattering „) [3].

ატომის მდებარეობის ვექტორები  $\vec{r}_i(0)$  და  $\vec{r}_j(t)$  არის ატომის მდებარეობის კვანტურ-მექანიკური ოპერატორები. ფორმულა 2.4 ერთი შეხედვით შეიძლება მარტივად მოგვეჩვენოს, მაგრამ პრაქტიკაში ეს ფორმულა არც ისე ადვილია, როგორც ერთი შეხედვით ჩანს. იმისთვის, რომ შეგვექმნას წარმოდგენა თუ რა ინფორმაციას გვაძლევს ეს ფორმულა, ამისთვის ჩვენ დავტოვებთ უცვლელს ფორმულის რაღაც ნაწილს და ვფოკუსირდებით ვექტორებზე, როგორც კლასიკურ სიდიდეებზე. ამ შემთხვევაში ფორმულა 2.4-ში ორმაგი ჯამი გარდაიქმნება შემდეგი სახით:

$$(2.5) \quad \sum_{i,j} b_i b_j \langle e^{-i\vec{Q} \cdot \{\vec{r}_j(0) - \vec{r}_j(t)\}} \rangle = \sum_{i,j} b_i b_j \int_{sample} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i(0) + \vec{r}_j(t)) e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} d\vec{r}.$$

დავუშვათ, რომ ჩვენს სისტემაში მყოფ ატომებს აქვთ ერთნაირი გაბნევის განივკვეთი ანუ  $b_i = b_j = b$ . მაშინ ფორმულა 2.5-ის მარჯვენა ნაწილი გარდაიქმნება შემდეგი სახით

$$(2.6) \quad Nb^2 \int_{sample} G(\vec{r}, t) e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}},$$

სადაც

$$(2.7) \quad G(\vec{r}, t) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \delta(\vec{r} - [\vec{r}_i(0) - \vec{r}_j(t)]).$$

სადაც,  $N$  არის ატომების რიცხვი ნიმუშში.  $G(\vec{r}, t)$  ფუნქცია არის ნულის ტოლი, იმ შემთხვევაში, თუ ატომბირთვების მდებარეობა გამოსახული  $i$  სიმბოლოთი, დროის საწყის პერიოდში განსხვავებული არ იქნა,  $j$  სიმბოლოთი გამოსახული ატომბირთვების მდებარეობისაგან დროის  $t$  მომენტში, მაშინ ატომბირთვების მდებარეობა დროის  $t$  მომენტში  $\vec{r}$  ვექტორით შეიძლება გამოვსახოთ. მაშასადამე, ეს ფუნქცია გვაძლევს ინფორმაციას იმ ალბათობის შესახებ, რომ ჩვენს საანალიზო ნიმუშში დროის საწყის მომენტში ატომბირთვების ნაწილი იქნება ჩვენი კოორდინატთა სისტემის საწყის წერტილზე, ხოლო დროის  $t$

მომენტში ეს ატომები იქნებიან  $\vec{r}$  პოზიციაზე. სწორედ ამ მიზეზის გამო  $G(\vec{r}, t)$  ფუნქციას უწოდებენ დროზე დამოკიდებულ ატომ-წყვილების კორელაციის ფუნქციას, რადგანაც აღნიშნული ფუნქცია აღწერს ატომბირთვის მდებარეობის და პოზიციის დამოკიდებულებას დროზე. ატომბირთვის მდებარეობის  $G(\vec{r}, t)$  ფუნქციის გათვალისწინებით ვან ჰოვის გაბნევის კანონი შეიძლება დაიწეროს შემდეგნაირად:

$$(2.8) \quad I(\vec{Q}, E) = \frac{Nb^2}{h} \frac{k'}{k} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\text{sample}} G(\vec{r}, t) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} e^{i(E/\hbar)t} d\vec{r},$$

ამ ფორმულიდან ნათლად ჩანს, რომ გაბნევის კანონი აღწერს ატომბირთვის პოზიციის პირდაპირპროპორციულ დამოკიდებულებას დროზე, რომელიც მიიღება ატომ-წყვილის დროზე დამოკიდებული კორელაციის ფუნქციის ფურიე გარდაქმნით. ფორმულა 2.8-ს ფიზიკური აზრი მდგომარეობს შემდეგში: ვიღებთ ინფორმაციას საკვლევი ნივთიერების სტრუქტურის შესახებ (ნიმუშში ატომების განლაგების შესახებ, რა მანძილითაა ისინი ერთმანეთისგან დაშორებული და ა.შ), აგრეთვე ვაკვირდებით იმ გზას, თუ როგორ ვითარდება ეს სტრუქტურა დროში.

ფორმულა 2.4-ში გამოსახული გაბნევის განივკვეთის ფართობის სიდიდეები, თუნდაც ისეთი მარტივი აგებულების ნიმუშებისთვის, რომლებიც შედგებიან ერთი და იგივე ელემენტის სხვადასხვა იზოტოპებისგან, განსხვავებულია. ეს გამოწვეულია იმით, რომ ნეიტრონისა და ატომბირთვის ურთიერთქმედება დამოკიდებულია აგრეთვე სპინებზე, ხოლო ზოგიერთ იზოტოპს აქვს სპინური მდგომარეობის რამოდენიმე ვარიაცია. ზოგადად დღეს ჩვენ არ გვაქვს არანაირი კორელაცია, რომელიც ატომბირთვის სპინური მდგომარეობით მოგვცემდა ინფორმაციას ამ კონკრეტული ატომბირთვის მდებარეობის შესახებ ნიმუშში. აქედან გამომდინარე, გაბნევის განივკვეთის ფართობი (ფორმულა 2.4), შეიძლება გავასაშუალოვოთ იმდაგვარად, რომ არ გამოვიყენოთ თერმოდინამიკური გასაშუალოებული სიდიდე, რომელიც ბრტყელი ფრჩხილებით  $\langle \rangle$  მოცემულია ფორმულა 2.4-ში. სწორედ ამ მიზნით ჩვენ ვფოკუსირდებით ორ გასაშუალოებულ სიდიდეზე, რომლებიც გამოსახულია  $\langle b \rangle$  და  $\langle b^2 \rangle$  სიდიდეებით. გამომდინარე აქედან, ფორმულა 2.4 შესაძლებელია გარდავექმნათ იმგვარად, რომ გაბნევის პროცესში გათვალისწინებულ იქნეს ატომბირთვის სპინური მდგომარეობის გავლენაც:

$$(2.9) \quad \sum_{i,j} \langle b_i b_j \rangle A_{i,j} = \sum_{i,j} \langle b \rangle^2 A_{i,j} + \sum_i (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) A_{i,i}$$

სადაც  $A_{i,j}$  გამოსახავს ფორმულა 2.4-ში გამოყენებულ ინტეგრალს. ფორმულა 2.9-ის პირველი ნაწილი ასახავს ნიმუშში არსებულ ყველა ატომბირთვიდან ჯამურ გაბნევას ფორმულის პირველი ნაწილით გამოსახულია კოჰერენტული გაბნევა, სადაც ნეიტრონები განიბნევიან, ნიმუშში ერთმანეთთან შერეული განსხვავებული ატომბირთვებიდან. გაბნევის ეს ფორმა დამოკიდებულია ატომთაშორის მანძილზე და გაბნევის ვექტორზე  $\vec{Q}$ , რომლითაც ვიღებთ ინფორმაციას ნიმუშის სტრუქტურის შესახებ. მაშასადამე, ელასტიური კოჰერენტული გაბნევა გვაძლევს ინფორმაციას ნიმუშის სტრუქტურის შესახებ, ხოლო არაელასტიური კოჰერენტული გაბნევა ( $E \neq 0$ ) გვაძლევს ინფორმაციას ნიმუშში არსებული ატომბირთვების კოლექტიური მოძრაობის ანუ გადაადგილების შესახებ, როგორცაა მაგ., კრისტალურ სტრუქტურებში წარმოქმნილი ვიბრაციული ტალღები.



კოჰერენტული გაბნევისას ნეიტრონები ურთიერთქმედებენ ნიმუშში არსებულ ყველა ატომბირთვთან და განიბნევიან განსაზღვრული ფაზით ისე რომ რაღაც წერტილში გაბნეული ნეიტრონები კვლავ შეერევიან ერთმანეთს და იძლევიან დეტექტორზე საანალიზო სიგნალს.

გაბნევის მეორე ფორმას ანუ არაკოჰერენტულ გაბნევას ასახავს ფორმულა 2.9-ის მეორე ნაწილი. ამ ნაწილში განსხვავებული ატომბირთვებიდან გაბნეული ნეიტრონების ერთმანეთთან შერევას არ აქვს ადგილი. გაბნეული ნეიტრონების ინტენსიურობა აქ გამოსახება ატომბირთვის მიერ ნებისმიერი მიმართულებით გაბნეული ნეიტრონების ჯამით. ხოლო არაკოჰერენტული ელასტიური გაბნევა არაკოჰერენტულ არაელასტიურ გაბნევისგან უნდა განვასხვავოთ შემდეგნაირად: არაკოჰერენტული ელასტიური გაბნევისას ნეიტრონები განიბნევა ერთნაირად ყველა მიმართულებით, გაბნევის ეს ფორმა არასასურველია გაბნევის ექსპერიმენტში, რადგან გადაფარავს ხოლმე იმ საანალიზო სიგნალის უმეტესობას, რომელიც გვაძლევს ინფორმაციას

სტრუქტურასა თუ ატომების კოლექტიურ მოძრაობაზე. არაკოჰერენტული, არაელასტიური გაბნევა იძლევა ინფორმაციას ერთი და იგივე ატომბირთვის მიერ, დროის სხვადასხვა მონაკვეთში გაბნეული ნეიტრონების ინტენსიურობის შესახებ. გაბნევის ამ ფორმით ჩვენ შეგვიძლია გავიგოთ კონკრეტული ატომბირთვი დროის კონკრეტულ მომენტში სად მდებარეობს, ანუ მის დიფუზიას შეგვიძლია დავაკვირდეთ.



არაკოჰერენტულ გაბნევაში ნეიტრონები ურთიერთქმედებენ ნიმუშში არსებულ ყველა ატომბირთვთან, ხოლო გაბნეული ნეიტრონები განიბნევიან ერთმანეთისგან დამოუკიდებელი განუსაზღვრელი ფაზით, ისე რომ ადგილი არ აქვს გაბნეული ნეიტრონების, ერთმანეთთან შერევას.

გაბნევის ეფექტური ფართობის ცხრილური მონაცემები არსებობს ყველა ელემენტისთვის, როგორც კოჰერენტული, ასევე არაკოჰერენტული პროცესისთვის, სადაც  $b_{coh} = \langle b \rangle$ , ხოლო არაკოჰერენტული  $b_{inc} = \sqrt{\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2}$ . მაგ., წყალბადის ატომს აქვს დიდი არაკოჰერენტული გაბნევის განივკვეთი (25.18 ფმ) და ძალიან პატარა კოჰერენტული გაბნევის განივკვეთი (-3.73 ფმ), ხოლო მის იზოტოპის დეიტერიუმის ატომბირთვს კი აქვს მცირე არაკოჰერენტული გაბნევის განივკვეთის ფართობი (3.99 ფმ) და შედარებით დიდი კოჰერენტული გაბნევის განივკვეთის ფართობი (6.67 ფმ).

ყველაზე მარტივი ფორმა კოჰერენტული გაბნევის გასაგებად არის დიფრაქტომეტრი ინიცირებული ნეიტრონების ნაკადი ურთიერთქმედებს ნიმუშის მოლეკულებთან, რის შედეგადაც ნიმუშის მოლეკულები განაბნევენ ნეიტრონებს სხვადასხვა მიმართულებით. გაბნეული ნეიტრონების რაღაც ნაწილი, გაბნევის კონკრეტულ წერტილში ერთმანეთს შეერევა და წარმოქმნის გაბნეული ნეიტრონების ინტენსიურ ნაკადს, შერევის წერტილი დამოკიდებულია ნიმუშის აგებულებაზე, ნიმუშში ატომბირთვების მდებარეობაზე, ატომბირთვებს შორის მანძილზე, სხვადასხვა სტრუქტურის

მოლეკულები ნეიტრონებს სხვადასხვა ფაზით განაზნევენ და გაზნევის შემდეგ მათი ერთმანეთთან შერევა სხვადასხვა ფაზაში თუ წერტილში ხდება. აქედან გამომდინარე, აღნიშნული პროცესი ნიმუშის მიკროსამყაროზე და მის აგებულებაზე გვიქმნის წარმოდგენას.

აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ნეიტრონული გაზნევის ეს ფორმა არის ელასტიური გაზნევის ფორმა სადაც  $E=0$  ანუ ინიცირებული და გაზნეული ნეიტრონების ენერგია ერთმანეთის ტოლია და ადგილი არ აქვს ენერგიის დაკარგვას ან მოგებას, გაზნევის პროცესის მიმდინარეობისას. ვან ჰოვის ფორმულის გათვალისწინებით, თუ ფორმულა 2.3 გავაინტეგრალავთ,  $E$  ენერგიის მიმართ მივიღებთ, დირაკის ახალ ფუნქციას, რომელიც შეიძლება გამოვსახოთ  $\rho(t)$  სიმბოლოთი, ეს ფუნქცია გვეუბნება აგრეთვე, რომ ატომ-წყვილის კორელაციის ფუნქცია  $G(\vec{r}, t)$  უნდა იქნეს შეფასებული  $t=0$  დროზე. გამომდინარე აქედან, საბოლოო ფორმულა ამ პროცესის აღსაწერად გამოიყურება შემდეგნაირად:

$$(2.10) \quad I(\vec{Q}) = b^2_{coh} \sum_{i,j} \langle e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \rangle$$

სადაც  $i$  და  $j$  სიმბოლოებით გამოსახული ატომბირთვები შეფასებული უნდა იქნეს ერთდროულად. თუ განვიხილავთ ისეთ სისტემებს, სადაც ატომბირთვები არიან ფიქსირებულ პოზიციებზე სტაციონარულად, მაშინ თერმოდინამიკური ალბათობის ფუნქცია შეგვიძლია ამოვიღოთ, რომელიც ფორმულაში 2.10 მოცემულია ბრტყელი ფრჩხილების სახით. რეალობაში ატომბირთვები ნიმუშში არ არიან უძრავ მდგომარეობაში რომელიმე ფიქსირებულ პოზიციაზე, ისინი განიცდიან ოსცილაციას და დროის გარკვეულ ნაწილს ოსცილირების გამო ატარებენ ნიმუშის სხვა პოზიციებზე. თუ ამ პროცესსაც გავითვალისწინებთ, ჩვენ შევძლებთ ფორმულის შექმნას, რომელიც უფრო მიახლოებით ასახავს ჩვენს ნიმუშში მიმდინარე პროცესს და ეს ფორმულა შემდეგი სახით შეგვიძლია ჩამოვაყალიბოთ:

$$(2.11) \quad I(\vec{Q}) = b^2_{coh} \sum_{i,j} e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} e^{-Q^2 \langle u^2 \rangle / 2} \equiv S(Q)$$

სადაც  $e^{-Q^2 \langle u^2 \rangle / 2}$  არის ე.წ დებაი-ვოლერის ფაქტორი, ხოლო  $\langle u^2 \rangle$  არის საშუალო კვადრატული სიდიდე, რომელიც გვამლევს ინფორმაციას ატომბირთვის გადაადგილების შესახებ ოსცილირების პროცესის დროს. ფორმულა 2.11-ით გამოსახულია ნეიტრონების ინტენსიურობა, რომელიც იზომება ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტში რეალური ნიმუშის ანალიზისას. ამ ფორმულით გამოსახული სიდიდე ნეიტრონულ გაზნევის

ექსპერიმენტში გამოსახება  $S(\bar{Q})$  სიდიდით და მას ვუწოდებთ ნიმუშის სტრუქტურულ ფაქტორს.

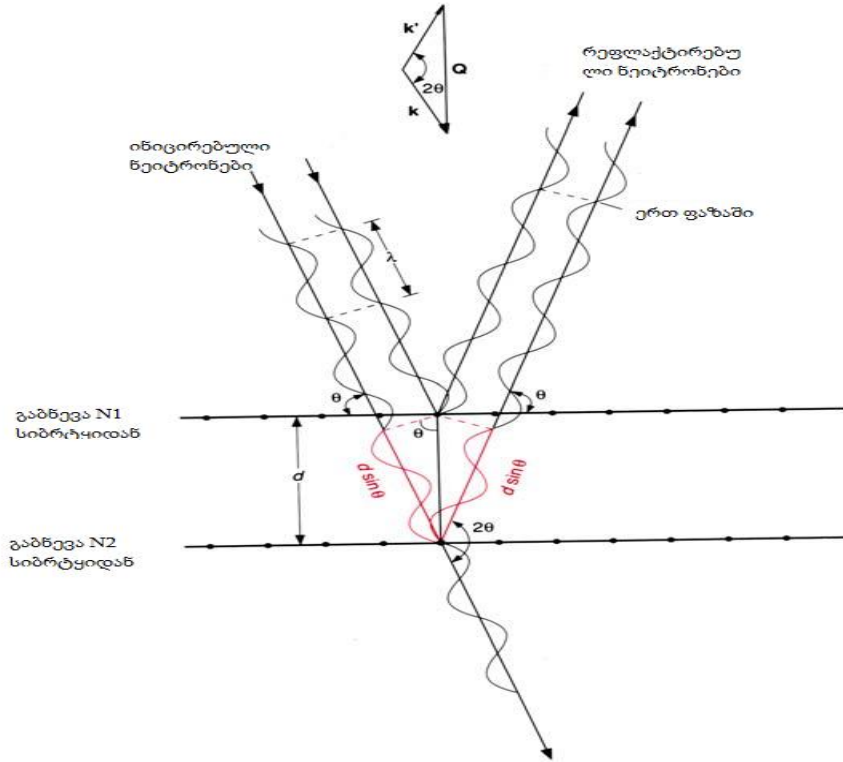
რეალურად საანალიზო ნიმუშები შედგება უამრავი ატომბირთვისგან, რომლებსაც სხვადასხვა დოზით აქვთ გავლენა 2.11 გამოსახულებაზე. საინტერესოა, რომ  $Q$ -ს ნებისმიერი მნიშვნელობისთვის  $S(\bar{Q})$  გამოსახულება ნულს არ უტოლდება. ჩვენ შეგვიძლია სურათი 2.4-ის საფუძველზე განვსაზღვროთ  $Q$  -ს ისეთი მნიშვნელობა, სადაც ის ნულის ტოლი არ არის. დავუშვათ მოცემულობა, რომ  $\bar{Q}$  საანალიზო ნიმუშში, გარკვეულ სიბრტყეზე განთავსებული ატომბირთვების მართობულია, როგორც ეს ნაჩვენებია სურათზე 2.4. თუ ჩვენ  $\bar{Q}$  ვექტორის სიდიდეს გამოვსახავთ ინტეგრალის სახით, რომელსაც გავამრავლებთ  $2\pi/d$ -ზე, სადაც  $d$  არის სხვადასხვა სიბრტყეში არსებულ ატომბირთვებს შორის მანძილი, მაშინ  $\bar{Q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$  მრავლდება  $2\pi$ -ზე, რის შედეგადაც მიიღება  $S(\bar{Q})$ -ს ნულისგან განსხვავებული სიდიდე. რადგანაც გამოსახულებაში 2.11 არსებული ყოველი ექსპონენციალური ნაწილის ჯამი არის ნულისგან განსხვავებული სიდიდე იმისთვის, რომ მივიღოთ დიფრაქცირებული ნეიტრონები, აუცილებელია რომ  $\bar{Q}$  იყოს ნიმუშში არსებული სხვადასხვა სიბრტყეზე განლაგებული ატომბირთვების მართობული. სურათი 2.3-ის გათვალისწინებით, სადაც მოცემულია  $\bar{Q}$ ,  $\lambda$  და  $\theta$  სიდიდეების ურთიერთდამოკიდებულება, მაშინ

ბრეგის კანონით (აღმოაჩინეს 1912 წელს მამა-შვილმა ვილიამ და ლავნერნს ბრეგებმა (4)) ადვილად შეგვიძლია გამოვსახოთ დიფრაქციული პროცესის პირობები:

$$(2.12) \quad n\lambda = 2d \sin \theta .$$

სურათი 2.4. კონსტრუქციული შერევა ხდება მაშინ, როდესაც ნიმუშის სხვადასხვა სიბრტყეზე განლაგებული ატომბირთვებიდან გაბნეული ნეიტრონები განიბნევიან ერთი და იგივე ფაზით და გაბნევის რაღაც წერტილში ისინი ერთმანეთს შეერევიან, ამლიერებენ და წარმოქმნიან უფრო დიდი ამპლიტუდის მქონე ტალღებს. ამას ადგილი აქვს მაშინ როდესაც ნიმუშში სხვადასხვა სიბრტყიდან გაბნეული ნეიტრონების მიერ გავლილი მანძილის სხვაობას გამოვსახავთ, ტალღის სიგრძისა და მთელი რიცხვის ნამრავლის სახით. სურათზე ნაჩვენებია, რომ მეორე სიბრტყეზე მდებარე ატომბირთვებიდან გაბნეული ნეიტრონები გადიან დამატებით მანძილს რომელიც შეგვიძლია გამოვსახოთ  $2d \sin \theta$ . როდესაც ნეიტრონების მიერ გავლილი მანძილი ტოლია  $n\lambda$ -ს( სადაც  $n$  მთელი რიცხვია) შედეგად

მივიღებთ ბრეგის კანონს  $n\lambda = 2d \sin \theta$ . როდესაც  $n=1$  მაშინ ადგილი აქვს საკმაოდ მნიშვნელოვან გაბნევას, ხოლო ზოგ შემთხვევაში  $n$ -ის უფრო მაღალი მნიშვნელობისთვისაც მიიღება ბრეგის პიკის საკმაოდ ინფორმაციული შედეგები.



ბრეგის კანონი ძირითადად გვაძლევს ინფორმაციას, სხვადასხვა სიბრტყიდან გაბნეული ნეიტრონების მიერ გავლილი მანძილის სხვაობის შესახებ, რაც დაკავშირებულია ნიმუშში, ატომბირთვებს შორის მანძილის სხვაობაზე (იხ. სურათი 2.4). კონსტრუქციული შერევისთვის, სხვადასხვა სიბრტყიდან გაბნეული ნეიტრონების მიერ გავლილი მანძილის სხვაობა უნდა იქნეს გამრავლებული ტალღის სიგრძეზე  $\lambda$ . ამ ყველაფრის გათვალისწინებით ნახაზი 2.4 -დან პირდაპირ გადავდივართ გამოსახულებაზე 2.12.  $n\lambda = 2d \sin \theta$

დიფრაქცია ანუ ბრეგის გაბნევა შესაძლებელია მოხდეს ნებისმიერი სიბრტყიდან, რომლის წარმოდგენაც ჩვენ შეგვიძლია, იმ შემთხვევაში თუ ტალღის სიგრძე  $\lambda$  და  $\theta$  აკმაყოფილებენ 2.12 განტოლების პირობებს. კრისტალური სისტემებისთვის დიფრაქციული ნეიტრონების მისაღებად საჭიროა, ეს კრისტალი მოთავსებული და ორიენტირებული იყოს ისე, რომ  $\vec{Q}$  ვექტორი კრისტალური სტრუქტურის სხვადასხვა სიბრტყეზე მოთავსებული ატომბირთვების მართობული იყოს. ამისათვის ექსპერიმენტში, კრისტალს აბრუნებენ სხვადასხვა კუთხით, ვიდრე დეტექტორზე არ მიიღება დიფრაქციული ნეიტრონების სიგნალი. ამ გზით მიღებულ პიკს ეწოდება



ბრეგის პიკი, რადგან ეს პიკი მიიღება მხოლოდ იმ შემთხვევაში, როცა კრისტალი ან საანალიზო ნიმუში, ორიენტირებულია ისე, რომ  $\bar{Q}$  ვექტორი ნიმუშში შემავალი სხვადასხვა სიბრტყეზე განლაგებული ატომბირთვების მართობულია. ფორმულა 2.11-ის გათვალისწინებით გაზნეული ნეიტრონების ინტენსიურობა, პროპორციულია ნიმუშის სხვადასხვა სიბრტყეზე განლაგებული ატომბირთვების სიმკვრივის კვადრატის, რომლებიც იწვევენ ამ ნეიტრონების გაზნევას. აქედან გამომდინარე, ბრეგის პიკს შეუძლია მოგვცეს ინფორმაცია ნიმუშში სხვადასხვა სიბრტყეზე მდებარე ატომბირთვებს შორის მანძილზე და აგრეთვე ამ სიბრტყეზე განლაგებული ატომბირთვების რაოდენობაზე. იმისთვის რომ გავზომოთ ბრეგის პიკი, ამისთვის საჭიროა სწორად შეირჩეს ტალღის სიგრძე და კრისტალის თუ ნიმუშის ორიენტაცია, ისე რომ ის აკმაყოფილებდეს ბრეგის კანონს.

წარმოდგენილი მსჯელობა აგებულია მარტივ მონოკრისტალურ სისტემაზე, რომელიც შედგება ერთი სახის ატომბირთვებისგან. რეალობაში მეცნიერებს აინტერესებთ უფრო რთული სისტემების გამოკვლევა, რომლებიც შედგებიან უამრავი სხვადასხვა ატომბირთვებისგან, მსგავსი სისტემებისგან მიღებული უამრავი ბრეგის პიკის მიუხედავად, ძალიან ძნელია ატომბირთვის ლოკალიზაციის დადგენა ნიმუშში, რადგან უამრავი ექსპონენციალური სიდიდე, რომელიც მონაწილეობს  $S(\bar{Q})$  სტრუქტურის ფაქტორში, ძალზედ რთული სიდიდეებია და ამ სიდიდეების ფაზების დადგენა შეუძლებელია ბრეგის ექსპერიმენტული პიკიდან. ფორმულა 2.11-ში მოცემული  $S(\bar{Q})$  სიდიდე კომპლექსური სიდიდეების მოდულის კვადრატის ტოლია. ამგვარად, ამ სიდიდეების ფაზების დადგენა უბრალოდ გაზნეული ნეიტრონების ინტენსიურობის გაზომვით შეუძლებელია. ეს სირთულე გაზნევის ექსპერიმენტში ცნობილია როგორც **ფაზური პრობლემა**. პრაქტიკაში მეცნიერები თავიანთი გამოსაკვლევი სტრუქტურის მოდელირებისას ატომბირთვების ისეთ განლაგებას შეარჩევენ, რომელიც ექსპერიმენტულად მიღებული ბრეგის პიკების სიდიდეებს შეესაბამება. დღეისდღეობით ამისთვის შექმნილია უამრავი კომპიუტერული პროგრამა და ეს სამუშაო გაცილებით ადვილია. დიფრაქციულ ექსპერიმენტში, ბრეგის პიკების მისაღებად აუცილებელია საანალიზო ნიმუში იყოს სწორად ორიენტირებული. კრისტალოგრაფიაში მარტო მონოკრისტალურ სისტემებს არ იკვლევენ, დღეს დიდი ინტერესია პოლიკრისტალური სისტემების მიმართ, თუმცა კრისტალური სისტემების დახასიათება სადისერტაციო ნაშრომის ინტერესებს სცდება, კრისტალური სისტემები გამოყენებულ იქნა მხოლოდ რეფრაქციული მეთოდის მოქმედების ძირითადი პრინციპების მარტივად ჩამოსაყალიბებლად. დიდი ზომის მქონე ნივთიერებათა სტრუქტურის დახასიათების თავისებურებებს შევხებით შემდეგ თავში.

### 2.3.2. დიდი ზომის მქონე მოლეკულების სტრუქტურის კვლევა გაბნევის ექსპერიმენტით

ნეიტრონულ გაბნევის ექსპერიმენტში საანალიზო ნიმუშის ზომასა და გაბნევის ვექტორს  $Q$ -ს შორის დამოკიდებულება უკუპროპორციულია, რაც იმას ნიშნავს, რომ დიდი ზომის მოლეკულების საანალიზოდ ჩვენ გვჭირდება  $Q$ -ს პატარა სიდიდე და პირიქით, მცირე ზომის ნიმუშების გასაანალიზებლად ჩვენ გვჭირდება დიდი ზომის  $Q$ . დიდი ზომის მქონე მოლეკულების (ნიმუშების) დახასიათებისთვის ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, გვესაჭიროება მცირე სიდიდის მქონე  $Q$  ვექტორი. გაბნევის ექსპერიმენტში  $Q$  სიდიდის შემცირება შეიძლება ან ტალღის სიგრძის  $\lambda$  გაზრდით ან გაბნევის კუთხის შემცირებით  $\theta$ . ექსპერიმენტში არ მიმართავენ ტალღის სიგრძის ხარჯზე  $Q$  სიდიდის შემცირებას, რადგან ტალღის სიგრძის გაზრდა იწვევს ნეიტრონების ინტენსიურობის კლებას, ხოლო ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტში ინტენსიურობა ისედაც პრობლემურია. ამიტომ ყველაზე ოპტიმალური გამოსავალი დაბალი სიდიდის მქონე  $Q$ -ს მისაღებად გაბნევის კუთხის  $\theta$ -ს შემცირებაა. გაბნევის მცირე კუთხე, გვამლევს საშუალებას, ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით გაანალიზდეს ისეთი დიდი ზომის ნიმუშები როგორებიცაა კოლოიდური სისტემები, პოლიმერები, ბიოლოგიური მოლეკულები, ვირუსები და ა.შ. აქედან გამომდინარე, ნეიტრონული გაბნევის მეთოდის ერთ-ერთი ფორმა ვარიანტი ცნობილია მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდის სახელით.

მცირე კუთხეებით ნეიტრონულ გაბნევაში გაბნევის ვექტორი  $Q$  არის მცირე სიდიდე. აქედან გამომდინარე ფორმულა 2.11-ში მოცემული ფაზური ფაქტორი დიდად არ იცვლება ერთი ატომბირთვიდან მეორე ატომბირთვზე გადასვლისას. ამის გათვალისწინებით ფორმულა 2.11-ში მოცემული  $\chi$  ამი შეგვიძლია შევცვალოთ ინტეგრალით, რის შედეგადაც მივიღებთ მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევისთვის სტრუქტურის ფაქტორს, რომელიც შეგვიძლია მათემატიკურად გამოვსახოთ შემდეგნაირად:

$$(2.13) \quad S(\vec{Q}) = \left| \int_{sample} \rho(\vec{r}) e^{i\vec{Q}\vec{r}} \cdot d\vec{r} \right|^2$$

სადაც  $\rho(\vec{r})$  არის ცვლადი სიდიდე, რომელსაც ჩვენ ვუწოდებთ გაბნევის განივკვეთის სიმკვრივეს, რომლის გამოთვლა შესაძლებელია შემდეგი გზით. იკრიბება ნიმუშის შემადგენელი ყველა ატომბირთვის კოჰერენტული გაბნევა და ეს სიდიდე იყოფა მოცულობაზე. ძირითად შემთხვევებში მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით გაანალიზებულ ნიმუშებს ჩვენ

განვიხილავთ როგორც ნაწილაკებს, რომელსაც აქვთ გაბნევის განივკვეთის სიმკვრივე  $\rho_p$ , კონსტანტა, ეს ნაწილაკები გახსნილია კონკრეტულ გამხსნელში,

მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა არის კვლევის მეთოდი, რომლითაც შესაძლებელია 10 ანგსტრემიდან 1000 ანგსტრემამდე ზომის მქონე ნიმუშების დახასიათება, გაბნეული ნეიტრონების ინტენსიურობით, რომლებიც განიბნევიან ნიმუშებიდან მცირე კუთხეებით. ძირითად შემთხვევაში გაბნევის კუთხე ნაკლებია 1-ზე.

რომელსაც აქვს განსაზღვრული გაბნევის განივკვეთის სიმკვრივე  $\rho_m$ . მაგალითად კოლოიდური ნაწილაკები, მაკრომოლეკულები, ბიოლოგიური მოლეკულები წყალში და უამრავი სხვა. ფორმულა 2.13-ში გამოსახული ინტეგრალი ჩვენ შეგვიძლია განვაცალკევოთ მთლიანი ნიმუშისთვის იმის გათვალისწინებით, რომ ის დამოკიდებულია შემდეგი სიდიდეების სხვაობაზე ( $\rho_p - \rho_m$ ), რომელსაც ჩვენ ხშირად კონტრასტის ფაქტორს ვუწოდებთ. დავუშვათ რომ ჩვენს საანალიზო ნიმუშში ყველა ნაწილაკი არის იდენტური და მათი მდებარეობა ერთმანეთზე არ ახდენს გავლენას, მაშინ ფორმულა 2.13 გარდაიქმნება შემდეგნაირად:

$$(2.14) \quad S(\vec{Q}) = N_p (\rho_p - \rho_m)^2 \left| \int_{particle} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \cdot d\vec{r} \right|^2$$

სადაც ნაწილაკების მოცულობა გვაქვს გაინტეგრირებული, ხოლო  $N_p$  სიდიდით გამოვსახავთ ნიმუშში არსებული ნაწილაკების რიცხვს. ნაწილაკის ფაზური ფაქტორის ინტეგრალს  $e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}}$  ვუწოდებთ ფორმის ფაქტორს. ძალიან ბევრი სხვადასხვა გეომეტრიის მქონე ნაწილაკებისთვის ფორმის ფაქტორი შეიძლება გამოთვლილ იქნეს ანალიზურად (7,) მაგრამ კომპლექსური ბიომოლეკულებისთვის და კოლოიდური ნაწილაკებისთვის აუცილებელია გამოთვლებისთვის შესაბამისი კომპიუტერული პროგრამების გამოყენება. ძირითადად, მცირე კუთხეების ნეიტრონულ გაბნევაში ინტენსიურობა, რომელსაც ვხედავთ დიაგრამაზე არის ნორმალიზებული ნიმუშის მოცულობასთან, აქედან გამომდინარე  $S(Q)$  მოცემულია  $\text{სმ}^{-1}$  სიდიდით.

ფორმულა 2.14 გვაძლევს უნიკალურ შესაძლებლობას გავიაზროთ ის ტექნიკა, რომელიც გამოიყენება მცირე კუთხეებით ნეიტრონულ გაბნევაში და რომელიც ცნობილია კონტრასტის ფაქტორის სახელით. საანალიზო ნიმუშიდან გაბნეული ნეიტრონების რაოდენობა პროპორციული სიდიდეა ნიმუშში არსებული ნაწილაკების და გამხსნელისგან გაბნეული ნეიტრონების

სხვაობის კვადრატისა, რაშიც ეს საანალიზო ნაწილაკებია გახსნილი. ეს ყველაფერი ფორმულა 2.14-ში მათემატიკურად არის გამოსახული. თუ ჩვენ საანალიზო ნიმუშში არსებულ ნაწილაკებს და გამხსნელს აქვს ერთნაირი გაბნევის განივკვეთის სიდიდე, მაშინ ნეიტრონული გაბნევით ასეთი ნიმუშების დახასიათება შეუძლებელი იქნება.

დავუშვათ, რომ ნაწილაკები რომელთა დახასიათებაც გვინდა, არის კვერცხის ფორმის. ცნობილია, რომ კვერცხი შედგება ყვითელი გულისგან და თეთრი დამცავი გარე შრისგან. დავუშვათ, რომ კვერცხის გულს და მის გარე დამცავ შრეს აქვს განსხვავებული გაბნევის განივკვეთის ფართობი. იმ შემთხვევაში, თუ ჩვენ ასეთ ნაწილაკს გავხსნით ისეთ გამხსნელში, რომელსაც აქვს კვერცხის გარე დამცავი ფენის ტოლი გაბნევის განივკვეთის ფართობი, მაშინ ჩვენ შევძლებთ მხოლოდ კვერცხის გულის დანახვას, ხოლო თუ ჩვენს გამხსნელს ექნება კვერცხის გულის მსგავსი გაბნევის განივკვეთის ფართობი, მაშინ ჩვენ შევძლებთ მხოლოდ კვერცხის გარე დამცავი ფენის დანახვას. გაბნევის ექსპერიმენტში ამ ორივე შემთხვევაში ექსპერიმენტულ დიაგრამას ექნება განსხვავებული სახე, მაგრამ ამ ორი ექსპერიმენტით ჩვენ შევძლებთ მთლიანად ჩვენთვის სასურველი ნაწილაკის სტრუქტურის დახასიათებას. ამ კონკრეტული მაგალითიდან ნათლად ჩანს კონტრასტის მნიშვნელობა და ღირებულება გაბნევის ექსპერიმენტში. ძირითადად ექსპერიმენტისას ჩვენ გვაქვს შესაძლებლობა, რომ ვცვალოთ სხვადასხვა მანიპულაციების დახმარებით გამხსნელის გაბნევის განივკვეთის ფართობი, ეს ამოცანა უფრო ადვილია თუ გამხსნელად გამოვიყენებთ ისეთ ნივთიერებებს, რომლებიც შეიცავენ წყალბად-ატომს, რადგან წყალბად-ატომების ჩანაცვლება უფრო მძიმე ატომებით, იგულისხმება დეიტერიუმი საშუალებას გვაძლევს შევცვალოთ გაბნევის განივკვეთის ფართობი და ამით ჩვენთვის სასურველი ნაწილაკის დახასიათება მოვახდინოთ დეტალურად. ნიმუშების იზოტოპებით მონიშვნა გაბნევის ექსპერიმენტში საკმაოდ პოპულარული მეთოდია და ეს მეთოდი გამოიყენება აგრეთვე როდესაც დიდი რთული მოლეკულის კონკრეტული ნაწილის დახასიათება საჭირო. დიდი რთული მოლეკულების ქვეშ იგულისხმება კოლოიდები, ბიოლოგიური მოლეკულები და ვირუსები, რადგანაც ნივთიერების ეს ჯგუფები წარმოადგენს წარმოდგენილი სადისერტაციო ნაშრომის ობიექტს.

### 2.3.3. არაელასტიური გაბნევა

პრაქტიკაში, ნიმუშის სტრუქტურის და თვისებების შეფასებისას, ატომბირთვებს ანიჭებენ გარკვეულ ოფიციალურ ფიქსირებულ პოზიციებს, რათა გაადვილდეს წარმოდგენა ამ კონკრეტული ნიმუშის სტრუქტურასა და

თვისებებზე. რეალობაში, ნიმუშში ატომები არ იმყოფებიან ფიქსირებულ პოზიციაზე, სითბური ენერგიით, ისინი ოსცილირებენ და გადაადგილდებიან გარკვეულ მანძილზე. ატომბირთვებისთვის გარკვეული ფიქსირებული პოზიციების მინიჭება იძლევა საშუალებას დავინახოთ ნიმუშში მიმდინარე პროცესების რეალური სურათი. მაგ., კონსტრუქციული შერევისას ატომბირთვები იღებენ მონაწილეობას და ბრეგის გაბნევას მხოლოდ მაშინ აქვს ადგილი, როცა კონსტრუქციული შერევა ხდება ატომბირთვების ოფიციალური ფიქსირებული პოზიციებიდან. რაც უფრო მეტ დროს დაყოფენ ატომები მათ ოფიციალურ პოზიციებზე, მით უფრო ძლიერი იქნება გაბნევა და პირიქით, რაც უფრო ნაკლებ დროს დაყოფენ მათ ოფიციალურ პოზიციებზე მით უფრო სუსტი იქნება ბრეგის გაბნევა. იმის გამო, რომ ატომები გადაადგილდებიან და ოსცილირებენ, სუსტდება ბრეგის გაბნევა. ფაქტორი რითაც სუსტდება ბრეგის გაბნევა, ცნობილია დებაი-ვოლერის (Debye-Waller) ფაქტორის სახელით. ფორმულა 2.11-ის განხილვისას აღინიშნა ამ ფაქტორის შესახებ. ბრეგის გაბნევის შესუსტება, რომელიც გამოწვეულია ატომების სითბური მოძრაობით, არ არის ერთადერთი გზა ატომების ოსცილირებისა და გადაადგილების შესასწავლად. ნეიტრონული გაბნევის დიდი უპირატესობა ის გახლავთ, რომ არაელასტიური გაბნევით შესაძლებელია ატომების და მოლეკულების კოლექტიური და ინდივიდუალური მოძრაობის შესახებ ინფორმაციის მიღება. არაელასტიურია გაბნევა, როდესაც ნეიტრონსა და ნიმუშს შორის ადგილი აქვს ენერგიის მიმოცვლას.

არაელასტიური გაბნევის არსში გასარკვევად დავახასიათოთ მარტივი კრისტალური სტრუქტურის მქონე ნიმუში. კრისტალებში ატომების მოძრაობასა და ნიუტონის ქანქარას შორის არსებობს გარკვეული მსგავსება. კერძოდ, ნიუტონის ქანქარაში თუ ჩვენ გადავაადგილებთ ერთ სფერულ რგოლს ის იწვევს მეზობლად მყოფ ჯაჭვში არსებული სხვა სფერული რგოლების გადაადგილებას და ადგილი აქვს ტალღის მსგავსი მოძრაობის ინიცირებას. ამ ტალღური მოძრაობის სიხშირე დამოკიდებულია სფერული რგოლის მასაზე და ჯაჭვში არსებულ სხვა რგოლებთან ბმის სიდიდეზე. ზუსტად იგივე პროცესს აქვს ადგილი, როდესაც კრისტალურ სტრუქტურაში გაივლის ელექტრომაგნიტური ტალღა. კრისტალის შემთხვევაში გვაქვს ქიმიური ბმები, რომლებიც მეზობელ ატომებს ერთმანეთთან აკავშირებს. რა თქმა უნდა ატომების ვიბრაციული მოძრაობა სამ განზომილებიან სიბრტყეზე მიმდინარეობს და ეს უფრო რთული წარმოსადგენია, სხვადასხვა სიხშირითა და მიმართულებით მოძრავი ატომების გადაადგილება კრისტალურ სტრუქტურაში შეგვიძლია გამოვსახოთ ამ ტალღური მოძრაობის სუპერ პოზიციით, რომელიც ფონონის სახელით არის ცნობილი (ფონონი და ფოტონი მნიშვნელოვანია, რომ ერთმანეთში არ

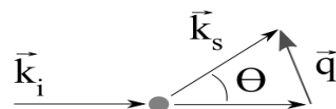
ავგერიოს. ფონონით გამოსახვენ ატომების ან მოლეკულების კოლექტიურ ოსცილირებას კრისტალურ ან თუნდაც ჩვეულებრივ მოუწყესრიგებელ მყარ ან თხევად ნიმუშებში. ფოტონით კი გამოსახულია განსაზღვრული რაოდენობის ენერგია, რომლის ფიზიკური აზრი კვანტური მექანიკით არის განსაზღვრული).

ფონონების ენერგია დაკვანტულია, მაშასადამე ყოველ ფონონს შეესაბამება  $h\nu$  ენერგია, სადაც  $\nu$  არის ატომების ოსცილირების სიხშირე რომელიც შეესაბამება კონკრეტულ ფონონს. მსგავსად ნიუტონის ქანქარისა, კრისტალურ მოლეკულაში ატომების ფონონების სიხშირე დამოკიდებულია ელექტრო-მაგნიტური ტალღის სიგრძეზე, ატომის მასაზე და ჯაჭვში არსებულ ატომბირთვებს შორის ქიმიური ბმის სიდიდეზე, რომლითაც ეს ატომები დაკავშირებულია ერთმანეთთან. კრისტალური სტრუქტურისგან გაბნეულმა ნეიტრონებმა შეიძლება შთანთქოს ან გამოასხივოს ენერგიის კვანტი, რომელიც ტოლი იქნება კონკრეტული ფონონის ენერგიის  $h\nu$ . სწორედ ეს პროცესი იწვევს არაელასტიურ გაბნევას, რა დროსაც ნეიტრონის ენერგია გაბნევამდე და გაბნევის შემდეგ ერთმანეთისგან განსხვავებულია  $E$  სიდიდით. მყარი ნიმუშების უმეტესობაში ფონონის სიხშირე არის რამდენიმე ტეტრაჰერცი, ხოლო შესატყვისი ენერგია კი რამდენიმე მეგაევოლტი. ნეიტრონულ გაბნევაში გამოყენებული ნეიტრონების ენერგიებიც ძირითადად არის მეგაელექტრონ ვოლტის რიგის, რაც საშუალებას იძლევა რომ დიდი სიზუსტით იქნეს გაზომილი ნიმუშების ფონონების სიხშირე. არაელასტიურ გაბნევაში ნეიტრონებს აქვთ განსხვავებული სიხშირე და ტალღური ვექტორი გაბნევამდე და გაბნევის შემდეგ. იმისთვის, რომ განვსაზღვროთ ფონონის ენერგია და გაბნევის ვექტორი  $\vec{Q}$ , აუცილებელია რომ განვსაზღვროთ ტალღური ვექტორი გაბნევამდე და გაბნევის შემდეგ. ამ ამოცანის გადასაწყვეტად სხვადასხვა მეთოდები და ინსტრუმენტები გამოიყენება რეაქტორებზე და ამაჩქარებლებზე. ჩვენ ძალიან მოკლედ განვიხილავთ მხოლოდ ერთ-ერთ მათგანს რომელიც ცნობილია three-axis spectrometer-ის სახელით. ეს ხელსაწყო იყენებს მონოკრისტალების ანსამბლს, რომლითაც აფიქსირებს გაბნევამდე ნეიტრონის ტალღურ ვექტორს და ასევე აფიქსირებს ტალღურ ვექტორს გაბნევის შემდეგ. თითოეული გაზომვა გრძელდება რამოდენიმე წუთი, რის შედეგადაც ვიღებთ გაბნეული ნეიტრონების ინტენსივობის დამოკიდებულებას კონკრეტული ტალღური ვექტორის გადანაცვლებაზე განსაზღვრული ენერგიის ცვლილებისას. იმისთვის, რომ განვსაზღვროთ ფონონის ენერგია საჭიროა რიგი ექსპერიმენტების ჩატარება ტალღური ვექტორის გადანაცვლების მუდმივ სიდიდეზე. პიკი, რომელიც გამოჩნდება ტალღური ვექტორის გადანაცვლების მუდმივ სიდიდეზე, გვამღევეს საშუალებას განვსაზღვროთ ფონონის ენერგია.

## 2.4. ფოტონ კორელაციური სპექტროსკოპია

ფოტონ-კორელაციურ სპექტრომეტრს სხვანაირად სინათლის დინამიურ გაბნევის მეთოდსაც უწოდებენ, რომელიც გამოიყენება მცირე ზომის ნაწილაკების სტრუქტურის დასახასიათებლად. სინათლის სტატიკური გაბნევის მეთოდისგან განსხვავებით სინათლის დინამიური გაბნევის მეთოდისგან ჩვენ შეგვიძლია მივიღოთ ინფორმაცია ნაწილაკების დიფუზიის პროცესის შესახებ. კვლევის ეს მეთოდი საკმაოდ ხშირად გამოიყენება მაკრომოლეკულების დიფუზიის კოეფიციენტის გაზომვისთვის და ასევე მათი პოლიდისპერსიულობის დადგენისთვის.

სურათი 11. ტალღური ვექტორი  $\vec{q}$ , საწყისი გამოსხივება  $\vec{k}_i$ , გაბნეული გამოსხივება  $\vec{k}_s$  და გაბნევის კუთხე  $\theta$ .



სინათლის გაბნევის ექსპერიმენტში ძალიან მნიშვნელოვანი სიდიდე გახლავთ ტალღური ვექტორი  $\vec{q}$  (იხ.სურ.11)

$$(2.15) \quad q = |\vec{q}| = \frac{4\pi n_0}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$$

სადაც  $n_0$  გამხსნელის გარდატეხის მაჩვენებელი,  $\lambda$  გაბნეული ტალღის სიგრძე, ხოლო  $\theta$  გაბნევის კუთხე.

ნორმალიზებული ელექტრული ველის ავტოკორელაციური ფუნქცია მოცემულია შემდეგი სახით:

$$(2.16) \quad g_1(t) = \frac{\langle\langle E^*(\vec{q}, t) E(\vec{q}, t+t') \rangle\rangle}{\langle\langle E(\vec{q}, 0) \rangle\rangle}$$

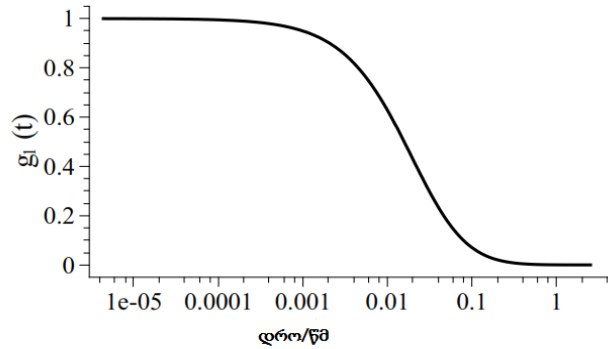
ექსპერიმენტისას ინსტრუმენტის მიერ იზომება მხოლოდ გაბნეული ფოტონების ინტენსიურობა, ავტოკორელაციის ფუნქციის გაზომვა ინსტრუმენტის მიერ პირდაპირი გზით არ ხდება. გაბნეული ფოტონების ინტენსიურობა კი დამოკიდებულია დროზე და გაბნევის კუთხეზე, რაც გვებმარება ავტოკორელაციური ფუნქციის გამოთვლაში, რომელიც თავისთავად ზომავს კორელაციას დროის  $t'$  შუალედსა და ამავე დროის უფრო მოგვიანებით  $t'+t$  პერიოდს შორის:

$$(2.17) \quad G_2(\vec{q}, t) = \langle\langle I(\vec{q}, t+t') I(\vec{q}, t) \rangle\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T I(t+t') I(t') dt'$$

ავტოკორელაციური ფუნქციის ნორმალიზება შესაძლებელია შემდეგნაირად:

$$(2.18) \quad g_2(\bar{q}, t) = \frac{G_2(\bar{q}, t)}{\ll I(\bar{q}, t) \gg^2}$$

სურათი 12. ავტოკორელაციური ექსპერიმენტული გაზომვის შედეგი სინათლის დინამიური გაბნევის ინსტრუმენტით. აბსცისათა ღერძზე დრო ლოგარითმულია.



სინათლის დინამიური გაბნევის მეთოდით გაზომილი ინტენსივობა არ შეიცავს რაიმე ინფორმაციას ელექტრული ველის  $\bar{E}$  შესახებ, მაგრამ ზიგერტის ფორმულა აკავშირებს ამ სიდიდეებს ერთმანეთთან:

$$(2.19) \quad g_2(t) = 1 + \beta |g_1(t)|^2$$

სადაც  $\beta$  ინსტრუმენტზე დამოკიდებული სიდიდეა, ხოლო მონოდისპერსული (სფერული ნაწილაკებისთვის)  $g_1(t)$  შეიძლება გამოთვლილ იქნეს მონოექსპონენციალური ფუნქციით:.

$$(2.20) \quad g_1(t) = e^{-Dq^2 t} = e^{-\Gamma t}$$

სადაც დიფუზიის კოეფიციენტი  $D$  გვაძლევს ინფორმაციას ნაწილაკების რადიუსის შესახებ. პოლიდისპერსიული სისტემებისთვის აუცილებელია, რომ შემოვიღოთ დისტრიბუციის ფუნქცია  $G(\Gamma)$ , რომელიც გვაძლევს ინფორმაციას სისტემის პოლიდისპერსიულობაზე:

$$(2.21) \quad g_1(t) = \int_0^\infty G(\Gamma) e^{-\Gamma t} dt$$

$G(\Gamma)$  ჩვენ შეგვიძლია გამოვსახოთ, როგორც მცირე სიდიდეების ჯამის სახით[57]:

$$(2.22) \quad G(\Gamma) = \sum_{i=0}^N a_i \delta(\Gamma - \Gamma_i)$$



ფორმულა 2.20 გამოყენებით:

$$(2.23) \quad g_1(t) = \sum_{i=1}^N a_i e^{-\Gamma_i t}$$

ეს საბოლოო ფორმულა უკვე საშუალებას გვაძლევს, რომ შესაბამისი კომპიუტერული პროგრამით მოვახერხოთ პოლიდისპერსული სისტემების დინამიკის ანალიზი. ერთ-ერთი ასეთი მეთოდი გახლავთ ლაპლასის შებრუნებული ტრანსფორმაცია. კომპიუტერული პროგრამა CONTIN გამოიყენება სწორედ სინათლის დინამიური გაბნევის ექსპერიმენტული მონაცემების ანალიზისთვის [59,60]. საბოლოო შედეგი, რასაც ვიღებთ ამ კომპიუტერული პროგრამისგან გახლავთ  $\Gamma_i$  სიდიდე, რომელიც დამოკიდებულია  $q$  სიდიდეზე შემდეგნაირად:

$$(2.24) \quad \Gamma = Dq^2$$

როდესაც სფერული ნაწილაკები გვაქვს, მაშინ ჰიდროდინამიკური რადიუსი  $R_H$  შესაძლებელია გამოთვლილ იქნეს სტოუკ-აინშტაინის ფორმულით:

$$(2.25) \quad D = \frac{k_b T}{6\pi\eta R_H}$$

სადაც  $\eta$  არის სიბლანტე, ფორმულა 2.25-ით პროტეინების ჰიდროდინამიკური რადიუსის მიახლოებითი სიდიდის გაგება შესაძლებელია. ამ ფორმულიდან მიღებული შედეგები პროტეინების შემთხვევაში არის მიახლოებითი. მას სიზუსტეზე პრეტენზია არ გააჩნია, რადგან ამ ფორმულით მიღებულ შედეგებზე უამრავი ფაქტორი ახდენს გავლენას, რომელთა გათვალისწინება და თავის არიდება რეალური ექსპერიმენტული მუშაობისას შეუძლებელია.

## 2.5. თავის მოკლე რეზიუმე (შეჯამება)

ნეიტრონული გაბნევის მეთოდს საფუძველი ჩაეყარა 50 წლის წინ ვან ჰოვის მიერ, რომელმაც შენიშნა, რომ ნეიტრონული გაბნევით შესაძლებელია ატომბირთვების ან მათი მაგნიტური მომენტის დროზე დამოკიდებული კორელაციის ფუნქციის გაზომვა. იმის გამო, რომ ექსპერიმენტში გამოყენებული ნეიტრონების ტალღის სიგრძე ატომბირთვებს შორის მანძილის თანაზომადია, ნეიტრონების ენერჯის სიდიდე ახლოა ატომბირთვების ადგენების ენერჯის სიდიდესთან, ნეიტრონები შეიძლება გამოყენებულ იქნეს როგორც სტრუქტურის, ასევე ნიმუშის დინამიკის გასაზომად. სუსტი ურთიერთქმედება ნიმუშსა და ნეიტრონს შორის,

რომელსაც ადგილი აქვს ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტში, შეგვიძლია განვიხილოთ, როგორც პოზიტიურ, ასევე ნეგატიურ ჭრილში. პოზიტიურ მხარეა, რომ მთელი გაბნევის პროცესი შეგვიძლია ავლწეროთ ბორნის მიახლოების თეორიით. ეს უკანასკნელი გვადლევს საშუალებას, რომ ექსპერიმენტისას გამოვიყენოთ საკმაოდ მასიური ნიმუშის კონტეინერი, რომელიც თავისთავად იძლევა შესაძლებლობას, რომ ექსპერიმენტში საჭიროებიდან გამომდინარე იქნეს ვარირებული ტემპერატურა და წნევა. ნეგატიურია, რომ ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტში მიღებული საანალიზო სიგნალი არის ძალიან სუსტი, უფრო კონკრეტულად ყველაზე კარგ სამეცნიერო კვლევით რეაქტორებზე დღეს შესაძლებელია  $10^{18}$  ნეიტრონის წარმოება წამში, აქედან მხოლოდ  $10^{10}$  ნეიტრონი მოდის კვლევითი რეაქტორის საექსპერიმენტო ნაწილამდე, ხოლო ამ ნეიტრონების კიდევ უფრო მცირე ნაწილი იძლევა ექსპერიმენტისთვის საჭირო ინფორმაციას. სწორედ იმის გამო, რომ ნეიტრონულ გაბნევაში გვაქვს საანალიზო სიგნალის ასეთი შეზღუდვები, სამეცნიერო საზოგადოება თანხმდება იმაზე, რომ ნეიტრონების წარმოება სამეცნიერო კვლევისთვის იქნეს ცენტრალიზებული და ამ საქმიანობის შესაძლებლობა მიეცეს მხოლოდ სპეციფიურ ავტორიზებულ სამეცნიერო დაწესებულებებს. ასეთი დაწესებულებები დღეს მსოფლიოში ძალიან მცირეა და სამწუხაროდ მომავალში იგეგმება მათი უფრო შემცირება. კერძოდ, ბერლინის კვლევითი რეაქტორი იხურება 2020 წელს და ამავე წელს, საფრანგეთში არსებული საკლის კვლევითი რეაქტორიც იხურება. მიუხედავად ამ სირთულეებისა, დღეს ნეიტრონული გაბნევა ნიმუშების სტრუქტურის და დინამიკის ანალიზში იკავებს ძალიან მნიშვნელოვან ადგილს, ამას განაპირობებს ის, რომ ის ინფორმაცია ნიმუშების შესახებ, რაც ნეიტრონული გაბნევით მიიღება, შეუძლებელია მიღებული იქნეს კვლევის სხვა უფრო იაფი მეთოდით.

### 3. ექსპერიმენტული ნაწილი შედეგები და მათი განსჯა.

#### 3.1. მცირე კუთხეების ნეიტრონული და რენტგენის სხივების გაბნევა

გაბნევის ექსპერიმენტში, გაბნეული რადიაციის I ინტენსივობა და გაბნევის ტალღის q ვექტორი ძალიან მნიშვნელოვანი სიდიდეებია. განვიხილოთ გაბნევის ინტენსიურობა ერთი ნაწილაკიდან, როგორც ცნობილია გაბნევის ინტენსიურობა ერთი ნაწილაკიდან დამოკიდებულია გაბნევის ამპლიტუდზე  $F(q)$  :

$$(2.26) \quad I(q) = [F(q)]^2$$

სადაც  $F(q)$  არის წარმოდგენილი მასის განაწილების ფურიე გარდაქმნის (მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა) და ელექტრონების განაწილების (მცირე კუთხეების რენტგენის სხივების გაბნევა)  $\rho(r)$  სახით .

$$(2.27) \quad F(q) = \int_V \rho(r) e^{-iqr} dr$$

$$(2.28) \quad \Rightarrow I(q) = \left| \frac{1}{V} \int_V \rho(r) e^{-iqr} dr \right|^2$$

იმ შემთხვევაში, თუ სისტემაში არსებული ყველა  $N$  ნაწილაკი არის ერთნაირი, მაშინ გაბნევის ინტენსიურობა გამოისახება შემდეგნაირად:

$$(2.29) \quad I(q) = \frac{N}{V} (\rho_p - \rho_0)^2 V_p^2 \left[ \frac{1}{V_p} \int_V \rho(r) e^{-iqr} dr \right]^2$$

სადაც  $\rho_0$  არის გამხსნელის მასა/ელექტრონი სიმკვრივე,  $\rho_p$  გახსნილი ნაწილაკების მასა/ელექტრონი სიმკვრივე,  $V_p$  არის ნაწილაკების მოცულობა,  $V$  არის ილუმინირებული მოცულობა,  $\rho_p - \rho_0$  არის კონტრასტი გამხსნელსა და გახსნილ ნაწილაკებს შორის,  $P(q)$  ფორმ-ფაქტორი კი გამოსახულია შემდეგნაირად  $P(q) = \left[ \frac{1}{V_p} \int_V \rho(r) e^{-iqr} dr \right]^2$ , ამავედროულად გასათვალისწინებელია ისიც, რომ საკვლევ ნიმუშში ნაწილაკები ერთმანეთთან ურთიერთქმედებს , ასეთ შემთხვევაში გაბნეული გამოსხივების ჯამური ინტენსიურობა გამოითვლება შემდეგნაირად [62] ( $F_k(q)$  წარმოდგენილია, როგორც ელექტრული ველის წვლილი  $k$  ნაწილაკების მიმართ. ქვემოთ მოცემულ გამოსახულებაში გასათვალისწინებელია რომ  $j$  და  $k$  სიდიდეები ერთმანეთის ტოლი არ არის):

$$(2.30) \quad I(q) = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^N \left\langle |F_k(q)|^2 \right\rangle + \frac{1}{V} \left\langle \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N F_k(q) F_j^*(q) e^{-iq(r_k - r_j)} \right\rangle$$

როდესაც საკვლევ ნივთიერების ნაწილაკები არის მონოდისპერსიული და სფერული მაშინ ფორმულა 2.52 შეიძლება ოდნავ გავამარტივოთ.

$$(2.31) \quad I(q) = n \left\langle |F_k(q)|^2 \right\rangle \left\{ 1 + \left\langle \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N e^{-iq(r_k - r_j)} \right\rangle \right\}$$

$$(2.32) \quad I(q) = nP(q)S(q)$$

პირველი ნაწილი  $P(q)$  ფორმ ფაქტორი, რომელიც წარმოდგენას გვაძლევს ერთი ნაწილაკის მიერ გაბნევის ინტენსიურობის წვლილზე (კონტრიბუციაზე), ფორმულის მეორე ნაწილია  $S(q)$  სტრუქტურის ფაქტორი, რომელიც გვაძლევს ინფორმაციას ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების შესახებ და ამ ნაწილაკების საკვლევ სისტემაში სპეციალური განლაგების და ორიენტაციის შესახებ. ძალიან განზავებული სისტემებისთვის  $S(q)=1$ , რაც იმას ნიშნავს, რომ სისტემაში მყოფი ნაწილაკები ვერ გრძნობენ მეზობლებს.

### 3.2. ტოიბნერ-სტრეის მოდელი ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემებისთვის

მცირე კუთხეების ნეიტრონული და რენტგენის სხივების გაბნევა ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემებიდან იძლევა სპეციფიურ განიერ პიკს, როდესაც იგება ინტენსიურობისა და გაბნეული ტალღის ვექტორის დიაგრამა  $I(q)$ . ტოიბნერის და სტრეის მიერ მოწოდებულ იქნა თეორია აღნიშნული პიკის დასახასიათებლად [36]. თეორია ეფუძნება ლანდაუს თავისუფალი ენერჯის  $F$  ექსპანციას რომელიც გამოისახება შემდეგნაირად.

$$(2.33) \quad F = \int f(\psi, \Delta\psi, \nabla\psi) d^3r$$

სადაც თავისუფალი ენერჯის სიმკვრივე  $f$  ტოლია:

$$(2.34) \quad f = a_0 + a_1\psi + a_2\psi^2 + a_3\psi^3 + a_4\psi^4 + \dots c_1(\nabla\psi)^2 + c_2(\Delta\psi)^2 + \dots$$

მიკროემულსიური სისტემებისთვის  $a_2 > 0$ ,  $c_1 < 0$ , და  $c_2 > 0$  სხვა ყველა პარამეტრი კი  $= 0$ . ეს მოცემულობა გვაძლევს შესაძლებლობას გამოვსახოთ გაბნეული ინტენსივობის დისტრიბუცია შემდეგი ფორმულის სახით:

$$(2.35) \quad I(q) = \frac{8\pi / \xi \langle (q - \bar{q})^2 \rangle c_2 / V}{a_2 + c_1 q^2 + c_2 q^4} + bkg$$

სადაც  $\langle (q - \bar{q})^2 \rangle$  ასახავს გაბნევის სიმკვრივის ძირითად კვადრატულ ფლუქტუაციას. განსხვავებული უბნების ზომები (მუდმივ მიკროემულსიურ სისტემაში კვაზი პერიოდულად განმეორებადი წყლისა და ზეთის უბნების მანძილი):

$$(2.36) \quad \frac{d}{2\pi} = \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{a_2}{c_2} \right)^{1/2} - \frac{c_1}{4c_2} \right]^{-1/2}$$

$$k = 8\pi / \xi \langle n^2 \rangle / V$$

კორელაციური სიგრძე  $\xi$  გამოითვლება ზუსტად იგივე ფორმულით, როგორც მოცემულია ფორმულაში 2.37.

$$(2.37) \quad \xi = \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{a_2}{c_2} \right)^{1/2} - \frac{c_1}{4c_2} \right]^{-1/2}$$

იმისთვის, რომ გავანალიზოთ ნეიტრონული და რენტგენის სხივების გაბნევის შედეგად მიღებული ექსპერიმენტული მონაცემები, ამისთვის მუდმივები და ნუმერატორები მოცემული ფორმულა 2.35-ში წარმოდგენილია  $\chi$  ამის სახით  $k$  სიდიდეში:

$$(2.38) \quad k = 8\pi / \xi \langle n^2 \rangle / V$$

თუ კიდევ უფრო გავიმარტივებთ საქმეს და კიდევ ერთ ნაბიჯს გადავდგამთ ჩვენი მიზნისკენ მაშინ მოგვიწევს ფორმულა 2.35-ის გაყოფა  $kc_2$  სიდიდეზე, რის შედეგადაც მივიღებთ.

$$(2.39) \quad I(q) = \frac{1}{\frac{a_2}{kc_2} + \frac{c_1 q^2}{kc_2} + \frac{q^4}{k}} = \frac{1}{r_2 + t_1 q^2 + t_2 q^4}$$

ფორმულა 2.39 იძლევა შესაძლებლობას რათა ის გამოყენებულ იქნეს მათემატიკურ კოდად სხვადასხვა სპეციალურ კომპიუტერულ პროგრამებში რათა ჩვენთვის საინტერესო ინფორმაციები იქნეს ამოწვლილი ნეიტრონული და რენტგენის სხივების გაბნევისას ურთიერთუწყვეტ მიკროემულსიური სისტემებიდან.

### 3.3. წვეთოვანი სტრუქტურის მიკროემულსიური სისტემების ანალიზის სტრატეგია გაბნევის მეთოდებით

მიკროემულსიური წვეთოვანი სტრუქტურის მოდელირება შესაძლებელია პოლიდისპერსიული მკვრივი სფეროს მოდელის საშუალებით. გაბნევის ინტენსიურობის გამოთვლა, როგორც ვიცით, შესაძლებელია ფორმულა 2.32-ით სტრუქტურის და ფორმ ფაქტორის საშუალებით. სფეროს შემთხვევაში ფორმ ფაქტორი გამოითვლება ( $\eta$ - გაბნევის განივკვეთის ფართობის სხვაობა ნაწილაკებსა და მატრიცას შორის,  $R$ = სფეროს რადიუსი):

$$(2.40) \quad P(q, R) = \frac{4}{3} \pi R^3 \eta \cdot 3 \frac{\sin(qR) - qR \cos(qR)}{(qR)^3}$$

მიკროემულსიურ სისტემებში წვეთები პოლიდისპერსიულია, აქედან გამომდინარე აუცილებელია შულც-ზიმის SZ (Schultz-Zimm) განაწილების გათვალისწინება პარამეტრი განაწილების მაქსიმუმი დიდი  $k$  -სთვის,  $k = 1/\sigma^2$ ,  $\sigma$  არის ცვლადი,  $\Gamma(k)$  არის გამა ფუნქცია) :

$$(2.41) \quad SZ(R) = \frac{N R^{k-1} k^k \exp(-k * R / R_a)}{R_a R_a \Gamma(k)}$$

მონოდისპერსიული მიახლოებით მკვრივი სფეროს სტრუქტურის ფაქტორის  $S(q,R)$  გათვალისწინებით, ინტენსიურობა შეიძლება შემდეგნაირად გამოითვალოს (მოცემულია მკვრივი სფეროს პოტენციით, რომელიც დამოკიდებულია სფეროს მოცულობით ფრაქციაზე და სფეროს რადიუსზე):

$$(2.42) \quad I(q) = \langle P(q,R)^2 \rangle S(q)$$

ზემოთ მოყვანილი მათემატიკური გამოთვლები დღეს სპეციალური კომპიუტერული პროგრამების საშუალებით ხორციელდება და ეს პროცესი საკმაოდ გამარტივებულია. ასეთი პროგრამებია SASfit[63] და GIFT[64,65].

### 3.4. ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპია

ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიული მეთოდის ძირითადი პრინციპი პოლარიზებულ ნეიტრონებთანაა დაკავშირებული. როგორც ცნობილია, ნეიტრონებს ახასიათებთ მაგნიტური მომენტი, რომელსაც არ გააჩნია მკაფიოდ მკვეთრად განსაზღვრული ერთი მიმართულება, ისინი მოუწესრიგებლად მიმართულია ყველა მიმართულებით. თუ ჩვენ სისტემაში შევიტანთ გარკვეული რაოდენობის მაგნიტურ ველს და დავაკვირდებით ნეიტრონების რაღაც გარკვეული ჯგუფის მაგნიტური მომენტის მიმართულებას ამ ველის მიმართ, ვნახავთ რომ სისტემაში თანაბარი რაოდენობით გვექნება ნეიტრონები, რომელთა მაგნიტური მომენტი მიმართულია მაგნიტური ველის პარალელურად და ნაწილის მაგნიტური მომენტი მიმართულია ანტიპარალელურად. დღეს-დღეისობით ჩვენ გვაქვს უამრავი ტექნიკური საშუალება რომელთა გამოყენებითაც შეგვიძლია ნეიტრონების პოლარიზაცია, რაც ნიშნავს იმას, რომ ნეიტრონების უმეტესობის მაგნიტური მომენტის მიმართულების კონტროლი შესაძლებელია. პოლარიზებული ნეიტრონების მაგნიტური მომენტის მიმართულებით მიმართულ მაგნიტურ მომენტის ველს ჩვენ ვუწოდებთ „გიდ ან წინამძღოლ ველს“ .

ნეიტრონების პოლარიზაციის მრავალი მეთოდი არსებობს, ჩვენ განვიხილავთ რამოდენიმეს. ბერგის დიფრაქცია შესაბამისი მაგნიტური კრისტალის გამოყენებით (9), რეფლექცია CoFe მაგნეტიზირებული სარკეების გამოყენებით

(10), ნეიტრონების ნაკადის გატარება პოლარიზებულ  $^3\text{He}$ -ში (11). თითოეული ეს მეთოდი ნეიტრონების ნაკადის მაგნიტურ მომენტს მიმართავს მაგნიტური ველის პარალელურად ან ანტიპარალელურად და სხვა ნეიტრონებს აძევებს სისტემიდან გარკვეული გზით. თუ ნეიტრონების მაგნიტური მომენტი არის მაგნიტური ველის პარალელური, მაშინ ამბობენ, რომ სპინი მიმართულია „ზევით“, ხოლო თუ მაგნიტური მომენტი მიმართულია ველის ანტიპარალელურად, მაშინ ამბობენ, რომ სპინი მიმართულია „ქვევით“. პოლარიზაციის ძირითადი პრინციპი მდგომარეობს იმაში, რომ პოლარიზატორები, რომლებიც გამოიყენება „ზევით“ მიმართული სპინის მქონე ნეიტრონების მისაღებად, ისინი გარკვეული გზით ახერხებენ იმ ნეიტრონების ბლოკირებას და სისტემიდან გაძევებას, რომელთა სპინი მიმართულია ქვევით. ზუსტად იგივე პრინციპია ქვევით მიმართული სპინის მქონე ნეიტრონების მიღებისას, ისინი აძევებენ იმ ნეიტრონებს, რომელთაც სპინი აქვთ „ზევით“. ასეთი პოლარიზატორების დაყენება ხელსაწყოზე სპეციფიურ ადგილას კერძოდ, ნიმუშამდე და ნიმუშის შემდეგ, იძლევა შესაძლებლობას გავზომოთ მხოლოდ ის ნეიტრონები, რომელთა მაგნიტური მომენტი გაბნევის პროცესის დროს არ იცვლება. იმისთვის, რომ გავზომოთ „ზევით“ და „ქვევით“ მიმართული სპინის მქონე ნეიტრონები გაბნევის პროცესისას, საჭიროა პოლარიზატორების კომბინაცია „ზევით“ და „ქვევით“, ან სპეციალური მოწყობილობა, რომელიც მოახერხებს „ზევით“ სპინის მქონე ნეიტრონების გარდაქმნას „ქვევით“ მიმართული სპინის მქონე ნეიტრონებად (ასეთ სპეციალურ ხელსაწყოს, რომელიც ახდენს სპინის მიმართულების შეცვლას ვუწოდებთ ფლიპერს). დღეს დღეისობით რამოდენიმე ხელსაწყოა ცნობილი და გამოყენებული პრაქტიკაში რომლებიც ახერხებენ სპინის მიმართულების შეცვლას. მათგან ყველაზე ცნობილია მეზეის ფლიპერი ან ადიაბატური ფლიპერი.

თუ ჩვენ ფლიპერს დავამაგრებთ საკვლევი ნიმუშის ორივე მხარეს ანუ ნიმუშამდე და ნიმუშის შემდეგ, მაშინ შესაძლებელი ხდება ყველა სპინ დამოკიდებული გაბნევის პროცესის გაზომვა ფლიპერის მარტივი ჩართვით ან გამორთვით. ეს პროცესი ცნობილია პოლარიზაციული ანალიზის სახელით. აღნიშნული ტექნიკა ძალიან მნიშვნელოვანია გაბნევის პროცესში, რადგან ზოგიერთი ნიმუში ახდენს ნეიტრონების სპინის შეცვლას გაბნევის პროცესში, ხოლო ზოგი არა. არაკოჰერენტული გაბნევა (ფორმულა 2.9), რომელიც გამოწვეულია ნიმუშში ატომბირთვული სპინების მოუწესრიგებელი განაწილებით, პოლარიზაციული ანალიზატორის გამოყენების კარგ მაგალითს წარმოადგენს. უამრავ იზოტოპს აქვს სპინური განლაგების რამოდენიმე ვარიანტი და მათი გაბნევის განივკვეთის ფართობი იცვლება როგორც ნიმუშის, ასევე ნეიტრონების სპინური განლაგების ცვლილებისას. როგორც ზემოთ იყო აღნიშნული, ნიმუშში ატომბირთვული სპინების მოუწესრიგებელი

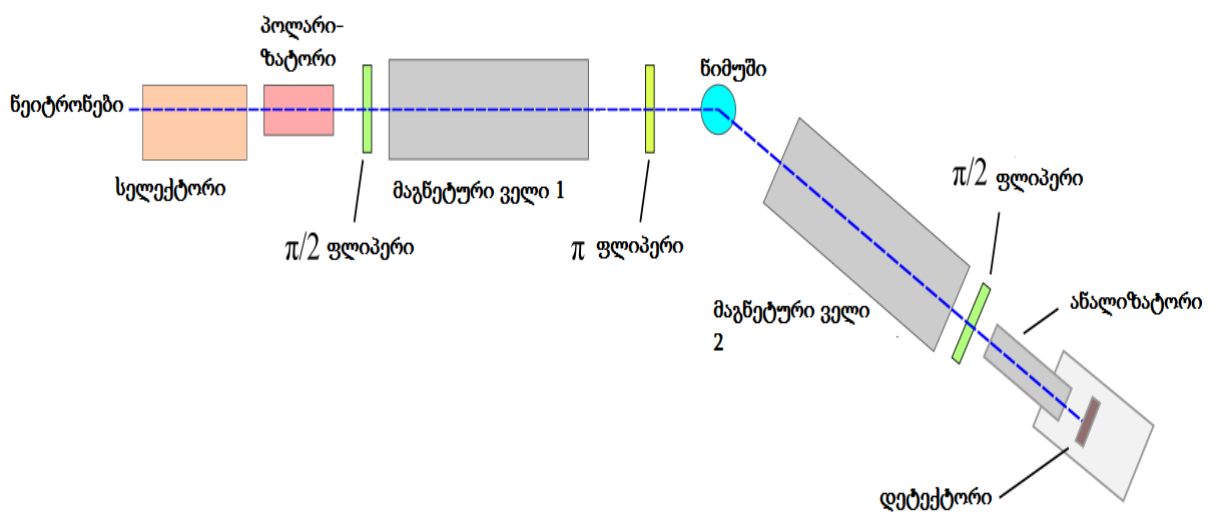
განაწილება იწვევს არაკოჰერენტულ გაბნევას. ნეიტრონების ორი მესამედი, რომელიც მონაწილეობს ამ სახის არაკოჰერენტულ გაბნევაში, ახდენს თავიანთი სპინური მდგომარეობის ცვლილებას, ხოლო ნეიტრონების დარჩენილი ერთი მესამედი არ იცვლის სპინურ მიმართულებას (სპინური მდგომარეობის ცვლილებაში იგულისხმება სპინური პოზიციის ზევიდან ქვევით ან პირიქით ცვლილება). არაკოჰერენტული გაბნევა ასევე შეიძლება გამოწვეული იყოს იმ ნიმუშებისგან, რომლებიც თავიანთ შემადგენლობაში შეიცავენ კონკრეტული ელემენტების იზოტოპურ შემადგენლობას. პოლარიზაციის ანალიზატორი, როგორც ვხედავთ, გვაძლევს საშუალებას ერთმანეთისგან განვასხვავოთ სხვადასხვა სახის ნეიტრონული გაბნევა კერძოდ კოჰერენტული გაბნევა, მაგნიტური გაბნევა და სპინ-არაკოჰერენტული გაბნევა.

ნეიტრონების პოლარიზაცია ასევე გვაძლევს შესაძლებლობას გავაუმჯობესოთ ზოგიერთი ნეიტრონული სპექტრომეტრის მგრძობიარობა. მაგ., ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტრომეტრის (13). ნეიტრონის მაგნიტური მომენტი თუ რაღაც გზით გარდაიქმნება ისე, რომ ის იყოს სისტემაში გამოყენებული მაგნიტური ველის მიმართულების პერპენდიკულარული, მაშინ ნეიტრონების მაგნიტური მომენტი დაიწყებს პრეცესიას სისტემაში გამოყენებული მაგნიტური ველის მიმართულებით, ნეიტრონების მაგნიტური მომენტის ამგვარ გადაადგილებას ჩვენ ვუწოდებთ ლარმორის პრეცესიას. ლარმორის პრეცესია რა მიმართულებით წარიმართება საათის ისრის მიმართულებით თუ საათის ისრის საწინააღმდეგოდ, დამოკიდებულია გამოყენებულ მაგნიტურ ველზე, ხოლო ამ პრეცესიის სიდიდე გამოყენებული მაგნიტური ველის სიდიდის პირდაპირპროპორციულია. თუ ნეიტრონებს გავგზავნით ორ იდენტურ სისტემაში, სადაც გამოყენებული მაგნიტური ველი ერთმანეთის ტოლია, მაგრამ განსხვავებულია მიმართულება, მაშინ პირველ სისტემაში ნეიტრონები პრეცესირებს ერთი მიმართულებით, ხოლო მეორე სისტემაში საწინააღმდეგო მიმართულებით. იმის გამო, რომ სისტემაში გამოყენებული მაგნიტური ველის სიდიდე ერთმანეთის ტოლია საათის ისრის მიმართულებით მბრუნავი და საათის ისრის საპირისპიროდ მბრუნავი ნეიტრონების რაოდენობაც ერთმანეთის ტოლი იქნება. სწორედ ეს პრინციპი უდევს საფუძვლად სპინ-ექოს, რომელიც პირველად ჰანსის მიერ იქნა აღმოჩენილი (14). თუ ნეიტრონის სიჩქარე შეიცვლება ამ ზემოთ განხილულ ორ სისტემაში, იმის გამო, რომ ადგილი აქვს არაელასტიურ გაბნევას, მაშინ საათის ისრის მიმართულების და საათის ისრის საპირისპირო მიმართულების მქონე ნეიტრონების რაოდენობა ერთმანეთის ტოლი არ იქნება. ნეიტრონების ამ ორ ჯგუფს შორის არსებული რაოდენობრივი განსხვავება ნეიტრონების სიჩქარის ცვლილების პროპორციული სიდიდეა. საბოლოოდ ნეიტრონების სიჩქარის ცვლილება



გვადლევს შესაძლებლობას ვიმსჯელოთ ნეიტრონების ენერჯის ცვლილებაზე, რომელიც გამოწვეული იყო გაბნევის პროცესით. სპინ-ექო სპექტროსკოპია ეფუძნება სწორედ ამ პრინციპს, რომელიც გვადლევს შესაძლებლობას გავზომოთ ძალიან ზუსტად ენერჯის ისეთი მცირე ცვლილებები, როგორც არის ნანო-ელექტრონ-ვოლტი.

როგორც ზემოთ ავღნიშნეთ კვლევის ამ მეთოდით შესაძლებელია ნაწილაკების დინამიკის და სტრუქტურის განსაზღვრა ნეიტრონული გაბნევის საფუძველზე [66,67]. დეტექტირებადი დრო კვლევის ამ მეთოდით არის 0.001-დან 250 ნწმ (ნანოწამი), გამოყენებული ტალღის სიგრძე 6 - 25 Å.



სურათი 14. ინსტრუმენტის გამარტივებული სქემა[68].

პოლარიზებული ნეიტრონების ნაკადი ტალღის სიგრძის შემრჩევი სელექტორის გავლით ხვდება  $B_1$  მაგნიტურ ველში (სიგრძე  $L_1$ ), რომელიც ნეიტრონების პოლარიზატორის პერპენდიკულარულია. მაგნეტურ ველში-1 მოხვედრილი ნეიტრონები განიცდიან ლარმორის პრეცესიებს. მაგნიტური ველის გავლის შემდეგ ნეიტრონებს აქვს სპეციფიური ფაზა, რომელიც დამოკიდებულია მათ სიხშირეზე  $\nu$ . ლარმორის სიხშირე  $\omega_L$  შემდეგნაირად შეგვიძლია გამოვსახოთ:

$$(2.43) \quad \omega_L = \gamma B$$

ხოლო ნეიტრონების სპინი  $\phi(\nu)$ :

$$(2.44) \quad \phi(\nu) = \omega_L t = \omega \frac{L_1 B}{\nu}$$

პოლარიზაცია  $P_x$ ,  $x$  მიმართულებით გამოითვლება შემდეგნაირად:

$$(2.45) \quad P_x = \langle \cos \varphi \rangle$$

იმ შემთხვევაში, როდესაც საქმე გვაქვს ელასტიურ გაბნევასთან, მაშინ ნეიტრონები შედიან მეორე მაგნიტურ ველში  $B_2$  (სიგრძე  $L_2$ ) რომელიც განლაგებულია პირველი მაგნიტური ველის  $B_1$ -ის ანტიპარალელურად.  $B_2$ -ის შემდეგ სპინის ფაზა გამოითვლება შემდეგნაირად.

$$(2.46) \quad \varphi = \gamma \frac{L_1 B_1}{v} - \frac{L_2 B_2}{v}$$

თუ  $L_1 B_1 = L_2 B_2$  მაშინ სპინური ფაზა ტოლია 0 და  $P_x = 1$  (სიდიდის მაქსიმუმი), რომელსაც ჩვენ სპინ-ექო წერტილს ვუწოდებთ. ხოლო როდესაც საქმე გვაქვს არაელასტიურ გაბნევასთან, მაშინ ნეიტრონების კინეტიკური ენერგია ნიმუშთან ურთიერთქმედების შემდეგ იცვლება, აქედან გამომდინარე ნეიტრონების სიხშირეც იცვლება ( $\gamma$  გირომაგნიტური კოეფიციენტი).

$$(2.47) \quad \varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = \gamma \left( \frac{L_1 B_1}{v_1} - \frac{L_2 B_2}{v_2} \right)$$

მცირე ენერგეტიკული გადასვლებისას  $dv$  და  $L_1 B_1 = L_2 B_2$  :

$$(2.48) \quad \varphi = \gamma L B \left( \frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_2} \right) = \gamma L B \left( \frac{1}{v_1} - \frac{1}{v_1 + dv} \right) \approx \gamma L B \frac{dv}{v_1^2}$$

ენერგიებს შორის სხვაობა:

$$(2.49) \quad \hbar \omega = \frac{1}{2} m v_2^2 - \frac{1}{2} m v_1^2 = \frac{m}{2} ((v_1 + dv)^2 - v_1^2) \approx m v_1 dv$$

თუ გავაერთიანებთ ფორმულა 2.47 და 2.48 მაშინ მივიღებთ:

$$(2.50) \quad \varphi = \frac{\gamma \hbar B L}{m v_1^3} \cdot \omega = \tau \cdot \omega$$

სადაც  $\tau$ -ს ჩვენ ვუწოდებთ სპინ-ექო დროს. პოლარიზაციის კოეფიციენტი  $P_x$  ასეთ შემთხვევაში გამოითვლება შემდეგნაირად.

$$(2.51) \quad P_{NSE} = \langle \cos(\varphi) \rangle = \left\langle \cos \left( \frac{\gamma B L}{m v^3} \hbar \omega \right) \right\rangle$$

სადაც  $t = \frac{\gamma \hbar BL}{mv^3}$  გაზომილი სიგნალი  $S(q, \omega)$  წარმოადგენს  $I(q, t)$  სიდიდის ფურიე-ტრანსფორმს-ფურიე გარდამქმნელს.

$$(2.52) \quad P = \frac{\int S(q, \omega) \cos(\omega t) d\omega}{\int S(q, \omega) d\omega}$$

როგორც უკვე ავლინებთ  $S(q, \omega)$  არის ფურიე-ტრანსფორმი  $I(q, t)$  სიდიდის ამ შემთხვევაში  $P$  შეგვიძლია შემდეგნაირად გამოვთვალოთ.

$$(2.53) \quad P(q, t) = \frac{I(q, t)}{I(q, 0)}$$

$P$  სიდიდე ექსპერიმენტისას იზომება სხვადასხვა სპინ-ექო დროებზე, რის შედეგადაც მიიღება კლებადი მრუდი, რომლის ანალიზი და საინტერესო ინფორმაციის ამოწვლივლა შესაძლებელია სწორი მოდელის შერჩევით, ხოლო მოდელის შერჩევა დამოკიდებულია იმაზე თუ როგორი სტრუქტურის და დინამიკის მქონე ნიმუშის ანალიზი ტარდება.

### 3.4.1. მიკროემულსიების დინამიკა

მიკროემულსიებისთვის დამახასიათებელია სხვადასხვა ტიპის მოძრაობა: კოლექტიური მოძრაობა მთლიანად ურთიერთუწყვეტი მიკროემულსიური სისტემისთვის და ამფიფილური მოლეკულების ტალღოვანი მოძრაობა, რომელიც გამოწვეულია თერმული მოძრაობით [33,34,73]. თუ აღნიშნული ორივე ტიპის მოძრაობა იქნა კომბინირებული ემპირიული მიზნისთვის, მაშინ გასაშუალოებული გაბნევის ფუნქცია შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგნაირად:

$$(2.54) \quad \frac{I(q, t)}{I(q, 0)} = \exp(-\Gamma_{col} \tau) (A + (1 - A) \exp(-\Gamma_u \tau)^\beta)$$

$\Gamma_{col}$  შესაძლებელია რომ სინათლის დინამიური გაბნევის მეთოდით გაიზომოს,  $\Gamma_u$  გამოსახავს თერმული ენერგიით წაქეზებულ ტალღური მოძრაობის რელაქსაციის კლების ტემპს,  $\beta=2/3$  გამოსახავს დაგრძელების ექსპონენტას [34].

### 3.5. რეფლექტომეტრიული მეთოდი

განხილული მეთოდები გვაძლევს ინფორმაციას საანალიზო ნიმუშის მთლიანი მოცულობის სტრუქტურისა და დინამიკის შესახებ. რაც შეეხება საანალიზო ნიმუშის ზედაპირზე მყოფი მოლეკულების დინამიკას და სტრუქტურას, ნეიტრონების გამოყენება ასეთი ტიპის კვლევებში ლოგიკურად

არ უნდა იყოს შესაძლებელი ანუ საინტერესო ინფორმაციის მომცემი. მიზეზები, რომლებიც გვაფიქრებინებს რომ ნეიტრონების გამოყენება ზედაპირზე არსებული ატომების სტრუქტურის და დინამიკის დასახსნად შეუძლებელია, მდგომარეობს შემდეგში: წინა თავებში აღნიშნული იყო, რომ ნეიტრონები ღრმად აღწევენ ნიმუშში და მათი შეჩერება ნიმუშის ზედაპირის მიერ არ ხდება. ამავდროულად გასათვალისწინებელია ისიც, რომ ნეიტრონები ძალიან სუსტად ურთიერთქმედებენ ნიმუშთან, რაც განაპირობებს ნიმუშის დიდი რაოდენობით გამოყენებას ანალიზის პროცესში. თუ მხედველობაში მივიღებთ იმასაც, რომ ნიმუშის ზედაპირზე არის გაცილებით ნაკლები ატომების რაოდენობა, ვიდრე მთლიან ნიმუშში, მაშინ სრულიად ლოგიკურია, რომ ნეიტრონების გამოყენება ნიმუშის ზედაპირზე არსებული ატომების სტრუქტურის დასახსნათებლად მიზანშეწონილი ვერ იქნება. თუმცა, რეალობა საპირისპიროა და ნეიტრონების გამოყენება ზედაპირზე მყოფი მოლეკულების დინამიკის და სტრუქტურის შესასწავლად სრულიად შესაძლებელია. კერძოდ, თუ ნიმუშის ზედაპირზე ნეიტრონებს მივმართავთ მცირე დაცემის კუთხით, მაშინ ისინი შეიძლება გამოვიყენოთ ნიმუშის ზედაპირზე არსებული მოლეკულების დასახსნათებლად. ნივთიერებებს, რომლებსაც აქვთ გლუვი ან ბრტყელი ზედაპირი მათი რეფლექციის კუთხე  $a_r$  და დაცემის კუთხე  $a_i$  ერთმანეთის ტოლია და ნაკლებია ყოველთვის კრიტიკულ კუთხეზე, რომელიც შემდეგნაირად აღინიშნება  $\gamma_c$ . ასეთი სახის რეფლექციას სპეკულარულ რეფლექციას უწოდებენ, რაც ნიშნავს იმას, რომ დაცემის კუთხე  $a_i$  და რეფლექციის კუთხე  $a_r$  ერთმანეთის ტოლია. ასეთ შემთხვევებში ტალღური ვექტორის ტრანსფერი  $\vec{Q}$  მართობულადაა მიმართული საანალიზო ნივთიერების ზედაპირის მიმართ, რომელიც ძირითად შემთხვევებში აღინიშნება  $z$  მიმართულებით. ტალღური ვექტორი ასეთ შემთხვევაში შეგვიძლია მათემატიკურად გამოვსახოთ შემდეგი გამოსახულებით:

$$(2.55) \quad Q_z = k_{iz} - k_{ir} = \frac{2\pi}{\lambda} (\sin \alpha_i - \sin \alpha_r) = \frac{4\pi \sin \alpha_i}{\lambda},$$

სადაც  $k_{iz}$  წარმოადგენს  $z$  კომპონენტზე ინიცირებული ნეიტრონების ტალღურ ვექტორს, ხოლო  $k_{ir}$  წარმოადგენს ამავე  $z$  კომპონენტიდან რეფლექტირებული ნეიტრონების ტალღურ ვექტორს. რეფლექციისას ადგილი არ აქვს ნეიტრონების ტალღის სიგრძის ცვლილებას, პროცესი არის ელასტიური, რაც იმას ნიშნავს რომ ტალღური ვექტორის მოდულიც უცვლელი რჩება. მსგავსი პროცესია სინათლის ნაკადის ურთიერთქმედებისას წყლის ზედაპირზე, ნაწილი სინათლისა განიცდის რეფლექტირებას, ხოლო ნაწილი გაივლის  $n.k$

ტალღური ვექტორით, სადაც  $n$  კონკრეტული ნივთიერების რეფლექციის ინდექსია, ხოლო  $k$  ინიცირებული სინათლის ტალღის ტალღური ვექტორი. ნეიტრონების კინეტიკური ენერგია, ვიდრე ისინი შეეხებიან საანალიზო ნივთიერების ზედაპირს გამოისახება  $\hbar^2 k^2 / 2m$  (სადაც  $m$  არის ნეიტრონის მასა) ხოლო ნიმუშთან ურთიერთქმედებისას ნეიტრონების კინეტიკური ენერგია არის  $\hbar^2 k^2 n^2 / 2m$ . განსხვავება გამოწვეულია ნიმუშიდან ნეიტრონების გაბნევის პოტენციალის სხვაობით, რომელიც მოცემულია ფორმულა 2.3-ით და გასაშუალოებულია ნიმუშის მოცულობით. ენერგიის კონსერვაცია გვადლევს საშუალებას გამოვსახოთ გარდატეხის ინდექსი შემდეგი ფორმულით.

$$(2.56) \quad n = 1 - \rho \lambda^2 / 2\pi$$

სადაც  $\rho$  არის გაბნევის განივკვეთის ფართობის გასაშუალოებული სიდიდე. ჩვენ ასევე შეგვიძლია გამოვიყენოთ ენერგიის კონსერვაციის კანონი საანალიზო ნიმუშის  $z$  კომპონენტზე მოქმედი ნეიტრონების ტალღური ვექტორის გამოსახვის მიზნით.

$$(2.57) \quad k_{z'}^2 = k_{iz}^2 - 4\pi\rho$$

ნეიტრონების კრიტიკულ რეფლექციას ადგილი აქვს მაშინ, როდესაც გატარებული (ტრანსმიტირებული) ნეიტრონების ტალღური ვექტორი ნულის ტოლია, ეს მსჯელობა საშუალებას გვადლევს გამოვსახოთ საანალიზო ნიმუშების გარდატეხის კრიტიკული კუთხე შემდეგი ფორმით  $\gamma_c = \sin^{-1}(\rho \lambda / 2)$ . ნივთიერებების მაგ. ნიკელის, რომლებიც სხვა ნივთიერებებთან შედარებით გაცილებით მეტად ირეკლავს მათზე დაცემულ სხივს თუ გამოსხივებას, გარდატეხის კრიტიკული კუთხე ტოლია რამოდენიმე ნანომეტრის, ზოგჯერ ეს სიდიდე უტოლდება თერმული ნეიტრონების ტალღურ სიგრძეს. როგორც კი გამოსხივების (რადიაციის) დაცემის კუთხე აღემატება სისტემის კრიტიკული გარდატეხის კუთხეს მით უფრო ნაკლები ნეიტრონების არეკვლა მოხდება საანალიზო ნიმუშის ზედაპირიდან. უფრო კონკრეტულად რეფლექტირება  $R(Q_z)$  ანუ ნეიტრონების რაოდენობა, რომელიც აირეკლება საანალიზო ნიმუშის ზედაპირიდან, ემორჩილება იმ კანონს, რომელიც ფრეზელის მიერ იქნა აღმოჩენილი საანალიზო ნივთიერებების ზედაპირზე სინათლის სხივის რეფლექტირების აღწერისას. კანონი შემდეგნაირად შეიძლება ჩამოყალიბდეს: რეფლექტირება მცირდება დაცემის კუთხის მეოთხე ხარისხის ძალით, რა სიდიდითაც დაცემის კუთხე აღემატება იმ მინიმალურ კუთხეს, რომლითაც შეიძლება მოხდეს ნიმუშის ზედაპირსა და გამოსხივებას შორის მინიმალური ურთიერთქმედება.

როგორც ჩვენთვის ცნობილია ფრეზელის კანონი სამართლიანია გლუვი , ბრტყელი ზედაპირის და ჰომოგენური შემაღენლობის მქონე ნივთიერებებისთვის. ხოლო როდესაც გვაქვს რთული სისტემა, რომელიც შედგება მრავალ შრიანი სისტემისგან და თითოეული შრის გაბნევის განივკვეთის ფართობი განსხვავებულია ერთმანეთისგან, მაშინ ნეიტრონებით გაზომილი რეფლექცია გამოისახება უფრო რთული ფორმულით, რომელსაც შემდეგი სახე აქვს:

$$(2.58) \quad R(Q_z) = \frac{16\pi^2}{Q_z^4} \left( \int \frac{d\rho(z)}{dz} e^{iQ_z z} dz \right)^2$$

სადაც პრე-ფაქტორად გამოყენებულია ფრეზელის რეფლექცია რომელსაც ზემოთ შევხებით. ფორმულა 2.58 გვეუბნება რომ რეფლექცია დამოკიდებულია გაბნევის განივკვეთის ფართობის გრადიენტზე საანალიზო ნიმუშის ზედაპირის მართობული მიმართულებით ( $z$  მიმართულება). როდესაც საქმე გვაქვს რთულ (კომპლექსურ) ნიმუშთან, რომელიც შედგება მრავალ შრიანი პარალელური შრეებისგან, მაშინ რეფლექტირების გამოსახულებას აქვს უფრო რთული ფორმა, ვიდრე ეს გადმოცემულია ფორმულა 2.58-ით. კერძოდ, მრავალშრიანი სისტემისთვის ხდება თითოეული მისი შემაღენელი შრის გაბნევის განივკვეთის ფართობის გათვალისწინება, რაც ცნობილია პარატის ალგორითმის(Parratt formalism) სახელწოდებით (16), რისთვისაც დღეს არსებობს უამრავი კომპიუტერული პროგრამა. პარატის ალგორითმის გამოყენებისას რეკომენდირებულია ყურადღება მიექცეს რამოდენიმე კრიტიკულ წერტილს, რომლებიც სისტემაზე დამოკიდებული წერტილებია და ყველა საანალიზო სისტემისთვის ინდივიდუალურია. ამ დეტალებს აქ არ განვიხილავთ დაინტერესებულ მკითხველს უფრო ღრმად ინფორმაცია შეუძლია მიიღოს ამ ნაშრომის ბოლოს მითითებულ სპეციალურ ლიტერატურაში. ყველა ამ პროცესის გათვალისწინებით ფორმულა 2.3-ით ვან ჰოვი გვეუბნება, რომ ნეიტრონული გაბნევა ძალიან სუსტი პროცესია იმისთვის, რომ აღიწეროს ალგუნების თეორიით. ბორნის ალბათობის თეორია ნეიტრონული რეფლექტირების რაღაც პროცესებს ხსნის, მაგრამ ეს არ არის საკმარისი მთელი პროცესის თეორიული მოდელის შესაქმნელად, ბორნის ალბათობის თეორია სუსტია განსაკუთრებით, როდესაც საქმე გვაქვს ისეთ ექსპერიმენტთან, სადაც დაცემის კუთხე ბევრად მეტია სისტემის კრიტიკულ კუთხეზე. ასეთ შემთხვევებში ძალიან მცირე რაოდენობის ნეიტრონების რეფლექტირება ხდება და ამ პროცესის აღსაწერად ბორნის ალბათობის თეორია არის ძალიან სუსტი. დღეს ჩვენ გვაქვს თეორიული მოდელი, რომელიც მსგავს შემთხვევებს კარგად აღწერს და ეს თეორია ცნობილია ე.წ. distorted born wave approximation-ის სახელით ნიმუშის ზედაპირის სიუხემის

გავლენა რეფლექტირებულ ნეიტრონებზე არის განსხვავებული იმ შედეგისაგან, რაც ფორმულა 2.18-დან გამომდინარეობს და ამ ეფექტის გათვალისწინება შესაძლებელია მხოლოდ ე.წ. ბორნის მოდიფიცირებული ტალღური ალბათობის თეორიის მიერ.

კვლევის ნეიტრონული რეფრაქტირების ტექნიკა ფართოდ გამოიყენება კოლოიდური სისტემების კვლევაში, ბიოლოგიური ნიმუშების დასახასიათებლად, ბიოფიზიკის პრობლემების შესასწავლად (17). კვლევის ამ მეთოდს ფართოდ იყენებენ აგრეთვე მყარი ნივთიერებების ფიზიკაში, როდესაც მათი სამეცნიერო კითხვა ეხება ისეთ სისტემას, რომელიც შედგება მრავალშრიანი მეტალის მოლეკულებისგან.

### 3.6. რეოლოგია

რეოლოგია არის მეცნიერება ნივთიერებების დეფორმაციასა და დინების შესახებ. ძირითადად რეოლოგიაში განიხილება სისტემები, რომლებსაც უნარი აქვთ თხევად ან მყარ მდგომარეობაში განიცადონ გარკვეული დეფორმაცია. რეოლოგიას, როგორც მეცნიერებას საფუძველი ჩაეყარა 1920 წელს როდესაც აქტიურად დაიწყო პოლიმერული და კოლოიდური პროდუქციის წარმოება. ნიუტონისეული სითხეები და ჰუკისეული მყარი ნივთიერებები არიან რეოლოგიური კვლევის სფეროს გარეთ, ეს სისტემები რეოლოგიური მეთოდით არ შეისწავლება, ყველა სხვა სისტემები, რომლებიც ამ ორ უკიდურესობას შორის თავსდება, შეგვიძლია დავახასიათოთ რეოლოგიური კვლევის მეთოდით. რეოლოგია გამოყენებითი მეცნიერებაა, რომელიც ორ ძირითად მიზანს ემსახურება. პირველი, რეოლოგიური მეთოდით ცდილობენ გაარკვიონ კორელაცია ნივთიერების სტრუქტურასა და მისი დინების თავისებურებებს შორის. მეორე, ნივთიერებების დეფორმაციის დახასიათებისას, ცდილობენ გამოავლინონ ფუნდამენტური კავშირი დეფორმაციასა და გამოყენებულ ძალას შორის, სწორედ ამ ორ სიდიდეს შორის კავშირი გამოხატულია მათემატიკური ფორმულებით, რომლებსაც რეოლოგიის კონსტიტუციურ- ძირითად ფორმულებს უწოდებენ. ეს ფორმულები შეიძლება გამოყენებულ იქნას, რათა თეორიულად გამოთვლილ იქნას კონკრეტული ნივთიერების რეოლოგიური ქცევა, რაც ნიშნავს იმას რომ ჩვენ გარკვეული წარმოდგენა გვექნება ამ ნივთიერების დეფორმაციაზე და დინების თავისებურებაზე. დროზე დამოკიდებულების მიხედვით ანუ დროის ის მონაკვეთი, როდესაც ხდება დეფორმაცია, ნივთიერებები ავლენენ მყარი (დროის მოკლე პერიოდი) და თხევადი (დროის ხანგრძლივი პერიოდი) სისტემებისთვის დამახასიათებელ რეოლოგიურ თვისებებს. უმეტესწილად ნივთიერებების უმეტესობა რეოლოგიური ექსპერიმენტისას ავლენს

ერთდროულად, როგორც თხევად, ასევე მყარი ნივთიერებებისთვის დამახასიათებელ ქცევას. ნივთიერებების სიბლანტე არ არის მუდმივი უცვლელი სიდიდე, ის იცვლება სხვადასხვა ფაქტორების გავლენით. სიბლანტის ცვლილების მიხედვით განარჩევენ „შეაფიკენინგ და შეაფინინგ“ სისტემებს. შეაფინინგ სისტემებისთვის დამახასიათებელია სიბლანტის შემცირება მასზე დეფორმაციული ძალების მოქმედებისას, მაგ., მაიონეზი, როდესაც ის ზის დანის პირზე, ერთადერთი ძალა, რომელიც მასზე მოქმედებს გახლავთ გრავიტაციული ძალა და მაშინ მისი სიბლანტე არის მაღალი, ხოლო როდესაც მას ჩვენ მივმართავთ სენდვიჩში, მაშინ მოქმედებს ჩვენ მიერ ინიცირებული სხვა ძალებიც და მისი სიბლანტე მცირდება ამ ძალების ზემოქმედების შედეგად. ხოლო შეაფიკენინგ სისტემებისთვის კი პირიქით, დამახასიათებელია სიბლანტის ზრდა დეფორმაციული ძალის სიდიდის ზრდის პარალელურად. კიდევ ერთი მარტივი რეოლოგიური პროცესის ასახსნელად მოვიყვანთ ძალიან მარტივ მაგალითს, კერძოდ კეჩუპი არის ძალიან ნათელი მაგალითი ისეთი სისტემებისა, რომლებიც გარკვეული სტრესის და ძალების გარეშე არ დაიწყებს დინებას, იმ მინიმალურ ძალას ან სტრესს, რომელიც საჭიროა ამ კონკრეტულ შემთხვევაში კეჩუპის და ზოგად შემთხვევაში ნებისმიერი სხვა სისტემის დინებისთვის, ჩვენ ვუწოდებთ დენადობის ზღვარს. ჩვენ ასევე ვიცნობთ ისეთ სისტემებს, რომელთა სიბლანტე დამოკიდებულია მათი დეფორმაციის ისტორიაზეც და ეს სიბლანტე იცვლება დროში. ასეთ პროცესს ტიქსოტროპია ეწოდება. სხვა სიტყვებით რომ განვმარტოთ ტიქსოტროპია, ჩვენ შეგვიძლია ვთქვათ რომ ეს არის დროზე დამოკიდებული შეაფინინგის თვისება ანუ ზოგი არაანიუტონისეული სითხეები რაც უფრო დიდი ხნის განმავლობაში იქნება გარკვეული სტრესის და ძალის ქვეშ, მით უფრო მცირდება მათი სიბლანტე. აგრეთვე ჩვენ გვხდება ზოგიერთი ნივთიერება, რომლებიც არიან ანტიტიქსოტროპები, რომლებიც მუდმივი სტრესის პირობებში იწვევენ თავიანთი სიბლანტის ზრდას, ზოგ შემთხვევაში ეს სიბლანტე იმდენად იზრდება, რომ ისინი თხევადი მდგომარეობიდან გადადიან მყარ მდგომარეობაში. ასეთი ნივთიერებების რაოდენობა არის მცირე, ისინი არ არიან ფართოდ გავრცელებული. ასეთ ნივთიერებებს რეოპექტიკური ეწოდება.

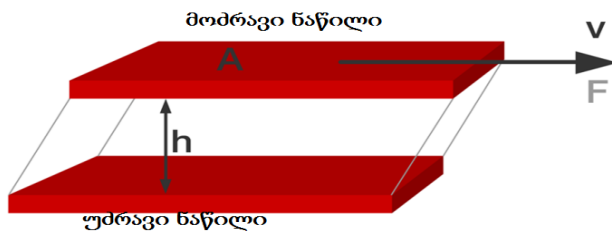
### **3.6.1. ძირითადი რეოლოგიური ტერმინების დახასიათება**

რეომეტრია კვლევის ინსტრუმენტული მეთოდია, რომლის საშუალებითაც ვიღებთ ნივთიერებების რეოლოგიური ქცევის შესახებ ინფორმაციას, რომელიც კორელაციაშია ამ ნივთიერებების მექანიკურ თვისებებთან. როგორც ცნობილი ნივთიერებები გარე ზემოქმედების შედეგად განიცდიან გარკვეულ დეფორმაციას რაც ნიშნავს იმას, რომ ამ ნივთიერების შემადგენელი



მოლეკულები გარკვეული მანძილით ან შორდებიან ერთმანეთს და წაგრძელებიან ან უახლოვდებიან ერთმანეთს და შეიკუმშებიან, ამ პროცესს ჩვენ ვუწოდებთ დეფორმაციას. იმის და მიხედვით, თუ როგორია დეფორმაცია, ინფორმაციას ვიღებთ ნიმუშის მექანიკურ თვისებებზე. ყველაზე მარტივი გზა, რათა მოვახდინოთ რეოლოგიური თვისებების ილუსტრირება გახლავთ ორი პარალელური დისკის მოდელი. ზედა ნაწილი ამ სისტემისა, რომელსაც აქვს გარკვეული ზედაპირული ფართობი  $A$  არის მოძრავი ნაწილი, რომელიც მოძრაობს მასზე  $F$  ( $N=კგმ/წმ^2$ ) ძალის მოქმედებისას გარკვეული  $v$  ( $მ/წმ$ ) სიჩქარით. ქვედა ნაწილი ამ სისტემისა გახლავთ უძრავი. ამ ორ დისკს შორის მანძილი, სადაც საკვლევი ნივთიერება უნდა მოთავსდეს გამოსახულია  $h$  ( $მ$ ) სიმბოლოთი. ამ ორ დისკს შორის მოთავსებულ გარკვეული სისქის ნივთიერებისთვის მნიშვნელოვანია ლამინარული დინება, რადგან ტურბულენტური დინება ზრდის დინების წინააღმდეგობას, რაც ნივთიერებების შესახებ რეოლოგიური თვისებების არასწორი ინტერპრეტაციის საშუალებას გვაძლევს.

### სურათი 1111.1 პარალელური დისკის მოდელი.



ძვრის სიჩქარე  $\dot{\gamma} = v / h$   $წმ^{-1}$

ძვრის დაძაბულობა  $\tau = F / A$  პასკალი

სიბლანტე  $\eta = \tau / \dot{\gamma}$  პასკალიწმ

დეფორმაცია  $\gamma = dx / h$  არ აქვს განზომილება

### 3.6.2. განმარტებები.

ძვრის დაძაბულობა

$A$  ზედაპირზე მოქმედი  $F$  ძალა იწვევს ორ პარალელურ დისკს შორის მოთავსებულ სითხის გადაადგილებას, ამ გადაადგილების სიხშირე

მოცემული ძალის პირობებში კონტროლირდება საანალიზო მატერიის შინაგანი ძალით.

შეარ სტრესს  $\tau = \frac{ForceF}{Aarea} = \text{ნ(ნიუტონი)/მ}^2 = \text{პა (პასკალი)}$

100პა=1მილიბარი.

**შეარ რეიტ.** ძვრის სიჩქარე

გარე ძალების მოქმედების შედეგად ორ პარალელურ დისკს შორის მოთავსებული სითხე განიცდის (ლამელარულ) დინებას. ზედა ნაწილი ამ ორი პარალელური დისკისა მოძრაობს მაქსიმალური სიჩქარით, მაშინ როცა ქვედა ნაწილი რჩება უძრავი. ძვრის სიჩქარე (შეარ რეიტი) შემდეგნაირად შეგვიძლია გამოვსახოთ:

$$\dot{\gamma} = dv / dh$$

სადაც dv-თი გამოსახულია ორ პარალელურ დისკს შორის მოთავსებული სითხის სხვადასხვა ფენის მოძრაობის სიხშირის დიფერენციალი, ხოლო dh-ით გამოსახულია ამ პარალელურ დისკებს შორის მოთავსებული სითხის სისქის დიფერენციალი. (ლამელარულ) დინებისას ორ პარალელურ დისკს შორის მოთავსებული სითხის დინების დიფერენციალი და მისი სისქე მუდმივია (dv=const., dh=const.) აქედან გამომდინარე ამ ფორმულაში მოცემული დიფერენციალი შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგი ფორმით:

ძვრის სიჩქარე  $\dot{\gamma} = \frac{v}{h} = \frac{m/s}{m} = s^{-1}$

ზოგჯერ  $\dot{\gamma}$  სიმბოლოს ნაცვლად ძვრის სიჩქარე შეიძლება ლიტერატურაში შეგვხვდეს D სიმბოლოთი.

**3.6.3. დინამიური სიბლანტე.**

სიბლანტე გვამლევს ინფორმაციას ნივთიერების სიმტკიცის შესახებ, კერძოდ ეს არის სისდიდე რომელიც გვეუწება თუ როგორი წინააღმდეგობის გაწევა შეუძლია სითხეს დეფორმაციისთვის, რაც უფრო დიდია ნივთიერების სიბლანტე მით უფრო დიდი ძალაა საჭირო, რათა მისი დეფორმირება მოხდეს.

დინამიური სიბლანტე  $\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} = (\text{ძვრის დაძაბულობა/ძვრის სიჩქარე}) = \text{პა}\cdot\text{წმ}$

პა·წმ=პასკალი· წმ/წმ. ეს სიდიდე სიბლანტის გამოსახვის საერთაშორისო სიდიდეა.

კინემატიკური სიბლანტე  $\nu = \frac{\eta}{\rho}$  მმ<sup>2</sup>/წმ როგორც ფორმულიდან ჩანს

კინემატიკური სიბლანტე დაკავშირებულია დინამიურ სიბლანტესთან ნივთიერების სიმკვრივის გათვალისწინებით. კინემატიკური სიბლანტე ძირითადად გვხვდება, როდესაც ნივთიერებათა სიბლანტეს გაზომვა ხდება კაპილარული ვისკომეტრებით.

### 3.7. ბენზოკაინისა და პროპანონოლის გავლენა ფოსფოლიპიდების ორმაგ ლიპიდურ შრეზე

უჯრედული მემბრანები ძირითადად შეიცავს ორმაგ ლიპიდურ შრეს თავიანთი სტრუქტურის შემადგენლობაში [97]. უჯრედულ მემბრანაში არსებული ორმაგი ლიპიდური შრე ძირითადად შედგება ასობით და ათასობით ფოსფოლიპიდისგან, რომლებიც ამფიფილურ მოლეკულებს წარმოადგენს, ჰიდროფილურ ნაწილს შეადგენს ფოსფატური თავები, ხოლო ჰიდროფობური ნაწილი წარმოადგენილია ცხიმოვანი მჟავების ჰიდროფობური ჯაჭვით. ძირითადი ფუნქცია უჯრედული მემბრანის არის უჯრედის დაცვა გარეშე ფაქტორებისგან, ის ასრულებს სელექტიური ბარიერის ფუნქციას და იცავს უჯრედის შიგთავს მისთვის არასასურველი სტუმარი მოლეკულებისგან [98]. გარდა ამ ბიოლოგიური თვისებისა უჯრედული მემბრანა მონაწილეობს აგრეთვე სხვადასხვა ბიოლოგიურ პროცესებში. უჯრედული მემბრანის, როგორც სელექტიური ბარიერის ფუნქციას განაპირობებს მის შემადგენლობაში სხვადასხვა აგებულების პროტეინების არსებობა, რომლებიც დაკავშირებული არიან უჯრედული მემბრანის სტრუქტურასთან. უჯრედული მემბრანის პროტეინების ბიოლოგიური ფუნქცია მრავალნაირია. ერთ-ერთი ასეთი ფუნქცია არის ინფორმაციული სიგნალების გადაცემა მეზობელი უჯრედებისთვის და გარე სტუმარ მოლეკულებთან ურთიერთქმედება [99]. სწორედ ამიტომ უმეტესი წამლების დიზაინი აგებულია ისე, რომ მათ შეძლონ უჯრედული მემბრანის სპეციფიურ პროტეინთან ურთიერთქმედება [100-101]. სწორედ ამ მიზეზების გამო წამლების მოქმედების მექანიზმების დადგენისას მეცნიერების უმეტესობა ფოკუსირდება წამლისა და სპეციფიური პროტეინის ურთიერთქმედების დახასიათებაზე, ხოლო წამლის და ფოსფოლიპიდების ურთიერთქმედების თავისებურებები წამლების მოქმედების მექანიზმის დადგენისას რიგ შემთხვევებში უგულებელყოფილია. ყველა თანხმდება, რომ წამლების მოქმედების მექანიზმების დახასიათება მხოლოდ მათი

პროტეინებთან ურთიერთქმედების საფუძველზე საკმარისი არ არის და მათი მოქმედების მექანიზმების ასახსნელად საჭიროა აგრეთვე გავითვალისწინოთ მათი ფოსფოლიპიდებთან ურთიერთქმედების თავისებურებები. აგრეთვე აღსანიშნავია ის ფაქტიც, რომ როდესაც წამლისა და უჯრედული პროტეინის ურთიერთქმედებას ვსწავლობთ აუცილებელია, რომ პროტეინს ქონდეს ზუსტად იგივე სტრუქტურა და თვისებები, რაც მას აქვს უჯრედული მემბრანის ლიპიდურ შრეში არსებობისას. უჯრედული პროტეინების ამ მონაცემების ზუსტი მოდელირება საკმაოდ რთულია, ამასთან მათი ამოწვილვა უჯრედული მემბრანის ლიპიდური ორმაგი შრიდან ბევრ რისკებთან არის დაკავშირებული, კერძოდ, პროტეინების სენსიტიურობიდან გამომდინარე ისინი ძალიან ადვილად განიცდიან დენატურაციას. აგრეთვე აღსანიშნავია ისიც, რომ იმ ბიოლოგიური ფუნქციის ზუსტი გაგება რომელსაც უჯრედული პროტეინები ასრულებენ შესაძლებელია მხოლოდ მაშინ, როდესაც ისინი ლოკალიზებულია ფოსფოლიპიდურ ორმაგ ლიპიდურ შრეში. როგორც ჩანს წამალი-ფოსფოლიპიდის ურთიერთქმედების დახასიათება არის საკმაოდ მნიშვნელოვანი საფეხური, რათა სრულად იქნეს გაგებული და შეფასებული ის როლი, რომელსაც ადგილი აქვს წამალი-პროტეინი და წამალი ფოსფოლიპიდის ურთიერთქმედებისას. უამრავმა ექსპერიმენტებმა, რომლებიც ჩატარებული იქნა როგორც ინვივო ასევე ინვიტრო სისტემებში, აჩვენა, რომ წამალი ლიპიდის ურთიერთქმედებას აქვს მნიშვნელოვანი გავლენა წამლების ფარმაკოკინეტიკურ თვისებებზე, დისტრიბუციაზე, ელიმინაციაზე და წამლების ეფექტურობაზე.

ამის გათვალისწინებით სამართლიანი იქნება თუ ვიტყვით რომ წამალი-ლიპიდის ურთიერთქმედების შესწავლა მნიშვნელოვანია, რათა გამოვლენილ იქნას წამლების მოქმედების ახალი პრინციპები, რომლებიც შეძლებენ წამლების ფიზიოლოგიური აქტივობების გაუმჯობესებას, რაც თავისთავად ნიშნავს მცირე დოზების მიღებას და ნაკლებ გვერდით ეფექტებს. ამ მიმართულებით უამრავი კვლევებია ჩატარებული კერძოდ წამლების სხვადასხვა ოჯახიდან მაგალითად, ანტიბიოტიკები [102-105], ანტიფსიქოტროპული [106-109], სიმსივნის საწინააღმდეგო [110-111]. წამლების ურთიერთქმედება ლიპიდებთან დახასიათებული იქნა, როგორც ექსპერიმენტული მეთოდებით, ასევე კომპიუტერული სიმულაციის გამოყენებით [112-113]. ბიომემბრანების კომპლექსურობა ძალიან რთულს ხდის წამალი-ლიპიდის ურთიერთქმედების დახასიათებას. სწორედ ამის გამო ჩვენ ვიყენებთ მოდელურ სისტემებს, რათა მაქსიმალურად მივუახლოვდეთ და შევძლოთ ნატურალური ლიპიდური ორმაგი შრის დუბლირება.

სამუშაოს ამ ნაწილში განხილული იქნება მოდელურ უჯრედულ მემბრანაზე, კერძოდ ფოსფოლიპიდებზე ბენზოკაინისა და პროპანოლის მოქმედების პრინციპის თავისებურებები. მოდელური სისტემები როგორც არის ლიპოსომები

[114] და ლამელარული სისტემები [115] წარმოადგენს კარგ ალტერნატივას, რათა შესწავლილი იქნეს ნატურალური უჯრედული მემბრანები. ასეთი მოდელური მემბრანული სისტემები იძლევა შესაძლებლობას, რათა დიდი სიზუსტით იქნეს დახასიათებული საკვლევი ნიმუშების თვისებები და მათი თავისებურებები სხვადასხვა სტუმარ მოლეკულებთან ურთიერთქმედებისას.

ბენზოკაინი, ქიმიურად ეთილ ესტერ-4-ამინობენზოიკის მჟავა, გამოიყენება როგორც ლოკალური ანესთეტიკი ტკივილების გამაყუჩებლად. შეერთებულ შტატებში ეს წამალი საკმაოდ ხშირად გამოიყენებადია, კერძოდ, ყოველწლიურად ხდება 30 მლნ ბენზოკაინის გამოწერა პაციენტებისთვის.

პროპანოლი ცნობილია, როგორც ბეტა ბლოკატორი. ის ძირითადად გამოიყენება წნევის რეგულირებისას და სხვადასხვა კარდიოართიმული პრობლემების მოსაგვარებლად.

ამ სისტემების დასახასიათებლად ჩავატარეთ ექსპერიმენტები ნანოდონეზე ნეიტრონული რეფლექტომეტრის, მცირე სიღრმეზე მოქმედი მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის და კლასიკური მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდებით, რომლებმაც მოგვცა საშუალება დეტალურად დაგვეხასიათებინა მოდელური ბიომემბრანის სტრუქტურული ცვლილებები მასზე წამლების ურთიერთქმედებისას. ექსპერიმენტებმა აჩვენა, რომ ბენზოკაინი იწვევს ლიპიდური ორმაგი შრის გაფართოებას და ლოკალურად ებმის მას, ხოლო პროპანოლი ზრდის ლიპიდური ორმაგი შრის მოუწესრიგებლობას, რაც ხელს უწყობს მოუწესრიგებელი ლამელარული და დიდი ღუნვადობის მქონე სტრუქტურების ფორმირებას.

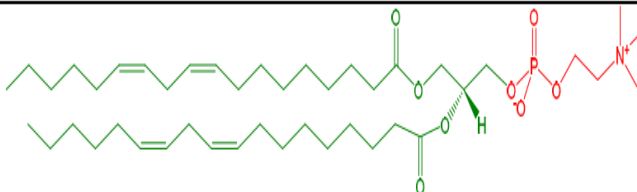
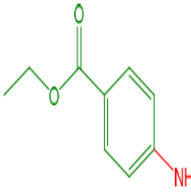
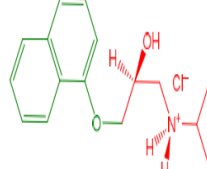
### 3.7.1. ექსპერიმენტული ნაწილი

**გამოყენებული მასალები.** SoyPC-ის ძირითადი ქიმიური შემადგენლობაა 1,2-დინილოლიენ-გლიცერო-3-ფოსფოქოლინი, სისუფთავე 95%, საშუალო მოლეკულური მასა 777.037 ა.მ.ს. შეძენილი იქნა კომერციული კომპანია Avanti Polar Lipids Inc.(Al-abaster/Al, USA). ბენზოკაინი ( სისუფთავე 98% , მოლეკულური მასა 165.19 ა.მ.ს) და პროპანოლი ( ჰიდროქლორიდულ ფორმაში სისუფთავე 99%, მოლეკულური მასა 295.80) შეძენილი იყო Sigma Aldrich-დან. ამ ნივთიერებების მოლეკულური სტრუქტურა, ასევე ამ მოლეკულების წითელ და მწვანე ფერებში გამოსახული ჰიდროფილური და ჰიდროფობური ჯგუფების გაბნევის განივკვეთის ფართობი მოცემულია ცხრილში 1.

მძიმე წყალი (სისუფთავე 99.8% , მოლეკულური მასა 20.0276) იქნა შეძენილი Armar chemicals (Leipzig, Germany), ვიყენებდით ყველა საკვლევი ნიმუშის მოსამზადებლად.

ქრომატოგრაფიული სისუფთავის 2-პროპანოლ (მოლეკულური მასა 60.10) და ტრიქლორმეთანი (მოლეკულური მასა 119.38) შექმნილი იყო Bachem (Budendorf, Switzerland). ყველა ქიმიური რეაგენტები, რომლებიც გამოვიყენეთ ექსპერიმენტში, გამოიყენებოდა იმ ფორმით, რა ფორმითაც მოწოდებული იყო კომერციული მწარმოებლებისგან.

ცხრილი 1 - გაბნევის განიკვეთის ფართობი, ნეიტრონულ გაბნევაში გამოყენებული წამლებისთვის და ფოსფოლიპიდისთვის. მონაცემები იქნა გამოყენებული რეფლექტიური მონაცემების ანალიზისთვის პარატის ალგორითმით. მოლეკულური მოცულობა იქნა მიახლოებით გამოთვლილი ჯგუფების კონტრიბუციის თეორიის გამოყენებით [24,25].

კომპონენტები	მოლეკულური სტრუქტურა	$10^6 \cdot \text{SLD}/\text{\AA}^{-2}$	
		ჰიდროფობური	ჰიდროფილური
SoyPC		0.376	0.950
Benzocaine		2.09	1.06
Propranolol		2.24	0.488

### 3.7.2. ნიმუშების მომზადება ნეიტრონ რეფლექტომეტრული და მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტისთვის

ყველა ნიმუში, რომელიც გამოყენებულია ნეიტრონ რეფლექტომეტრული და მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტისთვის, იქნა მომზადებული SoyPC -იზო-პროპანოლის სტანდარტული ხსნარიდან. ამ მიზნით განსაზღვრული რაოდენობის SoyPC გახსნილი იყო იზო-პროპანოლში ისე, რომ გახსნილ ნივთიერებასა და გამხსნელს შორის ყოფილიყო 2%-იანი ხსნარი, ამ პრინციპით საწყის ეტაპზე მომზადდა 15მლ ხსნარი. აღნიშნული ხსნარი ინჯღრეოდა მექანიკურად მანამ, ვიდრე არ მოხდა ფოსფოლიპიდის ბოლომდე გახსნა გამოყენებულ გამხსნელში. ამის შემდეგ იზო-პროპანოლის ხსნარში გახსნილი შესაბამისი კონცენტრაციის ბენზოკაინის ან პროპანოლის ხსნარი ემატებოდა თანდათანობით ჩვენს ძირითად ფოსფოლიპიდის შემცველ ხსნარს, ვიდრე არ მივიღებდით ერთფაზიან გამჭვირვალე ტრანსპარენტულ სისტემას.

თითოეული საკვლევი ნიმუშის ხსნარი დაიტანებოდა იდეალურად სუფთა Si ბლოკებზე. (Si ბლოკების პარამეტრები: ზედაპირის სიუხემე(roughness) 2 ანგსტრემი, მოცულობის პარამეტრები 1.5სმ, 2სმ, 5სმ). შეძენილ იქნა Andrea Holm GmbH (Tann, Gemrany): O- ფორმის მსგავსი ჩვენს მიერ გაკეთებული ხარაჩო საკვლევი ნიმუშებს აძლევდა საშუალებას რომ დარჩენილიყვნენ სილიკონ ბლოკის ზედაპირზე. სილიკონის ზედაპირის ვაცილებდით ბუმტებს, სილიკონზე დატანილი ხსნარი ორთქლდებოდა ოთახის ტემპერატურაზე კლებადი წნევის პირობებში (250 მილიბარი) 8სთ-ის განმავლობაში. სილიკონის ზედაპირზე მყოფი სითხისგან ბუმტების წარმოქმნის თავიდან ასაცილებლად თანდათანობით, ძალიან ფრთხილად ვამცირებდით წნევას. ამის შემდეგ ეს სისტემა რამოდენიმე, კერძოდ 16 სთ-ის განმავლობაში ყოვნდებოდა ძალიან დაბალ წნევაზე. შედეგად, სილიკონის ზედაპირიდან მთლიანად აორთქლდა გამხსნელი იზო-პროპანოლის ხსნარი და დარჩა ზედაპირზე ფოსფოლიპიდი-წამლის მაკროსკოპული ფენა 2მმ სისქის. ამ საფეხურის შემდეგ სილიკონის ბლოკი იქნა მოთავსებული ნიმუშის, ჩვენს მიერ შექმნილ სპეციალურ ჩარჩოში (იხ.სურათი 1), რომელშიც დაემატა მძიმე წყალი და საექსპერიმენტო ხელსაწყოზე ამ ფორმით იქნა ფიქსირებული და გაზომილი. ჩარჩო, რომელშიც მოვათავსეთ ნიმუში იყო აღჭურვილი ტრანსპარენტული მინით, რომელიც დამაგრებული იყო ჩარჩოს ზედა ნაწილში (სურათი 1). ტრანსპარენტული მინა გვამლევდა საშუალებას გვეკონტროლებინა ხომ არ ქონდა აირადი ბუმტების წარმოქმნას ადგილი წყლის დამატებისას სილიკონის ბლოკის ზედაპირზე. სილიკონის ბლოკის ვიზუალური კონტროლი გვამლევდა საშუალებას დავრწმუნებულიყავით, რომ სილიკონის ბლოკის ყველა აქტიური ნაწილი დეიტერიუმით დაიფარა. ექსპერიმენტის შემდეგ ძალიან ფრთხილად ვასუფთავებდით სილიკონის ბლოკს გაწმენდის სტანდარტული პროცედურით[122].

### **3.7.3. ნიმუშების მომზადება მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტისთვის**

მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაზნევისთვის ნიმუშები მზადდებოდა ძირითადი ხსნარიდან, რომელიც შეიცავს განსაზღვრული რაოდენობის ფოსფოლიპიდს და ქლოროფორმს. მომზადდა 1მგ/მლ კონცენტრაციის ფოსფოლიპიდის ხსნარი. მომზადებული ხსნარის გარკვეული ნაწილი გადატანილი იყო შესაბამის სინჯარებში. ამის პარალელურად მოვამზადეთ წამალი-ქლოროფორმის ხსნარი, რომელიც დავუმატეთ ფოსფოლიპიდ-ქლოროფორმის დედა ხსნარს ისეთი რაოდენობით, რომ მიგველო ჩვენთვის საინტერესო კონცენტრაციები წამალსა და ფოსფოლიპიდს შორის. წამლის შემცველი ქლოროფორმიანი ხსნარის და ფოსფოლიპიდის შემცველი ქლოროფორმიანი ხსნარის ერთმანეთში კარგად შერევის მიზნით, აღნიშნული ნარევი შევათბეთ 40°C-მდე და ძალიან მცირე

დროის მანძილზე დაახლოებით 5 წთ-ის განმავლობაში მოთავსდა სონიკატორში. ამის შემდეგ ფოსფოლიპიდის თხელი ფენა იქნა წარმოქმნილი. ყველა ნიმუშიდან ძალიან ფრთხილად იქნა ქლოროფორმი არგონის ნაკადით აორთქლებული, არგონი გამოიყენებოდა ლიპიდების ოქსიდაციის თავიდან აცილების მიზნით. ლიპიდების ფენა იქნა ჰიდრატირებული და ყველა მიღებული სუსპენზია იქნა სონიკატორში მოთავსებული. სონიკატორის შემდეგ ყოველი სუსპენზიიდან განსაზღვრული რაოდენობის მქონე ლიპიდები იქნა გატარებული პოლიკარბონის ფილტრში 100 ნმ ზომის ფორებით და ეს პროცედურა თითოეული ნიმუშისთვის მეორდებოდა 11-ჯერ. SoyPC-ის საბოლოო კონცენტრაცია ყველა ნიმუშისთვის იყო 5მმოლ/კგ, ხოლო წამლის კონცენტრაციები კი იცვლებოდა ჩვენი ინტერესიდან გამომდინარე.

### 3.7.4. ნეიტრონ რეფლექტომეტრი და მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტი

ნეიტრონ რეფლექტომეტრი და მცირე სიღრმეებზე მოქმედი ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტი იქნა ჩატარებული MARIA, N-REX, და TREFF ინსტრუმენტებზე Heinz Maier-Leibnitz (MLZ)-ის სამეცნიერო კვლევით რეაქტორზე Garching-ში, გერმანია. ნეიტრონ რეფლექტომეტრულ ექსპერიმენტში Si/წყალი ფაზათაშორისი ზედაპირიდან სპეკულარული არეკვლა R იზომებოდა, როგორც გაზნევის ვექტორის ფუნქცია  $Q_z$  მიმართული z კომპონენტისკენ, რომელიც მიმართულია ნიმუშის ფაზათაშორისი ზედაპირის (ინტერფეისის) პერპენდიკულარულად. სპეკულარულად არეკვლილი ნეიტრონები არის დამოკიდებული  $\rho(z)$ -სიდიდის ფურიე ტრანსპორტზე z მიმართულებით [123]:

$$(2.59) \quad R = \frac{16\pi^2}{Q_z^2} \left| \int \rho(z) \exp(iQ_z z) dz \right|^2 ,$$

სადაც  $\rho(z)$  გვამლევს ინფორმაციას Si/წყალი ფაზათაშორისი ზედაპირის (ინტერფეისის) ლოკალურ კომპოზიციაზე z მიმართულებით, რომელიც თავისთავად გვამლევს შესაძლებლობას რომ მივიღოთ ინფორმაცია ლიპიდური ორმაგი შრის მიკრო-სტრუქტურის შესახებ. გაზომილი არეკვლილი ანუ რეფლექტირებული კუთხე  $\theta_r$  ყოველთვის ნიმუშზე დაცემული გამოსხივების დაცემის კუთხის  $\theta_i$  ტოლია. რეფლექტივური ექსპერიმენტის მონაცემები არ შეიცავს რაიმე ინფორმაციას ნიმუშის ზედაპირის სიბრტყეზე მყოფი მოლეკულების სტრუქტურის შესახებ. მცირე სიღრმეებზე მოქმედი ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტში კი ინტენსივობა იზომება აგრეთვე იგივე მიმართულებით სადაც  $\theta_i \neq \theta_r$ , რომელიც იძლევა ინფორმაციას ნიმუშში შესაძლო ლატერალური კორელაციის შესახებ [124].

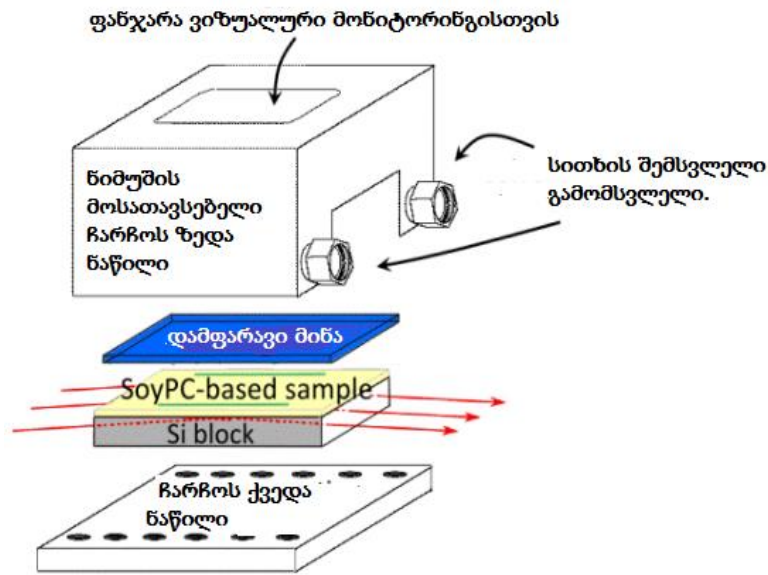


რეფლექტომეტრის ხელსაწყო MARIA-ზე [125] ტალღის სიგრძედ შერჩეულ იქნა  $\lambda=10\text{\AA}$  რეფლექტომეტრული ექსპერიმენტისთვის, ხოლო მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევისთვის ტალღის სიგრძე  $\lambda=5\text{\AA}$ . ელიპტიკურად(elliptically) მოღუნული ფოკუსირებული ნეიტრონების დერეფანი გვაძლევდა საშუალებას რომ ნიმუშისკენ მიმართული რადიაციის ზომა ყოფილიყო  $10\cdot 0.1\text{მ}^2$   $10\cdot 0.1\text{მ}^2$  ნიმუშსა და დეტექტორს შორის მანძილი იყო ფიქსირებული 1.91 მ-ზე. ინსტრუმენტის მზრუნავი მაგიდა იძლეოდა რადიაციის დაცემის კუთხის ცვლილების საშუალებას. ექსპერიმენტისას ინსტრუმენტის კონფიგურაციის ვარირება გვაძლევდა საშუალებას შეგვეგროვებინა რეფლექტომეტრული ექსპერიმენტის მონაცემები  $8\cdot 10^{-3} < Q_z/\text{\AA}^{-1} < 0.30$ , ხოლო მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევისას  $0 < Q_z/\text{\AA}^{-1} < 0.25$ ;  $-0.15 < Q_y/\text{\AA}^{-1} < 0.15$ . მცირე სიღრმეებზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევისთვის y არის z მიმართულების პერპენდიკულარული და დეტექტორის სიბრტყის პარალელურად მიმართული. იმის გათვალისწინებით, რომ ხელსაწყო MARIA-ზე ჩვენ გვაქვს ნეიტრონების დიდი ინტენსივობა და მცირე საბაზისო სიგნალი შესაძლებელია რეფლექტივური მონაცემების შედარებით მცირე დროში დეტექტირება, კერძოდ, ერთი ნიმუშისთვის 1 ან 1.5სთ არის საჭირო. მცირე სიღრმეებზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდში ექსპერიმენტები ტარდებოდა ძირითადად გაბნევის კრიტიკული კუთხის ქვემოთ  $\theta^{(c)}$  ჯამური შიდა რეფლექციის მისაღებად. ასეთ შემთხვევებში ადგილი ქონდა მიღევადი (ევანესცენტული) ტალღების ურთიერთქმედებას ნიმუშთან, რომელიც შესაძლებლობას იძლეოდა მიგველო ტალღების ქვედა სიღრმეზე ნიმუშის მთლიანი ზედაპირის შესახებ ინფორმაცია.

ხელსაწყოზე NREX გამოიყენებოდა ტალღის სიგრძე  $\lambda=4.28\text{\AA}$ , ხოლო ნიმუშისკენ მიმართული რადიაციის ზომა იყო  $60\cdot 40\text{მ}^2$ , ნეიტრონები დეტექტირდებოდა  $^3\text{He}$  დეტექტორით, რომელიც ნიმუშიდან დაშორებული იყო 2.46 მ მანძილზე [126].

ხელსაწყოზე TREFF [127] გამოყენებული ტალღის სიგრძე იყო  $\lambda=4.7\text{\AA}$ , სპეკულარული ინტენსივობა გროვდებოდა  $\theta/2\theta$  სკანირების მეთოდით. ნიმუშზე დაცემული რადიაციის ზომა გახლდათ  $0.4\cdot 60\text{მ}^2$ , ხოლო  $Q_z$  სიდიდის ცვლილების ინტერვალი  $9.1\cdot 10^{-4} < Q_z/\text{\AA}^{-1} < 0.25$ .

ყველა ექსპერიმენტი ტარდებოდა ოთახის ტემპერატურაზე, გამოყენებული იქნა ჩვენს მიერ შექმნილი სპეციალური ნიმუში ჩარჩო, რომელიც გამოსახულია სურათზე 1.



**სურათი 1.** ამ სურათზე ნაჩვენებია ჩვენს მიერ შექმნილი ნიმუშის მოსათავსებელი ჩარჩო, რომელიც გამოიყენებოდა ნეიტრონ რეფლექტივური და მცირე სიღრმეებზე მოქმედი ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტისას. სურათზე ნაჩვენებია ორი მწვანე ფერის ნაჭერი, რომელიც მდებარეობს სილიკონის ბლოკზე და წარმოადგენს კადმიუმის ნაჭრებს, ისინი იცავენ ფოსფოლიპიდებს რათა არ მოხდეს მათი შეხება დამფარავ მინასთან. სითხის შემსვლელი და გამომსვლელი ხვრელები გვაძლევს საშუალებას შევავსოთ სილიკონის ბლოკსა და დამფარავ მინას შორის ცარიელი ადგილი სითხით. ჩარჩოს ზედა ნაწილში მოთავსებული გამჭვირვალე მინა გვაძლევს დროის ნებისმიერ მომენტში ჩვენი ნიმუშის მონიტორინგის შესაძლებლობას, წითელი ისრები აღნიშნავს ექსპერიმენტისას გამოყენებული ნეიტრონების მიმართულებას.

### 3.7.5. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტი.

მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაზნევა ჩატარებული იქნა KWS1 და KWS3 დიფრაქტომეტრულ ინსტრუმენტებზე MLZ-ის კვლევით ინსტიტუტში ქალაქ გარჩინგში, გერმანია. დამატებითი ექსპერიმენტები იქნა ასევე ჩატარებული TPA რეფრაქტომეტრზე LLB-ის (Laboratori Leon brilloin) კვლევით რეაქტორზე, ქალაქ საკლიში, საფრანგეთი.

KWS1[128] ინსტრუმენტზე გამოყენებული ტალღის სიგრძე  $\lambda=5\text{\AA}$ , გამოყენებული დეტექტორი კი ორგანოზომილებიანი  $128 \times 128$  სცინტილატორი. ექსპერიმენტისას კი ჩვენ გამოვიყენეთ კოლიმინატორი-დეტექტორი-ნიმუშის რამოდენიმე კონფიგურაცია, კერძოდ საექსპერიმენტო მიზნებიდან გამომდინარე იცვლებოდა მანძილი კოლიმინატორ-დეტექტორ-ნიმუშს შორის. უფრო კონკრეტულად შემდეგი კონფიგურაცია იქნა გამოყენებული C8D2, C8D8 , C20D20 ( სადაც C-თი

გამოსახული არის კოლიმატორი, ხოლო D არის მანძილი ნიმუშიდან დეტექტორამდე). ეს კონფიგურაცია გვაძლევდა ნეიტრონების დეტექტირების საშუალებას ტალღური ვექტორის  $Q=4\pi/\lambda \sin\theta$  შემდეგ სიდიდეებზე  $0.0028\text{\AA}$  და  $0.40\text{\AA}^{-1}$ , სადაც  $\theta$  არის გაბნევის კუთხე. საანალიზო ნიმუში მოთავსებული იყო კვარცის სინჯარაში, რათა თავიდან აგვეცილებინა ნიმუშის აორთქლება, ხოლო ექსპერიმენტი გრძელდებოდა ვიდრე არ მივიღებდით 2მლნ დეტექტირებულ ნეიტრონების რაოდენობას საკვლევი ნიმუშიდან, რათა კარგი სტატისტიკის ექსპერიმენტული შედეგები მიგვეღო. გაბნევის ექსპერიმენტში მიღებული პირველადი მონაცემები იქნა კორექტირებული საბაზისო ხაზის(ფონი, ექსპერიმენტული სიგნალის ბეგრანდი) და ცარიელი კვარცის სინჯარის წვლილის გათვალისწინებით. ამ საფეხურის შემდეგ მიღებული მონაცემები რადიალურად გასაშუალოვდა. დეტექტორის ეფექტურობა შეფასდა პლექსიგლასის სტანდარტული ნიმუშით, რის შემდეგაც მიღებული გაბნევის განიკვეთის ფართობი გადაიყვანებოდა აბსოლუტურ სიდიდეებში [129].

KWS3 ინსტრუმენტზე გამოყენებული ტალღის სიგრძე იყო  $\lambda=12.8\text{\AA}$ , ნიმუშსა და დეტექტორს შორის მანძილი იყო ფიქსირებული 9.6 მ. KWS3 ინსტრუმენტი იყენებს ორმაგ ფოკუსირებულ მინებს, რათა ექსპერიმენტისას ტალღური ვექტორები იყოს მცირე სიდიდის, კერძოდ აღნიშნულ ინსტრუმენტზე შეგვიძლია  $6 \cdot 10^{-4}$  და  $1 \cdot 10^{-3}\text{\AA}^{-1}$  ტალღური ვექტორის მქონე ნეიტრონების დეტექტირება [130].

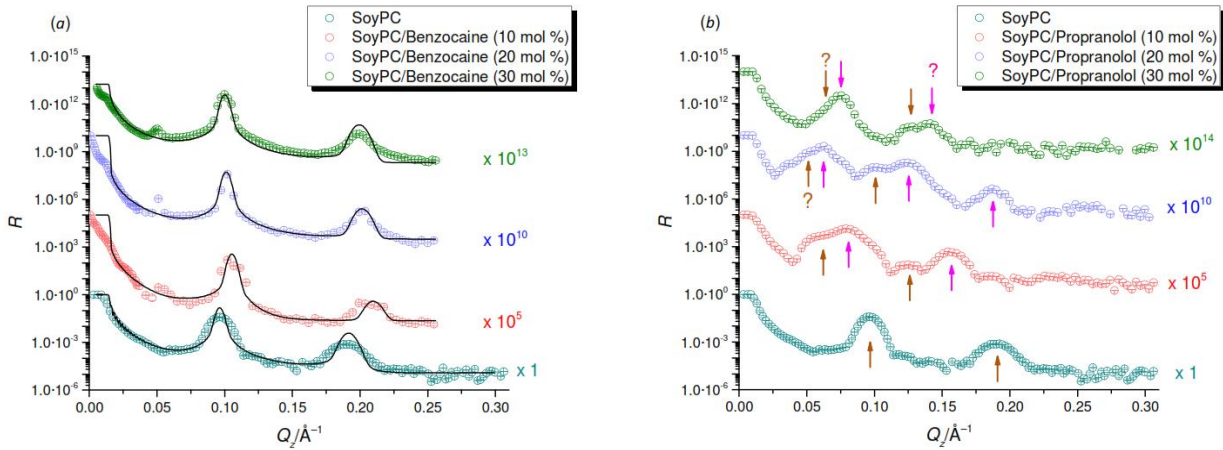
TPA ინსტრუმენტზე გამოყენებული ტალღის სიგრძე  $\lambda=12\text{\AA}$ , ინსტრუმენტის კოლიმინატორის სპეციფიური დიზაინი და მაღალი გარჩევითობის მქონე დეტექტორი, რომელიც ნიმუშიდან დაშორებული იყო 6.27მ მანძილზე გვაძლევს საშუალებას ნეიტრონები დეტექტირდეს  $4 \cdot 10^{-4} < Q/\text{\AA}^{-1} < 4.7 \cdot 10^{-3}$  სიდიდეებზე [131]. მიღებული მონაცემები კორექტირდა საბაზისო სიგნალის (ბეგრანდის)და ცარიელი კვარცის სინჯარის გაბნევის გათვალისწინებით. ამ საფეხურის შემდეგ მიღებული შედეგები რადიალურად გასაშუალოვდა და მონაცემები იქნა მისადაგებული KWS1 ინსტრუმენტზე მიღებულ შედეგებთან. ყველა ნიმუშის ანალიზი მიმდინარეობდა ოთახის ტემპერატურაზე.

### 3.7.6. შედეგები

ნეიტრონ რეფლექტომეტრზე მიღებული ექსპერიმენტული შედეგები წარმოდგენილია სურათზე 2(ა) და 2(ბ), კერძოდ, ფოსფოლიპიდი-ბეზოკაინი და ფოსფოლიპიდი-პროპანოლის ექსპერიმენტული შედეგები. მიღებული შედეგების გაანალიზება აჩვენებს, რომ ბეზოკაინმა და პროპანოლმა ფოსფოლიპიდებთან ურთიერთქმედების განსხვავებული ქცევა გამოავლინეს.

ფოსფოლიპიდებთან ბენზოკაინის ურთიერთქმედებისას ძალიან ნათლად დაიკვირვება ბრეგის ორ პიკი  $Q_z^{(1)}=0.1\text{\AA}^{-1}$  და  $Q_z^{(2)}=2 \cdot Q_z^{(1)}$ . აღნიშნული პიკები ასევე დამახასიათებელია ფოსფოლიპიდური სისტემისთვის ყოველგვარი ბენზოკაინის დანამატის გარეშე, ხოლო ფოსფოლიპიდზე ბენზოკაინის დამატებისას ხდება ბრეგის პიკის გადანაცვლება უფრო პატარა  $Q_z$  სიდიდეზე. სილიკონის ბლოკზე დატანის მეთოდის გათვალისწინება და ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული სპეციფიური მახასიათებელი ბრეგის პიკები გვაძლევს მკაფიო მინიშნებას, რომ ადგილი აქვს რამოდენიმე განმეორებადი ლიპიდური ორმაგი შრის მქონე ლამელარული სტრუქტურის ფორმირებას, სადაც ლიპიდური ორმაგი შრეები ერთმანეთისგან განცალკევებულია წყლის მოლეკულებით. აღნიშნული სურათის უფრო დაკვირვებით მონიტორინგისას ვნახავთ კიდევ ორ მკაფიო ინფორმაციულ სიგნალს: ა) მცირე ინტენსივობის რეფლექციის პიკი  $Q_z^{(1/2)}=0.05\text{\AA}^{-1}$ ; ბ) ერთდროულად ორი კრიტიკული კუთხის არსებობა განსხვავებული დახრის სიდიდეებით, რომელთაგან პირველი კრიტიკული კუთხე ძალიან მცირე სიდიდისაა  $Q_z^{(cr1)}=0.002\text{\AA}^{-1}$ , ხოლო მეორე კრიტიკული კუთხე მდებარეობს  $Q_z^{(cr2)}=0.012\text{\AA}^{-1}$ . აღნიშნული ორი კრიტიკული კუთხის მახასიათებელი პიკები მოჩანს სისტემაში მხოლოდ ბენზოკაინის არსებობისას. როდესაც გვაქვს მხოლოდ ფოსფოლიპიდი მსგავსი პიკები ექსპერიმენტის შედეგად არ დეტექტირდება.

**სურათი 2:** ნეიტრონ რეფლექტივური ანალიზის შედეგები ა) ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინი წყალში ბ) ფოსფოლიპიდი-პროპანონოლი წყალში. იმისთვის რომ პიკები ვიზუალურად კარგად გამოგვესახა მიღებული ექსპერიმენტული შედეგები იქნა გამრავლებული მაშტაბის ფაქტორზე, რომელთა რიცხვითი მნიშვნელობები მითითებულია. (ა) დიაგრამაზე პიკები მიღებულია ექსპერიმენტული მონაცემების პარადის ალგორითმით ანალიზისას, რომლის ტექტიკა და ძირითადი პრინციპები ტექსტშია მოცემული. (ბ) დიაგრამაზე ბრეგის პიკები სხვადასხვა ფერის ისრებით არის მითითებული. ერთი და იგივე ფერების ისრებით გამოსახული ბრეგის პიკები ერთმანეთთან არიან დაკავშირებული გარკვეული კანონზომიერებით, რაც მოცემულია ტექსტში.

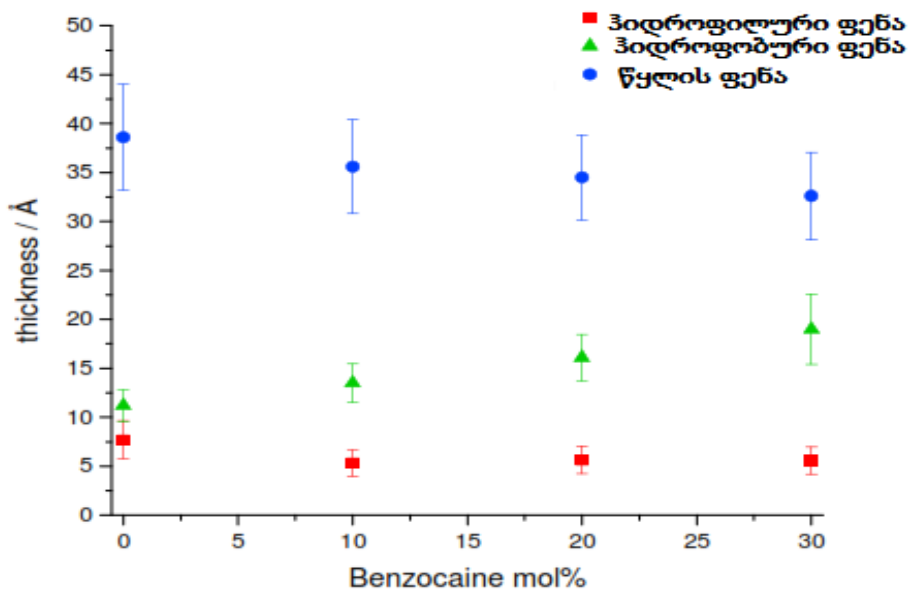


ექსპერიმენტული შედეგები გაანალიზებულია (Parratt formalism) პარადის ფორმალიზმის გამოყენებით, რომელიც გვამძლევს საშუალებას რომ გარკვეული რაოდენობის ფენებად ჩალაგებული ორმაგი ლიპიდური შრის z მიმართულებიდან გამოვსახოთ გაბნევის განივკვეთის ფართობის განაწილება [132]. ამ მეთოდში სილიკონი იყო მოდელირებული, როგორც უსასრულოდ თხელი ფენის მქონე ბრტყელი ზედაპირის მქონე სუბსტრატი, რომელიც დაფარული იყო ასევე თხელი სილიციუმის ოქსიდის თხელი ფენით SiO<sub>2</sub> [133]. პარადის მეთოდი იყენებს გარდამავალ მატრიცას თითოეული ფენისთვის, რომელიც გვამძლევს კორელაციის საშუალებას z მიმართულებით ერთ კონკრეტულ ფენაზე ნეიტრონების ტალღის ამპლიტუდასა და წინა ფენის ქცევას შორის ანუ ერთ კონკრეტულ ფენაზე დაცემული ნეიტრონების ტალღის ამპლიტუდა იძლევა ინფორმაციას მის წინ არსებული ფენის ქცევის შესახებ [134]. მატრიცების სერია ახდენს კვადრატების ჯამის მინიმიზებას, რომელიც იქნა ფიქსირებული როგორც ექსპერიმენტულ და თეორიულ რეფლექტივურ შედეგებს შორის სხვაობა ისეთი პარამეტრების ანალიზისას, როგორიცაა ლიპიდური ორმაგი შრის მახასიათებელი სისქე, გაბნევის განივკვეთის ფართობი, გამხსნელის მოცულობითი წილი, სხვადასხვა ფენების ფაზათაშორისი სიხისტე. ეს პარამეტრები იმპლიმენტირებულია MOTOFIT კომპიუტერულ პროგრამაში [135]. ყველა ზემოთ აღნიშნული პარამეტრების ვარირებას ვახდენდით ვიდრე მივიღებდით საუკეთესო თანხვედრას თეორიულ მოდელსა და ჩვენ ექსპერიმენტულ შედეგებს შორის. მიღებული მონაცემები გამოსახულია დიაგრამაზე 3.

რეფლექტომეტრის ექსპერიმენტული მონაცემები, რომლებიც მიღებული იქნა ფოსფოლიპიდი-პროპანონოლის სისტემიდან იძლევა უფრო რთულ სურათს ვიდრე ეს იყო ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის სისტემიდან. ფოსფოლიპიდი-პროპანონოლის სისტემიდან მიღებული რეფლექტივური მონაცემების ანალიზისას დაიკვირვება რამოდენიმე რეფლექტიური, ამასთან აღნიშნული პიკები განიერია, მაგრამ რეფლექტიური პიკების პოზიცია ისევ არის ლამელარული

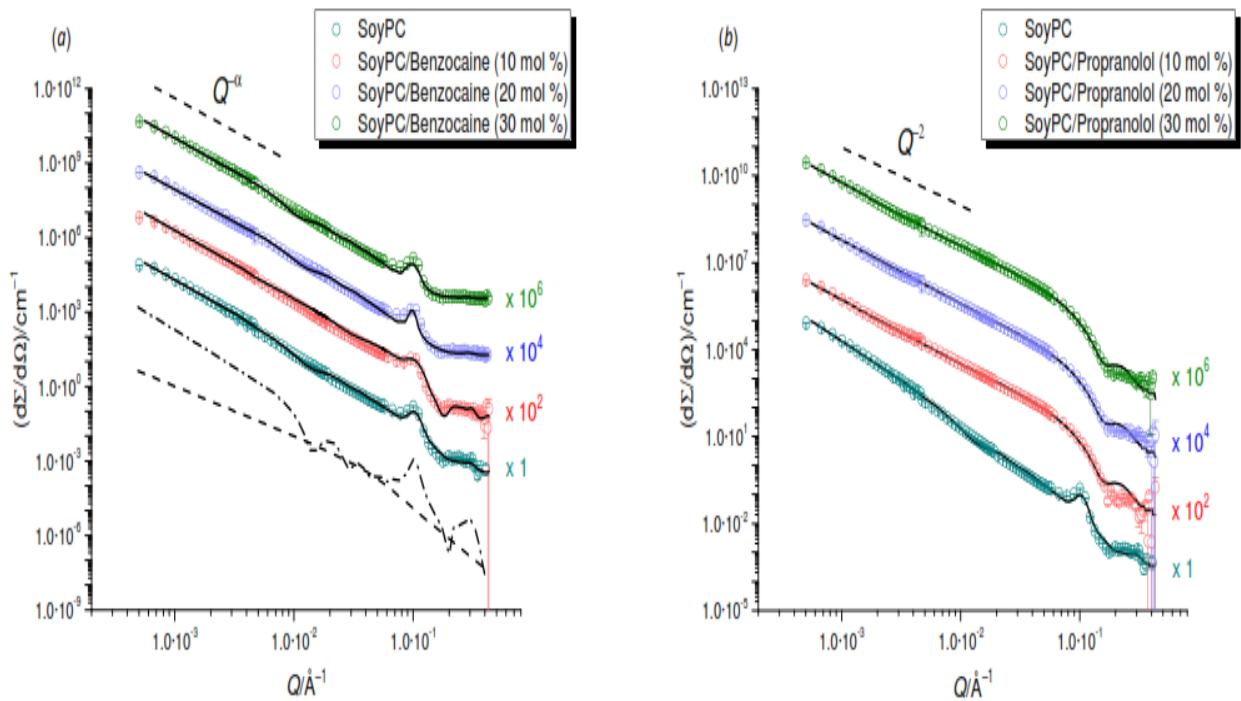
სტრუქტურისთვის დამახასიათებელ სპეციფიურ ადგილას განსხვავებით ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემისაგან. პროპანოლი-ფოსფოლიპიდის სისტემის ანალიზისას რეფლექტივური პიკების ერთმანეთთან ზედდება ხდება და მათი ფორმა არის უფრო განიერი, ვიდრე ეს იყო ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემის ანალიზისას. ეს სურათი ნათლად ჩანს 10% შემცველობის პროპანოლი-ფოსფოლიპიდის სისტემიდან. ყველაზე ინტენსიური რეფლექტიური პიკი მდებარეობს  $Q_z^{(1a)} = 0.0790 \text{ \AA}^{-1}$  ხოლო მისი კორელაციური პიკი  $Q_z^{(2a)} = 0.158 \text{ \AA}^{-1}$  და  $Q_z^{(3a)} = 0.235 \text{ \AA}^{-1}$  ( ბოლო მესამე ლატერალური პიკი არის ძალიან მცირე ინტენსივობის). ამ პიკების გარდა ნათლად ჩანს სხვა დამატებითი პიკები კერძოდ  $Q_z^{(1b)} = 0.0618 \text{ \AA}^{-1}$  პოზიციაზე ფიქსირებული პიკი, რომელიც ნიღბავს  $Q_z^{(1a)}$  ბრევის პიკის პოზიციას. მეორე დამატებითი პიკი კორელირებს პირველ დამატებით პიკთან და მისი პოზიცია ფიქსირებულია  $Q_z^{(2b)} = 0.124 \text{ \AA}^{-1}$  აქვე არის მესამე ლატერალური პიკი  $Q_z^{(3b)} = 0.186 \text{ \AA}^{-1}$ , მაგრამ მისი ინტენსივობა ამჯერადაც ძალიან დაბალია. ამ მოცემულობის და ამ სურათის რეფლექტივური მონაცემები გვაძლევს მკაფიო სიგნალს, რომ საქმე გვაქვს კომპლექსური სტრუქტურების ერთმანეთთან გადაფარვასთან, რომელთა ანალიზი და დახასიათება მარტივის რაოდენობრივი გათვლებით მიზანშეწონილი არ არის.

**სურათი 3.** პარადის ალგორითმის ანალიზის საფუძველზე მიღებული ორმაგი ლიპიდური შრის სისქეები ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის შემცველი სისტემისთვის.



როგორც დასაწყისში ავღნიშნეთ ჩვენი მიზანი იყო რომ შეგვესწავლა წამლების მოქმედების პრინციპი მოდეულურ უჯრედულ მემბრანაზე. სწორედ ამ მიზნით ჩვენ შემდეგი ექსპერიმენტი ჩავატარეთ მცირე კუთხეების ნეიტრონულ გაბნევის

ინსტრუმენტზე. დიაგრამებზე 4 და 5 მოცემულია მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული შედეგები, რომლებიც მიღებული იქნა ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდი და პროპანოლი-ფოსფოლიპიდის სისტემიდან. ეს სისტემები მომზადებული იქნა, როგორც სონიკატორის დახმარებით ასევე მათი სპეციფიურ ფილტრებში გატარების გზით. მსგავსად რეფლექტივური მონაცემებისა მცირე კუთხეების ნეიტრონულ ექსპერიმენტშიც ნათლად ჩანს სხვაობა ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდი სისტემის გაბნევის გადაკვეთის წერტილსა და პროპანოლი-ფოსფოლიპიდი სისტემის გაბნევის გადაკვეთის წერტილს შორის.



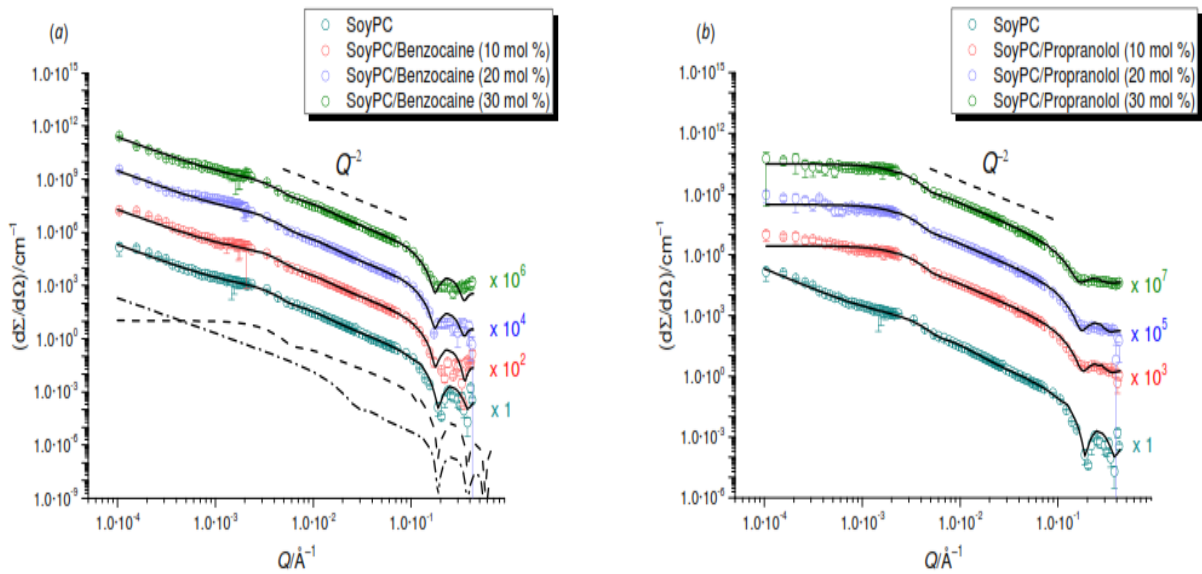
**გრაფიკი 4:** წარმოდგენილია გაბნევის გადაკვეთის წერტილები რომლებიც მიღებული იქნა ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინი(a) და ფოსფოლიპიდი-პროპანოლი(b) სისტემებიდან, ნიმუშების სუსპენზიები წყალში მომზადებული იქნა ულტრაბგერითი დამუშავების მეთოდით. კარგი ვიზუალიზაციისთვის, ექსპერიმენტული შედეგები იქნა გამრავლებული მუდმივაზე, რომელთა რიცხვითი მნიშვნელობა მოცემულია დიაგრამაზე. დიაგრამაზე (a) გამოსახულია მულტილამერალური სტრუქტურებისთვის დამახასიათებელი სურათი, ხოლო დიაგრამაზე (b) კი გამოსახულია უნილამერალური სტრუქტურებისთვის დამახასიათებელი სურათი.

ულტრაბგერით დამუშავებული ფოსფოლიპიდ-ბენზოკაინის სისტემამ ისევე როგორც ფოსფოლიპიდმა (ფოსფოლიპიდი ყოველგვარი დანამატის გარეშე) მოგვცა ძალიან ვიწრო პიკი, რომელიც მდებარეობს  $Q = 0.1 \text{ \AA}^{-1}$  ეს პიკი ასევე დაიკვირვებარეფლექტიურ ექსპერიმენტისას. მცირე სიდიდის  $Q$  უბანში გაბნევის განიკვეთის ფართობსა ზომასა და  $Q$  სიდიდეს შორის ფუნქციური კავშირი

გამოსახულია შემდეგნაირად  $(d\Sigma/d\Omega)\propto Q^{-\alpha}$ , სადაც  $\alpha$  არის წრფის დახრის სიდიდე რომელიც მდებარეობს 2-დან 4-მდე ინტერვალში. პროპანონოლის შემთხვევაში მცირე სიდიდის  $Q$  უბანში გაბნევის განიკვეთის ფართობის ზომასა და  $Q$  სიდიდეს შორის ფუნქციური კავშირი გამოსახულია შემდეგნაირად  $(d\Sigma/d\Omega)\propto Q^{-2}$ . ყველა შემთხვევაში გუნიერის რეჟიმი არ იქნა ფიქსირებული  $Q$  სიდიდის იმ ინტერვალში, რომელიც გამოყენებული იყო ჩვენი საკვლევი ნიმუშების ანალიზისას, როგორც მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ინსტრუმენტზე, ასევე ულტრა მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ინსტრუმენტზე (KWS3). ეს შედეგები მიღებული იქნა იმ ნიმუშებიდან, რომლებიც მომზადებული იყვნენ ხანმოკლე სონიფიკაციის პირობებში, მარტივი ვიზუალური კონტროლით ადვილი შესამჩნევი იყო, რომ ეს ნიმუშები ოპალესცირებენ ანუ შეიცავენ აგრეგატებს, რომელთა ზომა სინათლის ხილულ უბანზე (500 ნმ) უფრო დიდი იყო. ამასთან ადვილი შესამჩნევი იყო ის, რომ პროპანონოლის შემცველი ნიმუში ოპალესცირებდა უფრო ნაკლებად, ვიდრე ბენზოკაინის შემცველი ნიმუში. ეს დამახასიათებელია ჩვენი თითოეული საკვლევი ნიმუშებისთვის, რომლებიც შეიცავდნენ ლიპოსომებს. ბრეგის პიკის არსებობა და ფუნქციური კავშირი გაბნევის განიკვეთის ფართობსა და  $Q$  სიდიდეს შორის, სადაც წრფის დახრის სიდიდე მდებარეობს  $2 < \alpha < 4$  ინტერვალში, არის ნათელი დასტური იმისა, რომ საქმე გვაქვს მულტილამელარულ სტრუქტურასთან, პროპანონოლის შემთხვევაში კი დახრის სიდიდე მიახლოებით არის ორის ტოლი რომელიც ადასტურებს უნილამელური სტრუქტურის ფორმირებას. ყველა შემთხვევაში მცირე სიდიდის  $Q$  უბანში ფიქსირებული დახრის სიდიდე არის ლამელარული სტრუქტურებისთვის დამახასიათებელი სიდიდეების ინტერვალში [136].

**გრაფიკი 5:** გაბნევის გადაკვეთის წერტილი მიღებული ფოროვან ფილტრებში გატარების გზით მომზადებული ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინი (a) და ფოსფოლიპიდი-პროპანონოლი (b) ნიმუშებიდან. შედეგების ვიზუალიზაციისთვის ისინი გამრავლებული იქნა მუდმივაზე, რომელთა რიცხვითი მნიშვნელობა მოცემულია დიაგრამაზე. დიაგრამაზე (a) გამოსახულია გაბნევის გადაკვეთის წერტილები, მიღებული როგორც უნილამელა (წყვეტილი ხაზით მითითებული უბანი), ასევე მულტილამელა (წერტილოვანი ხაზით მითითებული  $Q$ -ს მცირე სიდიდის უბანი) სტრუქტურების წვლილით.





მულტილამელარული ლიპოსომებიდან წარმოქმნილი ნეიტრონული გაბნევის პროცესი შეიძლება ავლწეროთ იმ დაშვებით, რომ ლიპოსომები წარმოადგენენ ქაოტურად ორიენტირებულ ლამელარული ფენების ანსამბლს, ჩვენ ვუგულებელვყოფთ ლამელარული სტრუქტურების მოღუნვის სიდიდეს, რადგან ექსპერიმენტისას არ იქნა ფიქსირებული გუნეირის პიკი. ასეთი სისტემებისთვის, რომლებიც შეიცავენ ქაოტური ორიენტაციის ლიპოსომების რამოდენიმე ფენას, თეორიული გაბნევის განიკვეთის ფართობი შეიძლება გამოვთვალოთ კოტლარჩუკის და რიტცაუს ფორმულის საშუალებით (Kotlarchuk and Ritzau) [41] .

$$(2.60) \quad \frac{d\Sigma}{d\Omega} \Big|_{mlv} = n_s \cdot N \cdot v^2 \cdot \Delta\rho \cdot \frac{\langle |f(Q)|^2 \rangle}{Q^2} \left[ 1 + \frac{\langle f(Q) \rangle^2}{\langle |f(Q)|^2 \rangle} (S(Q) - 1) \right]$$

სადაც  $v$  წარმოადგენს ლამელარული ფენის მოცულობას,  $\Delta\rho$  წარმოადგენს კონტრასტს ლიპიდურ ორმაგ შრესა და გამხსნელს შორის,  $f(Q)$  არის ფორმ-ფაქტორი ერთი ინდივიდუალური ლიპიდური ორმაგი შრისთვის, სადაც  $f(Q) = \sin(Q \cdot \tau / 2) / (Q \cdot \tau / 2)$   $S(Q)$  წარმოადგენს სტრუქტურის ფაქტორს, რომელიც კომპლექსური გზით დაკავშირებულია ლიპიდური ორმაგი შრის გეომეტრიულ პარამეტრებთან, კერძოდ  $\tau$  სიდიდეზე, რომელიც წარმოადგენს ლიპიდური ორმაგი შრის სისქეს, და ასევე დაკავშირებულია  $d$  სიდიდეზე, რომელიც გვიჩვენებს, თუ რა მანძილით არიან ერთმანეთისგან დაშორებული მულტილამელარულ სისტემაში ლამელარული სტრუქტურის მქონე ლიპიდური ორმაგი შრეები. ორივე  $\tau$  და  $d$  სიდიდეები არის პოლიდისპერსიული. სადაც გვაქვს შესაძლებლობა, რომ  $\tau$  სიდიდის პოლიდისპერსულობის ინდექსის გამოსახვისთვის  $i$ - გამოვიყენოთ შულცი-ზიმის განაწილების (Schulz-Zimm დისტრიბუციის) ფუნქცია, ხოლო  $d$  სიდიდის პოლიდისპერსულობის ინდექსის გამოსახვისთვის გაუსის განაწილების ფუნქცია თავისი სტანდარტული გადახრის

კოეფიციენტით  $\sigma_a$ . ჩვენს შემთხვევაში გამოთვლილია ჰოსმანის ფაქტორი  $\sigma_a/d$ . ფორმულა 2.60-ში გამოსახული  $\langle \rangle$  წარმოადგენს ლამელარული ფენების სისქის განაწილების გასაშუალოებულ სიდიდეს, აგრეთვე ამ ფრჩხილებით გამოსახულია მანძილის განაწილების გასაშუალოებული სიდიდე (მანძილში იგულისხმება ლამელარულ სტრუქტურებს შორის მანძილი მულტილამელურ სისტემაში)[137].

უნილამელარული სტრუქტურებიდან მიღებული ნეიტრონული გაბნევა შეგვიძლია გამოვსახოთ მარტივი ფორმ-ფაქტორის ფორმულით:

$$(2.61) \quad \frac{d\Sigma}{d\Omega}|_{ulv} = n_s \cdot v^2 \cdot \Delta^2 \rho \cdot \frac{\langle |f(Q)|^2 \rangle}{Q^2}$$

ექსპერიმენტული მონაცემების ანალიზისას აღმოჩნდა, რომ ბენზოკაინი-ფოსფორიპიდი სისტემის დასახასიათებლად ყველაზე კარგი მოდელია შერეული მოდელი, რომელშიც ერთდროულად წარმოდგენილია მულტილამელარული და მცირე რაოდენობით უნილამელარული სისტემები. სწორედ ამ მიზნით ფორმულა 2.60 და ფორმულა 2.61 გავაერთიანეთ. პროპანოლი-ფოსფორიპიდი სისტემისთვის კი ყველაზე კარგი მოდელი არის უნილამელარული მოდელი, რომელიც ფორმულა 2.78-ით გამოვსახეთ. ექსპერიმენტული მონაცემების ანალიზისას თითოეულ სისტემას დავამატეთ არაკოჰერენტული გაბნევის კონსტანტა  $(\frac{d\Sigma}{d\Omega})_{incoh}$ , რათა დაგვეფიქსირებინა სისტემაში არსებული წყალბად-ატომის გაბნევის განაწილება. ექსპერიმენტული მონაცემების ანალიზისას მიღებული შედეგები წარმოდგენილია ცხრილში 2.

**ცხრილი 2:** სონიფიკატორის (სონიკატორის) დახმარებით მომზადებული ბენზოკაინი-ფოსფორიპიდი და პროპანოლი-ფოსფორიპიდი სისტემის სტრუქტურული პარამეტრები მიღებული მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით.  $\alpha$  არის დახრის სიდიდე, რომელიც მიღებულია ექსპერიმენტისას გამოყენებული ტალღური ვექტორის შემდეგ უბანში  $4 \cdot 10^{-4} < Q/\text{\AA}^{-1} < 1 \cdot 10^{-2}$ . N არის მულტილამელურ სისტემაში განმეორებადი ლამელარული სტრუქტურების რაოდენობა,  $\tau$  არის ორმაგი ლიპიდური შრის საშუალო სისქე,  $i_r$  არის პოლიდისპერსიულობის ინდექსი, d არის ლამელებს შორის მანძილი, აქვეა მოცემული ჰოსმანის ფაქტორი.

ნიმუში	$\alpha$	$N$	$\frac{\tau}{\text{Å}}$	$i_r$	$\frac{d}{\text{Å}}$	$\frac{\sigma_d}{d}$
SoyPC	2.76±0.04	7.3±0.4	31.5±2.5	1.16±0.08	60.9±1.4	0.11±0.04
SoyPC/Benzocaine (10 mol %)	2.64±0.03	8.1±0.3	31.8±2.9	1.12±0.07	61.5±1.2	0.10±0.03
SoyPC/Benzocaine (20 mol %)	2.76±0.04	7.5±0.3	32.0±2.7	1.22±0.12	63.1±1.5	0.10±0.03
SoyPC/Benzocaine (30 mol %)	2.72±0.04	8.4±0.3	32.2±2.8	1.15±0.09	62.9±1.7	0.11±0.03
SoyPC/Propranolol (10 mol %)	2.04±0.04		41.3±1.2	1.06±0.05		
SoyPC/ Propranolol (20 mol %)	2.08±0.05		40.8±0.6	1.09±0.07		
SoyPC/ Propranolol (30 mol %)	1.97±0.04		40.8±0.4	1.11±0.07		

თუ შევადარებთ ერთმანეთს ორი სხვადასხვა გზით მომზადებული ნიმუშების ექსპერიმენტულ შედეგებს, შევნიშნავთ მკვეთრ განსხვავებას.

კერძოდ, ნიმუშების მოსამზადებლად ჩვენ ორ სხვადასხვა ფორმას მივმართეთ: პირველი- ნიმუშების მომზადება სონიკატორის დახმარებით, მეორე - ნიმუშების სპეციალურ ფილტრში გატარება. სპეციალურ ფოროვან ფილტრებში გატარების გზით მომზადებული ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემა საშუალო და მაღალი  $Q$  უბანში უნილამელარული სტრუქტურებისთვის დამახასიათებელ ექსპერიმენტულ შედეგებს იძლევა  $d \Sigma/d\Omega \propto Q^{-2}$ , როდესაც  $5 \cdot 10^{-3} < Q/\text{Å}^{-1} < 7 \cdot 10^{-2}$  ძალიან მსგავსია სურათის, რომელიც მივიღეთ სონიკატორის გამოყენებით მომზადებული პროპანოლი-ფოსფოლიპიდის სისტემიდან. მაგრამ საბოლოოდ მცირე სიდიდის  $Q$  უბანში ექსპერიმენტული შედეგების ანალიზმა გვიჩვენა, რომ ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემა ასევე შეიცავს მულტილამელარულ ნაწილს თავიანთი მოლეკულის გარკვეულ უბანში.

აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ფოროვან ფილტრებში გატარების გზით მომზადებულმა პროპანოლი-ფოსფოლიპიდის სისტემამ მოგვცა ძალიან მკაფიო უნილამელარული სტრუქტურა განსხვავებული იმ უნილამელარული სტრუქტურისგან, რომელიც ჩვენ ვნახეთ ამ სისტემის სონიფიკატორისგან გატარების გზით მომზადების შემთხვევაში. უნილამელარული სტრუქტურა ფოროვან ფილტრებში გატარების გზით მომზადებული პროპანოლი-ფოსფოლიპიდი სტრუქტურისთვის არის გაცილებით უფრო მკაფიო და უფრო მცირე სიდიდის, რის შედეგადაც უკვე სისტემა გვაძლევს გუნიერის პიკს  $Q$ -ს შემდეგ უბანში  $Q < 2 \cdot 10^{-3} \text{Å}^{-1}$ . ექსპერიმენტული ფოროვან ფილტრებში გატარების გზით მომზადებული ნიმუშების ექსპერიმენტული მონაცემების საბოლოო შედეგები წარმოდგენილია ცხრილში 3.

**ცხრილი 3:** სტრუქტურული პარამეტრები ფოროვან მემბრანაში გატარების გზით მომზადებული ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდი და პროპანოლი-ფოსფოლიპიდი

სისტემისთვის, მიღებული მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, სადაც  $R_{cor}$  არის უნილამელა ლიპოსომის წყლის წვეთის რადიუსი მის პოლიდისპერსიულობის ხარისხთან ერთად  $i_{R_{cor}}$ ,  $\tau$  არის ლიპიდური ორმაგი შრის სისქე,  $N$  არის მულტილამერალურ სისტემაში განმეორებადი ლამელარული სტრუქტურების რაოდენობა,  $d$  არის მანძილი ორ ლამელას შორის, და ბოლოს გვაქვს ჰოფმანის კოეფიციენტი.

ნიმუში	$\frac{R_{core}}{\text{Å}}$	$i_{R_{core}}$	$\frac{\tau}{\text{Å}}$	$N$	$\frac{d}{\text{Å}}$	$\frac{\sigma_d}{d}$
SoyPC	407±6	1.09±0.05	33±1.2	6±2	62.1	0.10
SoyPC/Benzocaine (10 mol %)	398±6	1.09±0.06	35.9±1.5	4.4±1.5	62.1	0.10
SoyPC/Benzocaine (20 mol %)	395±7	1.09±0.05	36.3±1.4	3.5±1.5	62.1	0.10
SoyPC/Benzocaine (30 mol %)	408±6	1.09±0.04	36.3±1.5	3.5±1.7	62.1	0.10
SoyPC/Propranolol (10 mol %)	471±7	1.12±0.05	36±1.8			
SoyPC/ Propranolol (20 mol %)	521±7	1.10±0.05	37.0±1.9			
SoyPC/ Propranolol (30 mol %)	529±7	1.09±0.04	35±2			

ამ სისტემის რაოდენობრივი ანალიზი ძალიან ბევრ ასპექტში სონიკატორით მომზადებული ნიმუშის ანალიზის მსგავსია, ძირითადი განსხვავება იკვეთება უნილამელარული სტრუქტურიდან წარმოქმნილი გაბნევის დახასიათებისას. ამ მიზნით ჩვენ ძირითად ფორმულას დავამატეთ ცარიელი სფეროს ფორმ-ფაქტორი (პოლიდისპერსული წყლის წვეთებით). ჩვენი მოდელის მოდიფიცირება განაპირობა გუნდის პიკის არსებობამ, რომელიც მომდინარეობს უნილამელარული სტრუქტურიდან ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდი (სონიფიკატორით მომზადებული ნიმუშიდან გაბნევას განაპირობებდა მულტილამერალური სტრუქტურა) და პროპანოლი-ფოსფოლიპიდი ნიმუშებიდან Q-ს ძალიან მცირე უბანში.

### 3.7.7. შედეგების განსჯა

წარმოდგენილი სამუშაოს ძირითადი მიზანი სხვადასხვა სამკურნალო საშუალებების ურთიერთქმედების გავლენის შესწავლა უჯრედული მემბრანის სტრუქტურაზე გამიზნული იყო დაგვედინა ამ ზეგავლენასა და წამლის სტრუქტურას შორის გარკვეული კორელაციები. ზოგადად რომ ვთქვათ, ლიპიდურ ორმაგი შრის სტრუქტურული პარამეტრების ცვლილებები შეიძლება განპირობებული იყოს მასზე მოქმედი წამლის მოლეკულის ჰიდროფობურ-ლიპოფობური ბალანსით, მოლეკულის გეომეტრიით და ზომით, აგრეთვე განზიდვის და მიზიდვის ძალების (ელექტროსტატიკური) ურთიერთქმედებით,

რომელიც წარმოიქმნება წამალსა და ფოსფოლიპიდს შორის ურთიერთქმედებისას. თითოეული ეს გვერდითი ეფექტი გარკვეული კომპლექსური გზით გავლენას ახდენს ფოსფოლიპიდის ჩალაგების პარამეტრზე. ამ მიზნით მიზანშეწონილი იქნება თუ ამ ცვლილებების ასახსნელად გამოვიყენებთ ისრაელაშვილის, მიტჩელის (Mitchell) და ნიჰამის(Niham) მიერ შემოთავაზებულ თეორიას ჩალაგების პარამეტრის შესახებ, რომელიც გვაძლევს საშუალებას ვიწინასწარმეტყველოთ თუ როგორი ფორმით წარიმართება ზან-ების თვითაგრეგაციის პროცესი [138]. ჩალაგების ფაქტორი შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგი ფორმულით:

$$(2.62) \quad N_s = \frac{v}{l \cdot a_0}$$

სადაც  $v$  არის ზან-ის მოლეკულის ჰიდროფობური ნაწილის მოცულობა,  $l$  არის ზან-ის მოლეკულის ჰიდროფობური ჯაჭვის სიგრძე, ხოლო  $a_0$  აგრეგირებული მოლეკულების ზედაპირის საშუალო ფართობი. ნაგარიანი (Nagarjan) აღნიშნავს, რომ  $a_0$  სიდიდე არ უნდა ინტერპრეტირდებოდეს მხოლოდ ზან-ის მარტივი გეომეტრიული მახასიათებლებით ( იგულისხმება ჰიდროფილური თავების ზომა და ფორმა), არამედ მისი ინტერპრეტირებისას უნდა გავითვალისწინოთ ასევე თერმოდინამიკური სიდიდეები, რომლებიც გამომდინარეობს სისტემის მინიმალური თავისუფალი ენერგიიდან [139]. (მიმდინარე ანალიზისას ფოსფოლიპიდის ჰიდროფილური ნაწილი არის თხევად-კრისტალურ ფაზაში, რადგან გელი-მყარი ფაზის ფაზური გადასვლის ტემპერატურა ბევრად უფრო მაღალია  $<-50^{\circ}\text{C}$ , ვიდრე ოთახის ტემპერატურა.)

რაოდენობრივი ანალიზი მემბრანის სტრუქტურულ მახასიათებლებზე იქნა განხორციელებული ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის სისტემისთვის. როგორც ექსპერიმენტული მონაცემებიდან ჩანს, ფოსფოლიპიდი სილიკონის ბლოკზე განლაგებულია გარკვეული რაოდენობის ფენების სახით, სადაც ეს ლიპიდური ორმაგი შრის განმეორებადი ფენები ერთმანეთისგან განცალკევებულია წყლის მოლეკულით. ზოგიერთ შემთხვევაში განმეორებადად რამოდენიმე ფენებად განლაგებულ ლიპიდურ ორმაგ შრეებს უჩნდებათ დეფექტები ხვრელების სახით, რომლიდანაც წყლის მოლეკულის თხელი ფენა ( $15\text{\AA}$ ) პირდაპირ ურთიერთქმედებს სილიკონის ბლოკის ზედაპირზე, სწორედ ეს მიდგომა გამოიყენება ერთდროულად ორი კრიტიკული კუთხის არსებობის ინტერპრეტირებისას. ყველა შემთხვევაში ფაზათამორისი ზედაპირის სიხისტე მერყეობდა 2-დან  $7\text{\AA}$ -მდე. მემბრანის ჰიდროფილური და ჰიდროფობური ჯგუფების მახასიათებლები, ასევე წყლის მოლეკულის ფენის სისქის მახასიათებლები სხვადასხვა კონცენტრაციის წამლების გამოყენებისას მოცემულია სურათზე 3.

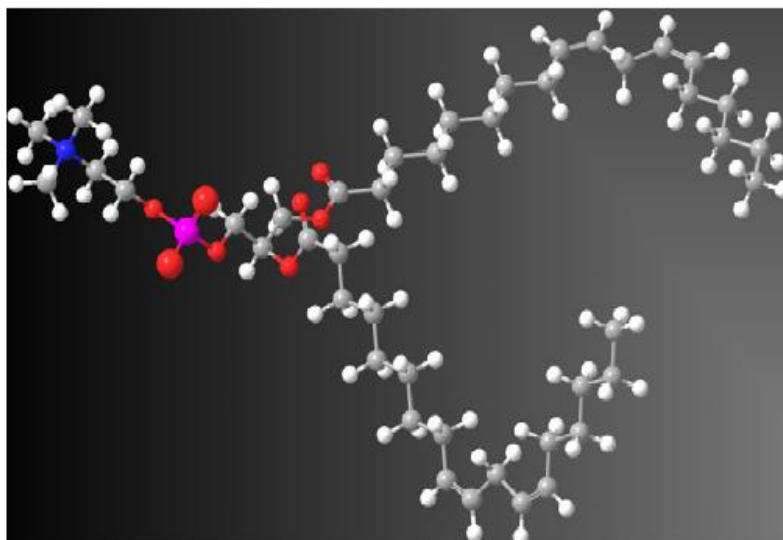
ექსპერიმენტული შედეგების მონიტორინგი გვაძლევს ცალსახა ინფორმაციას უჯრედული მემბრანის გარკვეული პარამეტრების ცვლილების შესახებ.

როგორც ექსპერიმენტული შედეგების ნაწილში განვიხილეთ, უჯრედულ მემბრანაზე ბენზოკაინის დამატება იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის განმეორებად ფენებს შორის მანძილის შემცირებას, მაგრამ ამ შემცირებას არ აქვს მონოტონური სახე. მხოლოდ სუფთა ფოსფოლიპიდური სისტემისთვის მანძილი ორ განმეორებად ლიპიდურ ორმაგ შრეს შორის არის  $d=2\pi/Q^1_z=65.2\text{\AA}$ , მასზე 10% ბენზოკაინის დამატებისას მანძილი ორ განმეორებად ლიპიდურ ორმაგ შრეს შორის აღწევს მის მინიმუმ მნიშვნელობას და არის 59.8, ბენზოკაინის შემდგომი კონცენტრაციების დამატება 20% და 30% მცირედ ზრდის მანძილს და მათი მნიშვნელობა შესაბამისი თანმიმდევრობით არის 61.9 $\text{\AA}$  და 62.7 $\text{\AA}$ . სურათზე 3 გამოსახული ექსპერიმენტული შედეგები, რომლებიც მიღებულია პარატი ალგორითმის საფუძველზე გარკვეული დასკვნების გამოტანის საშუალებას გვაძლევს: ა) ლიპიდური ორმაგი შრის ფენებს შორის მოთავსებული წყლის სისქე წამლის კონცენტრაციის ზრდასთან ერთად უმნიშვნელოდ მცირდება, ბ) ფოსფოლიპიდის ჰიდროფობური ჯგუფის სისქე პროგრესულად იზრდება წამლის კონცენტრაციის მატებით. ჰიდროფობური ჯგუფების სისქეზე მსჯელობისას საინტერესოა აგრეთვე იმის აღნიშვნა, რომ ლინოლემიურის მჟავაში გაზომილი C1-C18 ნახშირბად ატომებს შორის მანძილი არის 19.2 $\text{\AA}$  [140]. იმის გათვალისწინებით, რომ ორმაგ ლიპიდურ შრეში ჰიდროფობური ჯგუფის სისქე საშუალოდ 1.8-ჯერ მეტია მისსავე სიგრძეზე [141], ჩვენი ექსპერიმენტული მონაცემებით გაცილებით (ჩვენ ფოსფოლიპიდებში ჰიდროფობური ნახშირწყალბადების სიგრძე მერყეობს 11-დან 19 $\text{\AA}$ -მდე) მაღალი სისქის ლიპიდური ორმაგი შრის ფორმირებას ქონდა ადგილი მათზე ბენზოკაინის მოლეკულის ურთიერთქმედებისას. ეს შეიძლება გამოწვეული იყოს ნახშირბად ატომების შიდადიაგირება ან მათი ოდნავი გადახრით. ზოგადად შიდადიაგირება არის ძალიან ხშირი მოვლენა, როდესაც ორი ნახშირბადული ჯაჭვი ახდენს ორმაგი შრის ფორმირებას, რომლის თითოეული ბოლო განსხვავებული სიმეტრიისაა [142] (მაგალითად ორმაგი შრის ერთ ბოლოზე მიმაგრებული 4 ან 5 მეთილის ჯგუფი განსხვავებით მისი მეორე ბოლოსგან), ასევეა მაღალი წნევის პირობებში [143-144] და როდესაც ადგილი აქვს მოლეკულების სოლუბილიზაციას [145]. შიდადიაგირება ზრდის შიგამოლეკულურ ლატერალურ განზიდვას [146], ხოლო მოლეკულების სოლუბილიზირებისას ხდება შიდადიაგირების და გადახრის შემცირება. განზიდვა, რომელსაც ადგილი აქვს ორმაგი ლიპიდური შრის ფაზათაშორისი ზედაპირებიდან (ინტერფეისებიდან) მოტივირებულია ნახშირწყალბადური ჯაჭვის გადახრით, რათა მოხდეს მისი ადაპტირება უფრო დიდი ფართობის მოლეკულური ზედაპირისკენ [147]. ლიპიდური ჯაჭვის გადახრის კუთხის ზრდით იზრდება ლიპიდური ჯაჭვის კუთხური დაჭიმულობა. ლიპიდური

ჯაჭვის გადახრის კუთხე აღწევს გარკვეულ მაქსიმუმს, რომლის შემდგომაც ის აღარ იცვლება და ამ დროს წარმოიქმნება შიდადიაგირება.

ჰიდროფობური ფენის სისქის ანალიზმა გვაჩვენა, რომ ლიპიდურ ორმაგ შრეში ბენზოკაინის შეყვანა იწვევს შიდადიაგირებისა და ნახშირბად ატომების გადახრის კუთხის შემცირებას, ასევე აქვე ნათლად გამოჩნდა, რომ წამლის კონცენტრაციის მატება იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის სისქის მატებას. ორი ცის ბმა ფოსფოლიპიდის ნახშირწყალბადურ ჩონჩხში ხელს უშლის ორმაგ ლიპიდურ შრეში ნახშირწყალბადების უკეთ ჩალაგებას რაც გამოსახულია სურათზე 6 [148], ხოლო ბენზოკაინის შეყვანა ორმაგ ლიპიდურ შრეში ნახშირწყალბადურ ჯაჭვს აძლევს უფრო კარგად ჩალაგების საშუალებას, რაც შეიძლება ავხსნათ იმით, რომ ბენზოკაინი ახდენს იმ ცარიელი ადგილის შევსებას, რომელიც წარმოიქმნა ორმაგ ლიპიდურ შრეში შიდადიაგირებით თუ ნახშირწყალბადატომების გადახრის კუთხით. ყველა შემთხვევაში ჩვენ უნდა გავითვალისწინოთ ის, რომ ნახშირწყალბადების ჩალაგების პარამეტრის ზრდა განპირობებულია ნახშირწყალბად ატომებს შორის განზიდვის ძალების შემცირებით და ლიპიდური ორმაგი შრის ჰიდროფილური თავებს შორის განზიდვის ძალების გაზრდით. ჰიდროფილური თავების სისქე ბენზოკაინის თითქმის ყველა კონცენტრაციაზე მუდმივია და ის თითქმის არ იცვლება. ბენზოკაინის მოლეკულის რაღაც ნაწილი ორმაგი ლიპიდური შრის ჰიდროფობურ/ჰიდროფილურ ფაზათაშორის ზედაპირზეა ლოკალიზებული ამინო ფუნქციური ჯგუფით, რაც არ იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის ჰიდროფილური ნაწილის სისქის მოდიფიცირებას თუ ცვლილებას.

**სურათზე 6** რგოლებით და ჯოხებით გამოსახულია ჩვენს მიერ გამოყენებული ფოსფოლიპიდის სტრუქტურა.



საინტერესო იქნება თუ განვიხილავთ ნეიტრონ-რეფლექტომეტრის ექსპერიმენტულ მონაცემებს ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის სისტემისთვის. როგორც ექსპერიმენტული შედეგების ნაწილში ავლინებით, ნეიტრონ-რეფლექტომეტრული ანალიზისას ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის სისტემა იძლევა ორ კრიტიკულ კუთხეს და მცირე ინტენსივობის რეფლექტირებას  $Q^{(1/2)}_z = 0.05 \text{ \AA}^{-1}$  სიდიდეზე მხოლოდ მაშინ, როდესაც ფოსფოლიპიდზე დამატებული გვაქვს ბენზოკაინი.

ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის რეფლექტომეტრული სურათის დახასიათებისას, როგორც ექსპერიმენტული შედეგების ნაწილში ავლინებით, ვნახავთ ორ ძალიან საინტერესო ფაქტს, კერძოდ ორ კრიტიკულ კუთხეს და მცირე ინტენსივობის პიკს  $Q_z^{(1/2)} = 0.05 \text{ \AA}^{-1}$  სიდიდეზე. ამ რეფლექტომეტრული სურათის წარმოქმნას ადგილი აქვს მხოლოდ მაშინ, როდესაც ფოსფოლიპიდზე დამატებული გვაქვს ბენზოკაინი, თითოეული ამ რეფრაქტომეტრული პიკის უკან კოდირებულია ინფორმაცია ჩვენი საკვლევი ნიმუშის მიკროსტრუქტურის შესახებ. ჩვენი ნიმუშის რეფლექტომეტრულ დიაგრამაზე როგორც ზემოთ ავლინებით შესაძლებელია ორი კრიტიკული კუთხის იდენტიფიცირება, კერძოდ,  $Q^{(cr,1)} = 0.002 \text{ \AA}^{-1}$   $Q^{(cr,2)} = 0.012 \text{ \AA}^{-1}$  თავისთავად ორი განსხვავებული კრიტიკული კუთხე გავლენას ახდენს რეფლექტომეტრული დიაგრამის დახრის კუთხის ცვლილებაზე. ორი განსხვავებული კრიტიკული კუთხის არსებობა კი შეიძლება ავხსნათ განსხვავებული კონტრასტით ფოსფოლიპიდის საბოლოო ფენასა და სილიკონ ბლოკის საწყის ზედაპირულ ფენას შორის  $\Delta\rho = \rho_{inf} - \rho_{Si}$ , სადაც  $\rho_{inf}$  არის ორმაგი ლიპიდური შრის საბოლოო ფენა ხოლო  $\rho_{Si}$  არის სილიკონ ბლოკის საწყისი ზედაპირული ფენა. როგორც ვიცით, კონტრასტის სიდიდე გავლენას ახდენს კრიტიკული კუთხის გაბნევის ვექტორის მოდულზე, რომელზეც საერთო ჯამურ რეფლექტირებას აქვს ადგილი.

$$(2.63) \quad Q^{cr} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta^{cr} \cong 4\sqrt{\pi \cdot \Delta\rho}$$

განსხვავებული კონტრასტის არსებობა თავისთავად განპირობებულია იმით, რომ ორმაგი ლიპიდური შრის მოლეკულაში ადგილი აქვს ე.წ. მაკროსკოპულად თხელი ლაქების ფორმირებას, რომლებსაც ძალიან სუსტი ურთიერთქმედება აქვთ ორმაგ ლიპიდურ ფენებს შორის არსებულ  $D_2O$ -სთან. ასევე უნდა აღინიშნოს, რომ მსგავსი მოლეკულური კუნძულების მოცულობა ბევრად მეტია, ვიდრე სისტემაზე მიმართული კოჰერენტული რადიაციის მოცულობა. წინააღმდეგ შემთხვევაში ორი კრიტიკული კუთხის წარმოქმნას ადგილი არ ექნებოდა. ფორმულა 2.80-ის გამოყენებით, სადაც  $\rho_{inf} = \rho_{D_2O}$  გვაძლევს  $Q_z^{(cr,2)} = 0.014$  რაოდენობრივ მნიშვნელობას, რომელიც ჩვენი ექსპერიმენტისას ფიქსირებულ სიდიდესთან ძალიან ახლოს არის. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ძალიან ძნელია  $\Delta\rho$ -ს გამოთვლა

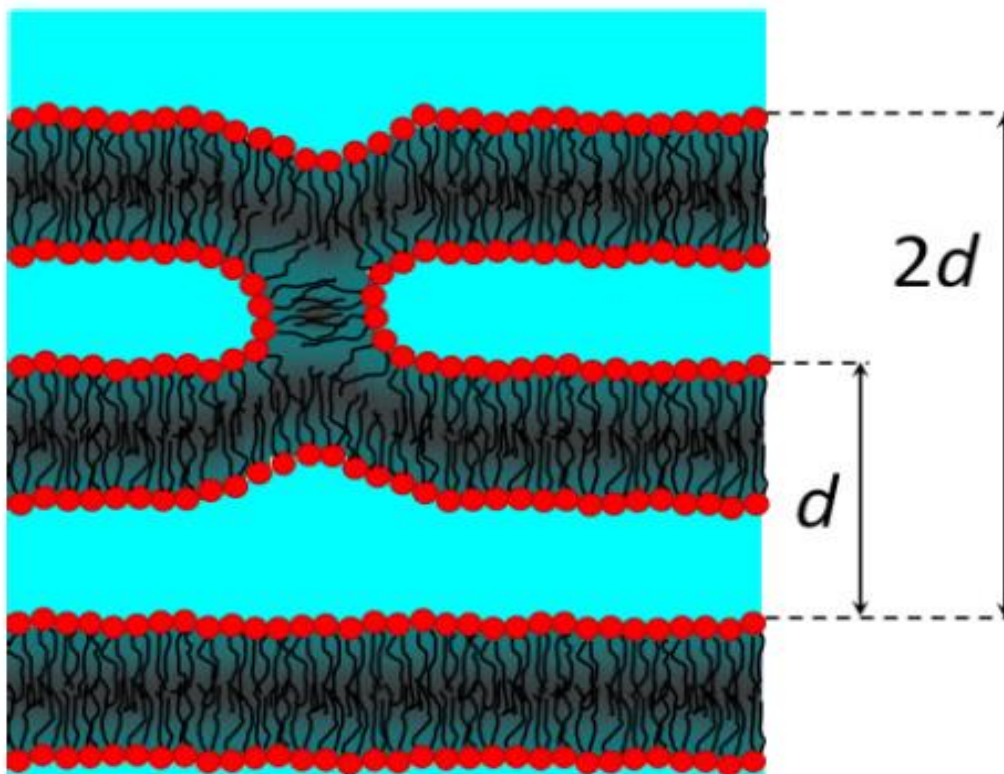


ორმაგი ლიპიდური შრის იმ ლაქებისთვის, რომლებსაც აქვთ ნაკლები ჰიდრატაციის ხარისხი და ნაკლები ურთიერთქმედება წყლის მოლეკულებთან, სირთულე გამოწვეულია იმით, რომ ჩვენ არ ვიცით ზუსტად წყლის მოლეკულასა და ლიპიდურ პატჩებს შორის ურთიერთქმედების ხარისხი, მიუხედავად ამისა, დაბეჯითებით შეგვიძლია ვთქვათ, რომ ეს კონტრასტული ფაქტორის ცვლილების სიდიდე პატჩების შემთხვევაში გაცილებით უფრო ნაკლები სიდიდისაა, ვიდრე წყლის შემთხვევაში. ჩვენი დასკვნის ამ ნაწილთან ჩვენი ექსპერიმენტული შედეგები აბსოლუტურ თანხვედრაშია კერძოდ  $Q^{(cr)1} < Q^{(cr)2}$ . მსგავს ფენომენს ჰქონდა ადგილი სილიკონის ბლოკის ზედაპირზე დაფენილ პოლისტირენსულფონატის ფენის შემთხვევაშიც, რენტგენული სხივების რეფლექტომეტრულ ანალიზში ეს სისტემაც გვაძლევდა ორ კრიტიკულ კუთხეს, საიდანაც ერთი გამომდინარეობდა სილიკონ-პოლისტირენსულფონატის ფაზატაშორისი ზედაპირიდან (ინტერფეისიდან), ხოლო მეორე სილიკონ-აირის ინტერფეისიდან [149]. ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემის სპეციფიური კრიტიკული კუთხეები გვაძლევს ინფორმაციას იმის შესახებ, რომ ბენზოკაინი იწვევს ლიპიდური ორმაგი შრის ფლუქტუაციების ჩახშობას და შემცირებას. ფლუქტუაციები ორმაგი ლიპიდური შრის ფენების და ამ ფენებს შორის არსებული წყლის მოლეკულების ურთიერთშეხებას ზრდის. როგორც ექსპერიმენტული მონაცემებიდან ჩანს, ფოსფოლიპიდზე ბენზოკაინის დამატება იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის ფლუქტუაციების შემცირებას რაც თავისთავად გულისხმობს უფრო მაღალი სიხისტის (რიგიდობის) ორმაგი შრის ფორმირებას. ამავდროულად უნდა აღინიშნოს, რომ ფოსფოლიპიდი და ფოსფოლიპიდი-პროპანოლის შემცველი სისტემები ფლუქტუირებენ უფრო ინტენსიურად და მათთვის დამახასიათებელი კრიტიკული კუთხე არის ზუსტად წყალი-სილიკონის ფაზათაშორისი ზედაპირისთვის (ინტერფეისისთვის) დამახასიათებელი კრიტიკული კუთხის ტოლი.

ჩვენს მიერ გამოყენებული ბენზოკაინის თითქმის ყველა კონცენტრაციაზე შეინიშნება მცირე ინტენსივობის პიკი  $Q^{(1/2)z}=0.05\text{\AA}^{-1}$  პოზიციაზე. ტალღური ვექტორის ამ კონკრეტულ სიდიდეზე ეს მცირე ინტენსივობის პიკი ჩნდება მრავალფენოვანი სისტემისთვის დამახასიათებელ ბრეგის პიკებთან ერთად ( $Q^{(1)z}=0.1\text{\AA}^{-1}$  ხოლო  $Q^{(2)z}=0.2\text{\AA}^{-1}$ ) მხოლოდ მაშინ, როდესაც ფოსფოლიპიდზე დამატებული გვაქვს სხვადასხვა კონცენტრაციის ბენზოკაინი, ხოლო ცარიელ ფოსფოლიპიდურ ნიმუშზე ეს პიკი დეტექტირებული არ არის. ამ სიტუაციაში ძალიან მნიშვნელოვანი გარემოება არის ამ მცირე ინტენსივობის რეფლექტივური პიკის პოზიცია, რომელიც მდებარეობს ბრეგის პირველი პიკის ტალღური ვექტორის სიდიდის ნახევარზე  $Q^{(1/2)z} = Q^{(1)z}/2$ . ჩვენი წარმოდგენით ამ პროცესის ყველაზე რაციონალური ახსნის საშუალებას იძლევა ის, რომ ადგილი აქვს ლიპიდური ორმაგი შრის ლამელარულ სტრუქტურაში შიგა ლოკალური ღეროს

მსგავსი სტრუქტურის ფორმირებას, ხოლო ამ პიკის ადგილმდებარეობა გვეუბნება რომ ყოველ მეორე განმეორებად ლამელარულ ფენებთან ადგილი ექნება ასეთ შიგა ლოკალურ მოდიფიცირებას ლამელარული სტრუქტურის ( ჩვენ ვიცით რომ ბრეგის პიკები გვაძლევენ ინფორმაციას მრავალფენიან სისტემებში ფენებს შორის მანძილის შესახებ, ჩვენ შემთხვევაში ბრეგის პირველი პიკი იძლევა ინფორმაციას ორ მეზობელ ფენებს შორის მანძილის შესახებ, ხოლო ბრეგის პირველი პიკის ნახევარ სიდიდეზე მყოფი რეფლექტივური პიკი მოგვცემს ინფორმაციას ორ განმეორებად ფენებს შორის მანძილის შესახებ). ამ პროცესის უფრო ნათლად წარმოდგენისთვის მოცემულია სურათი 7, სადაც ჩვენი მსჯელობა ვიზუალურად არის გადმოცემული.

**სურათი 7:** ბენზოკაინის დამატების შედეგად ფოსფოლიპიდის ლამელარული სტრუქტურის მოდიფიცირება, რის შედეგადაც რეფლექტომეტრულ ანალიზში ვღებულობთ მცირე ინტენსივობის ბრეგის პიკს სისტემის ბრეგის ძირითადი პირველი პიკის ნახევარ სიდიდეზე.



ლიპიდის მოლეკულაში შიდა დეროვანი სტრუქტურის ფორმირება, რომელიც არის კრისტალური დეფექტის მსგავსი, შეგვიძლია მივაკუთვნოთ იმას, რომ ბენზოკაინი ახერხებს ლიპიდური მოლეკულის ნეგატიური მოლუნვის კოეფიციენტით შეამციროს ამ მოლეკულის ლოკალური სტრუქტურა. ასეთი

მოდუნვა შესაძლებელია მაშინ, როდესაც ფოსფოლიპიდის მოლეკულისთვის დამახასიათებელი ჩალაგების ფაქტორის  $N_s$ -ის სიდიდის მკვეთრი ზრდა ხორციელდება მასზე ბენზოკაინის ურთიერთქმედებისას. აღსანიშნავია ისიც, რომ ბენზოკაინი აუმჯობესებს ფოსფოლიპიდის ჰიდროფობური ჯაჭვის ჩალაგებას, რაც გამოწვეულია იმით, რომ ის ამცირებს ფოსფოლიპიდების ჰიდროფილურ ჯგუფებს შორის განზიდვას. ეს იძლევა შესაძლებლობას, რომ ჰიდროფილური თავები მივიდნენ უფრო ახლოს ერთმანეთთან, რის შედეგადაც იზრდება ჰიდროფობური ჯაჭვის ჩალაგება. ფოსფოლიპიდების თავების ერთმანეთან ურთიერთქმედება გავლენას ახდენს  $\alpha$  სიდიდეზე, რომელითაც გამოსახულია აგრეგირებული მოლეკულების ზედაპირული ფართობი. ტენზორდის მიერ ჩატარებული მარტივი ექსპერიმენტით [139-150] ჩანს, რომ  $\alpha$  სიდიდე დამოკიდებულია ჰიდროფილურ თავებს შორის განზიდვის პარამეტრზე  $\beta$  და ფაზათაშორისზედაპირულ ( ინტერფეისურ ) თავისუფალ ენერგიაზე  $\sigma \alpha_0 = \sqrt{\beta / \sigma}$   $\beta$  პარამეტრის შემცირება განაპირობებს ჩალაგების კოეფიციენტის  $N_s$ -ის ზრდას, რაც თავისთავად განაპირობებს ისეთი ფავორიტული მორფოლოგიური სტრუქტურის ფორმირებას, რომელსაც აქვს მოდუნვის ნეგატიური მნიშვნელობა. როგორც ვხედავთ, ჰიდროფობური ჯაჭვის ჩალაგების კოეფიციენტის ზრდა განაპირობებს მოდუნული სტრუქტურის ფორმირებას, აქვე უნდა აღინიშნოს ისიც, რომ ასეთი მოდუნული სტრუქტურა არის მცირე რაოდენობით ლიპიდის ლოკალურ გარემოში, რადგან ბრევის პიკის ინტენსიურობა, რომელიც მიიღება ამგვარი სტრუქტურისგან, ძალიან სუსტია.

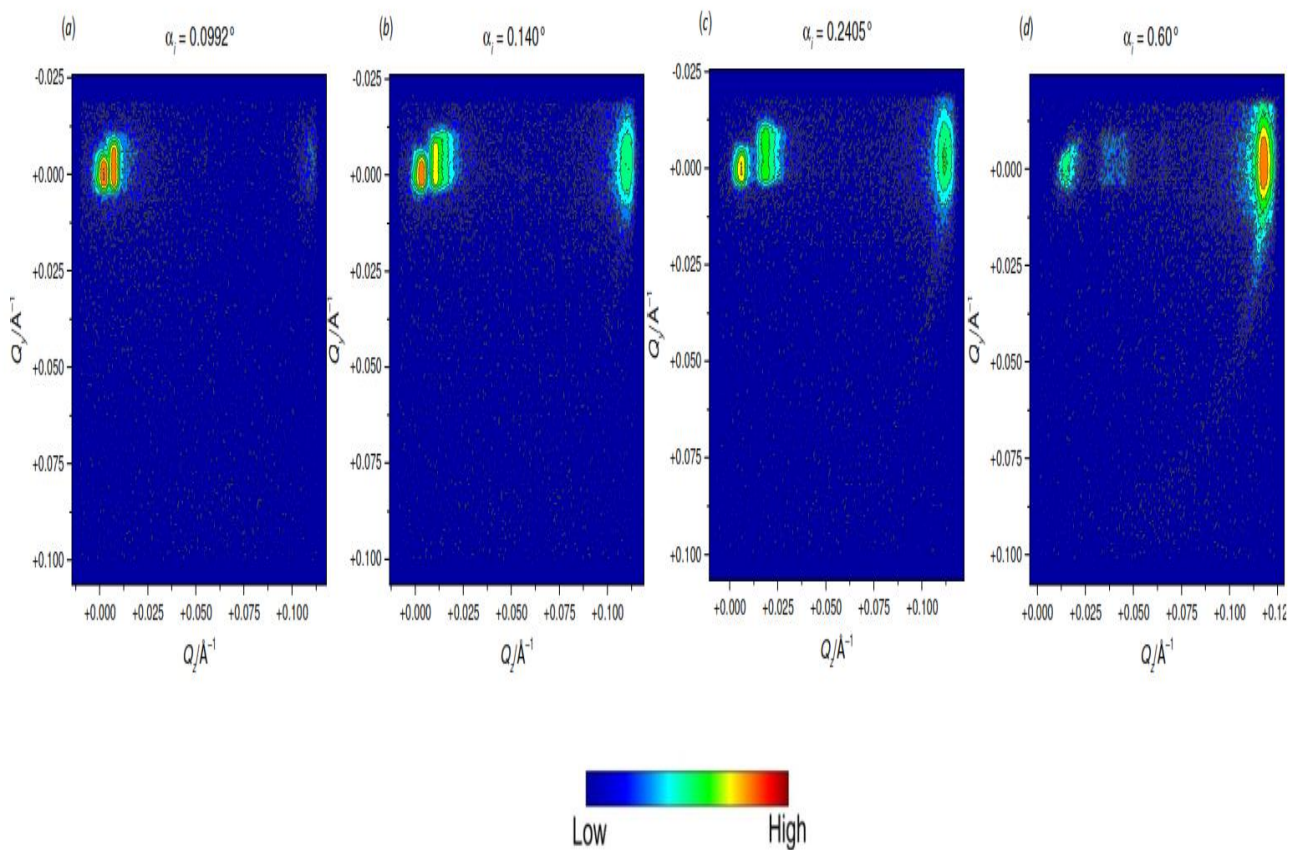
ლიტერატურულ მონაცემებზე დაყრდნობით, შესაძლებელია ვივარაუდოთ , რომ ლიპიდების მოლეკულებში ამგვარი სტრუქტურული დეფექტების არსებობა სისტემის ლამელარული სტრუქტურიდან არალამელარულ სხვა კონფორმაციის სტრუქტურაში გადასვლის წინამძღვარია [151]. კერძოდ, ფოსფოლიპიდებზე იზუპროფენის მოქმედების პრინციპის შესწავლისას ადგილი ჰქონდა ლიპიდური ორმაგი შრის ლამელარული სტრუქტურის გადასვლას ჰექსაგონალურ და ტეტრაგონალურ სტრუქტურებში, აღნიშნულ ექსპერიმენტშიც ლიპიდის შიდალოკალურ სტრუქტურაში მსგავსი ღეროვანი სტრუქტურები ფორმირდებოდა [152]. სწორედ ამ მიზნით გამოვიყენეთ მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდი, რათა მსგავსი სტრუქტურული გადასვლების ფიქსირება მოგვეხდინა ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის სისტემიდანაც. ინიცირებული ნეიტრონული ნაკადის უმეტესობა იყო სილიციუმის ოქსიდი-წყლის ფაზათაშორისი ზედაპირის კრიტიკულ კუთხეზე ნაკლები სიდიდის და ამ გზით მიიღებოდა ჯამური რეფლექტირება. ეს კომბინაცია გვაძლევდა საშუალებას, რომ ლიპიდური ორმაგი შრის ლატერარულ კორელაციას დავკვირებოდით მილევადი(ევანესცენცული) ტალღების სიღრმემდე.  $A_{evw}$ . მილევადი ტალღები კი შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგნაირად:

$$(2.64) \quad A_{evw} = \frac{1}{\operatorname{Re} \sqrt{4\pi\Delta\rho \left[ 1 - \left( \frac{\theta_i}{\theta^{(cr)}} \right)^2 \right]}}$$

იმის გამო, რომ მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტისას შედარებით ნაკლებია გაბნეული ნეიტრონების ინტენსიურობა, ჩვენი საექსპერიმენტო დრო გაიზარდა. ნეიტრონულ გაბნევის ექსპერიმენტებისთვის თითოეულ ჩვენგანს მკაცრად განსაზღვრული საექსპერიმენტო დრო გვექონდა. სწორედ ამ ყველა გარემოების გათვალისწინებით მოვახერხეთ მხოლოდ 30%-ის შემცველი ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემის გაანალიზება. ეს ნიმუში იქნა გაანალიზებული ნეიტრონული ნაკადის სხვადასხვა დაცემის კუთხით, კერძოდ  $\theta_i$  მერყეობდა  $0.020 \text{ \AA}^{-1}$ -დან  $0.6 \text{ \AA}^{-1}$ -მდე. ამასთან, ამ ექსპერიმენტისას გამოყენებული იყო დაცემის კუთხის ის სიდიდეები, რომლებიც ორი განსხვავებული კრიტიკული კუთხის სახით იქნა ფიქსირებული ნეიტრონ-რეფლექტომეტრულ მეთოდში. 2-D დეტექტორული იმიჯი დაცემის კუთხის  $\theta_i$ -ის შემდეგ მნიშვნელობებზე  $0.099^\circ$ ,  $0.14^\circ$ ,  $0.24^\circ$  და  $0.60^\circ$  გამოსახულია სურათზე 9 (ა-დ) შესაბამისი თანმიმდევრობით. დაცემის კუთხის ამ სიდიდეებზე ყველაზე დიდი ცვლილება, რაც შეინიშნება, არის ნეიტრონების გაბნევის დისტრიბუციის ცვლილება.

მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული სურათის ანალიზისას ვხედავთ, რომ დაცემის კუთხის ყველაზე მცირე სიდიდეზე ვღებულობთ ექსპერიმენტულ სიგნალს  $Qz \approx 0.1 \text{ \AA}^{-1}$  პოზიციაზე, რომელიც დამახასიათებელია ორმაგი ლიპიდური შრის ლამელარული სტრუქტურისთვის, ამ ექსპერიმენტული სიგნალის ინტენსიურობა დაცემის კუთხის მატების პარალელურად იზრდება, რადგან დაცემის კუთხის ზრდა მილევადი ტალღების მოქმედების სიღრმეს ზრდის, რის შედეგადაც ადგილი აქვს უფრო ინტენსიურად გამბნევი ლამელარული სტრუქტურის ფიქსირებას, რაც ნაკლებად შესამჩნევია, როდესაც  $\theta_i < 0.1^\circ$ . დებაი-შერერის წრის ფიქსირება შესამჩნევი ხდება, როდესაც  $\theta_i = 0.14^\circ$ , რაც მიანიშნებს, რომ ადგილი აქვს მოუწესრიგებლად განლაგებული ლამელარული სტრუქტურების ფორმირებას. ეს გამოწვეულია იმით, რომ ორმაგ შრეებს აქვთ გაზრდილი მოლუნვის კონსტანტა იმ სიტუაციასთან შედარებით, როდესაც ისინი ახერხებენ პარალელურად განლაგებული ფოსფოლიპიდური ორმაგი შრის ფორმირებას. თუმცა აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ დებაი-შერერის წრე არ ფარავს დეტექტორის მთლიან იმიჯს, რაც თავისთავად ნიშნავს იმას, რომ ჩვენ ნიმუშში არსებული ლამელარული სტრუქტურა მთლიანად მოუწესრიგებლად არ არის განლაგებული და ადგილი აქვს რაღაცა დოზით პარალელურად განლაგებული ლამელარული სტრუქტურებიდან გადახრას. აგრეთვე საინტერესოა ისიც, რომ ორმაგი ლიპიდური შრის შიგნით ფორმირებული კრისტალური სტრუქტურებისთვის დამახასიათებელი რეფლექტივური იმიჯის ფორმირებას არ

აქვს ადგილი, რაც იმას ნიშნავს, რომ ლიპიდურ ორმაგ შრეში ფორმირებული ღეროვანი სტრუქტურის დეფექტი არ გამომდინარეობს კრისტალური ლატისის დეფექტიდან. ყოველივე ამის გათვალისწინება და ორმაგი ლიპიდური შრის შიგნით ღეროვანი სტრუქტურის ფორმირება, სილიკონის ბლოკის ზედაპირის არასრული დაფარვა სანალიზო ნიმუში მიერ, სილიკონის ზედაპირზე ლოკალიზებული ლიპიდური ორმაგი შრის პარალელურ განლაგებასთან ერთად გარკვეული ნაწილის მოუწესრიგებელი განლაგებაც განაპირობებს იმას, რომ პარატის თეორიულ მოდელსა და ჩვენ ექსპერიმენტულ შედეგებს შორის არ არის იდეალური ფიტინგი სურათი2ა.



**სურათი 9.** მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაზნევის სურათი მიღებული  $\lambda=4.28\text{\AA}$  30%ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდი სისტემისთვის.  $Q_z=0.1\text{\AA}^{-1}$  სიდიდეზე დაიკვირვება ლამელარული სტრუქტურებისთვის დამახასიათებელი ბრეგის პიკი. ნეიტრონების დაცემის კუთხის მატებასთან ერთად ადგილი აქვს დებაი-შერერის წრის ფიქსირებას, რაც მიანიშნებს რომ ჩვენი ლამელარული სტრუქტურები პარალელურად ორიენტირების ნაცვლად მოუწესრიგებლად არიან განლაგებული. სიდიდეები აგებულია ლოგარითმულ სკალაზე.

უფრო რთული ნეიტრონ-რეფლექტივური სურათი გვაქვს ფოსფოლიპიდი-პროპანოლი სისტემისთვის. როგორც ექსპერიმენტული შედეგების ნაწილში მოკლედ ავღნიშნეთ, ფოსფოლიპიდზე პროპანოლის დამატება დრამატულად ცვლის ნეიტრონულ-რეფლექტივურ მონაცემებს ( სურათი 2ბ). პროპანოლი-ფოსფოლიპიდი სისტემის ექსპერიმენტული შედეგების ანალიზი განსხვავებულია ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდი სისტემის ანალიზის შედეგებისგან , ფოსფოლიპიდზე პროპანოლის დამატება ნეიტრონულ-რეფლექტივურ მეთოდში იძლევა მულტი-პიკს განსხვავებით ბენზოკაინის სისტემისგან ( სურათი 2(ბ) ). პროპანოლის რეფლექტივური პიკები გაცილებით უფრო განიერია და ზოგი მათგანი გადაფარავს კიდევ ერთმანეთს, რაც უფრო გვირთულებს სისტემის ხარისხიან დახასიათებას. პროპანოლის რეფლექტივური სურათის ანალიზისას მნიშვნელოვანია, რომ ვგოკუსირდეთ პიკების პოზიციაზე და ადგილმდებარეობაზე, რადგან აქაც შესაძლებელია, რომ გვექონდეს ლიპიდური ორმაგი შრის ლამელარული სტრუქტურა. სწორედ ამ მიზნით სურათზე 2(ბ) გამოსახული პიკები გარკვეული წესით იქნა დაჯგუფებული და ერთ ჯგუფში მოხვედრილი პიკები ერთი ფერის მისათითებელი ჯოხებით არის გამოსახული. პიკების დაჯგუფების შედეგად მიღებული მონაცემები წარმოდგენილია მოცემულია ცხრილში 4.

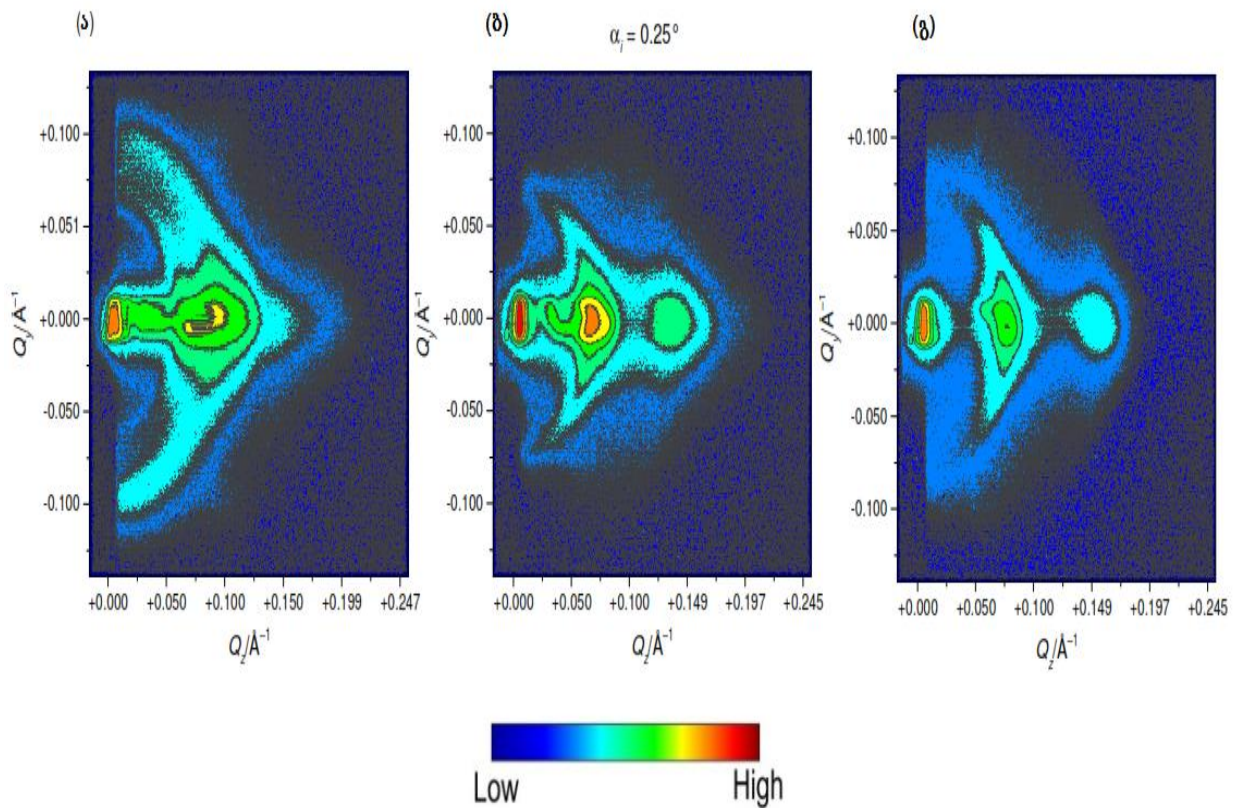
ნიშუმი	$\frac{Q_1^{(1)}}{\text{\AA}^{-1}}$	$\frac{Q_1^{(2)}}{\text{\AA}^{-1}}$	$\frac{Q_1^{(3)}}{\text{\AA}^{-1}}$	$\frac{Q_2^{(2)}}{Q_1^{(1)}}$	$\frac{Q_2^{(3)}}{Q_1^{(1)}}$	$d = \frac{2\pi}{Q_1^{(1)}}$
SoyPC	0.0964	0.191		1.98		65.2 Å
SoyPC/Propranolol (10 mol %)	0.0790	0.158		2.00		79.5 Å
	0.0618	0.124	0.187	2.01	2.99	102 Å
SoyPC/Propranolol (20 mol %)	0.0625	0.125	0.187	2.00	2.99	101 Å
	0.0466 (?)	0.101		2.17		135 Å
SoyPC/Propranolol (30 mol %)	0.0752	0.143 (?)		1.90		83.6 Å
	?	0.127				

**ცხრილი 4:** პროპანოლი-ფოსფოლიპიდის სისტემის პიკების პოზიცია ნეიტრონ-რეფლექტომეტრულ ანალიზში. ეს პიკები გამოსახულია სურათზე 2ბ. ზოგი პიკი გამოსახულია, როგორც მხები, რომელიც გადაფარულია ძირითადი პიკის რეფლექტივობით. სწორედ ამ მიზნით გაუსის ფუნქციის დეკონვოლუცია იქნა გამოყენებული პიკების მაქსიმუმებზე. მესამე რეფლექტივური პიკების უმეტესი ნაწილი ძალიან სუსტი ინტენსივობისაა და მათი პოზიციების ზუსტი ფიქსირებაც გართულებულია. სწორედ ამიტომ ისინი ამ ცხრილში არ იქნენ შეყვანილი. ყველა ის პიკები, რომელთა ფიქსაცია არის სუსტი ან შეუძლებელი, ცხრილში გამოსახულია კითხვის ნიშნებით.

რეფლექტივური პიკების ანალიზმა ძალიან კომპლექსური სურათი მოგვცა განსხვავებით იმ სურათისგან, რომელიც მიღებული იქნა ბენზოკაინის შემცველი სისტემებიდან. ფოსფოლიპიდური სისტემებისთვის ბრეგის პიკების დახასიათება,

როგორც ხარისხობრივად, ასევე რაოდენობრივი თვალსაზრისით საკმაოდ ადვილია იმის გათვალისწინებით, რომ ადგილი აქვს მრავალფენოვან ლამელარული სტრუქტურის ფორმირებას სილიკონის ბლოკის ზედაპირზე. ხოლო 10% პროპანოლის შემცველი ფოსფორიპიდურმა სისტემამ მოგვცა საკმაოდ რთული და კომპლესური რეფლექტივური სურათი. მიუხედავად პროპანოლის ასეთი მცირე კონცენტრაციისა, რეფლექტივურ სურათზე მოცემულია ხუთი პიკი, რომელთა პოზიციები ერთმანეთთან კორელირებს შემდეგი ფარდობით Q-1:2 ( ან 1:2:3). სურათი უფრო რთული ხდება პროპანოლის კონცენტრაციის მატებისას. 20%-იანი შემცველობისას პიკების ერთ ჯგუფისთვის ნათლად ჩანს, რომ პირველი ძირითადი პიკი იმდენად განიერია, რომ ძალიან ძნელია ტალღური ვექტორის მცირე სიდიდეზე ბრეგის პიკის დეტექტირება. პროპანოლის კონცენტრაციის შემდგომი ზრდა 30%-მდე კი, საერთოდ, უფრო აქრობს ამ ლატერალურ პიკს (სურათზე 2ბ ამ ლატერალური პიკის მოსალოდნელი პოზიცია მითითებულია წყვეტილი მუქი-ყვითელი ისრით). პიკის პოზიციების ანალიზმა 10% და 20% პროპანოლის შემცველი სისტემისთვის მოგვცა ორი განსხვავებული სიდიდე: 1) ორმაგი ლიპიდური შრის ფენებს შორის მანძილის  $80\text{\AA}$  და  $102\text{\AA}$  შესაბამისი თანმიმდევრობით 10%-იანი და 20%-იანი სისტემისთვის და 2)  $101\text{\AA}$  და  $125\text{\AA}$  შესაბამისი თანმიმდევრობით. მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის 2-D დეტექტორული იმიჯის შემდგომი ანალიზისას ნათლად ჩანს, რომ დებაი-შერერის წრის რეფლექტიური სურათი პროპანოლის შემთხვევაში უფრო ინტენსიურია, ვიდრე ბენზოკაინის შემცველი ფოსფორიპიდური სისტემის. კვლევის ამ მეთოდით მიღებული ექსპერიმენტული შედეგები გამოსახულია სურათზე 8.

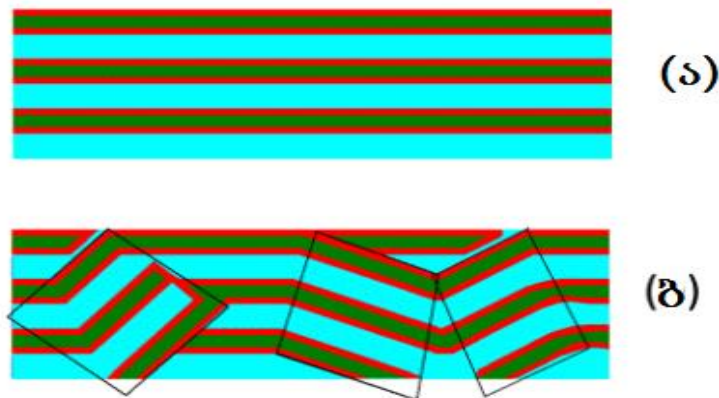
**სურათი 8:** მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის შედეგები მიღებული: ა)10% პროპანოლი , ბ)20% პროპანოლი, გ) 30% პროპანოლის სისტემიდან. გამოყენებული ტალღის სიგრძე  $\lambda=5\text{\AA}$ , ხოლო დაცემის კუთხე  $\alpha_i=0.25^\circ$ . მონაცემები აგებულია ლოგარითმულ სკალაზე.



ეს მახასიათებელი სურათი შეიძლება ავხსნათ იმით, რომ ადგილი აქვს ლამელარული ფხვნილების წარმოქმნას ლიპიდური ორმაგი შრის სტრუქტურაში. აქვე უნდა აღინიშნოს ის ფაქტი, რომ ფიზიოლოგიურ pH-ზე პროპანოლის მოლეკულური მუხტი ხელს უწყობს ნაკლებად არაორგანიზებული ორმაგი ლიპიდური შრის ფორმირებას. ამავდროულად უნდა აღინიშნოს, რომ პოლიციკლური ჯგუფები არიან უფრო ხისტები, ვიდრე არომატული ჯგუფები, რომლებიც ფიქსირებულია ბენზოკაინის მოლეკულის შემადგენლობაში. აგრეთვე შეგვიძლია ვთქვათ, რომ პროპანოლის უნარი იყოს გამოყენებული ე.წ. “ცარიელი სივრცის” შემავსებლად, რომელიც წარმოიქმნა ფოსფოლიპიდის ნახშირწყალბადის ატომების გადახრით თუ შიდადიაგირებით არის ნულის ტოლი ან ძალიან მცირე. კიდევ ერთი ძირითადი განსხვავება, რაც პროპანოლის შემცველ სისტემასა და ბენზოკაინის შემცველ სისტემას შორის დაიკვირვება, მდგომარეობს იმაში, რომ პროპანოლის ჰიდროფილურ ნაწილში არსებული მუხტი ზრდის განზიდვას ჰიდროფილურ თავებს შორის, რაც განაპირობებს მაღალი მოლუნვადობის მქონე სტრუქტურის ფორმირებას. ეს ორი უკანასკნელი ფაქტორი ლამელარული ფხვნილის ფორმირების ძირითადი მიზეზია, რომელიც სქემატურად გამოსახულია სურათზე 10.



**სურათი 10.** გამოსახულია ა) ფოსფოლიპიდი და ბ) ფოსფოლიპიდი-პროპანოლის სისტემის სტრუქტურული ვიზუალიზაცია. როგორც ვხედავთ ფოსფოლიპიდზე პროპანოლის დამატება ამცირებს ფოსფოლიპიდის ლამელარულ ფართობს, რაც განპირობებულია ორმაგი ლიპიდური შრის შიგნით ლამელარული ფხვნილის ფორმირებით. მოუწესრიგებელი ლამელარული სტრუქტურები შავი ხაზებით არის გამოსახული, რათა უფრო ადვილი იყოს ვიზუალიზაცია.



როგორც ჩვენი შედეგების განსჯისას ვნახეთ ფოსფოლიპიდზე ბენზოკანინის დამატება იწვევდა ფოსფოლიპიდის ლამელარული სტრუქტურიდან ოდნავ გადახრას (ნეგატიური მოლუნვის მუდმივას არსებობის გამო), რაც ჯერ კიდევ იძლეოდა საშუალებას, რომ ჩვენი რეფლექტივური ექსპერიმენტის შედეგები პარადის ალგორითმით გამოგვესახა. პროპანოლის შემთხვევაში კი ნათლად ჩანს, რომ მას უფრო ეფექტური ზეგავლენა აქვს ფოსფოლიპიდის ლამელარულ სტრუქტურაზე, რაც ნეიტრონული ექსპერიმენტის შედეგებითაც დასტურდება. აქედან გამომდინარე, ამ მონაცემების პარადის ალგორითმით ინტერპრეტაცია არ იქნებოდა მიზანშეწონილი. გარდა ამის პროპანოლის შემთხვევაში კონცენტრაციის მატებასთან ერთად იცვლება ძირითადი პიკების ადგილმდებარეობაც, რაც ადასტურებს, რომ ადგილი აქვს გაბნევას ლამელარული ფხვნილის სტრუქტურიდან[153]. შედეგები, რომელიც მივიღეთ ნეიტრონ-რეფლექტომეტრით და მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, იწვევს ინტერესს კლასიკური მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა გამოვიყენოთ იმის დასაანხად, თუ როგორი სტრუქტურული პარამეტრები იქნება დამახასიათებელი ჩვენი საკვლევი ნიმუშისთვის მთლიან მოცულობაში(bulk). ამ მიზნით მომზადებული იქნა ჩვენი საკვლევი ნიმუშების სუსპენზიები წყალში,

სადაც ადგილი აქვს ლიპოსომების ფორმირებას. ლიპოსომების მომზადებისას ხდება გარკვეული მექანიკური ენერგიის ტრანსფერი მათზე, ხოლო როდესაც ვახდენთ მათ ფოროვან ფილტრებში გატარებას, მაშინ ენტროპიასა და ორმაგი ლიპიდური შრის მოლუნვადობას შორის ბალანსი სპეციფიკური ზომების ლიპოსომების მიღების მთავარი მიზეზია. დიდი ზომების ლიპოსომების შემთხვევაში ანუ როდესაც ლიპოსომის ზომა ბევრად უფრო დიდია, ვიდრე ზედაპირულად აქტიური ნივთიერების ზომა, მაშინ ორმაგი ლიპიდური შრის მოლუნვის ენერგია ერთეულოვან ზედაპირზე მოცემულია შემდეგი ფორმულით:

$$(2.65) \quad f_c = 2K \left( \frac{c_1 + c_2}{2} - c_s \right)^2 + \bar{K} c_1 c_2$$

სადაც  $K$  და  $\bar{K}$  არიან დახრის, მოლუნვის მოდულები, რომლებიც დამოკიდებულია ელასტიურობის კონსტანტზე, რომელებიც განისაზღვრება ჰიდროფილური თავების ერთმანეთთან ურთიერთქმედებით და ჰიდროფობური კუდების ერთმანეთთან ურთიერთქმედებით. საბოლოოდ  $c_1$  და  $c_2$  გამოსახავს ორმაგი ლიპიდური შრის შიდა მოლუნვადობას, ხოლო  $c_s$ -ით კი გამოსახულია მინიმალური ენერგიის მქონე ლიპოსომის მოლუნვადობის სიდიდე. როდესაც ლიპიდური ორმაგი შრე არის საკმარისად მოლუნული, მაშინ ლიპოსომა ითხოვს დამატებით ორმაგი ლიპიდური შრის ფენის დამატებას, რის შედეგადაც ფენებს შორის მიზიდულობას აქვს ადგილი იმ შემთხვევაში, თუ ლიპოსომში ორმაგი ლიპიდური შრის ფენები ერთმანეთის მიმზიდულობის ძალებს ვერ ძლევს და წარმოიქმნება ოლილამელა ან ყველაზე უკიდურეს შემთხვევაში უნილამელა. ჩვენ რასაც ვხედავთ ჩვენი ნიმუშების ანალიზისას, ნეიტრონულ-რეფლექტომეტრული და მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდების, აგრეთვე კლასიკური მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდის საფუძველზე დაბეჭითებით შეიძლება ითქვას, რომ ფოსფოლიპიდზე პროპანოლის დამატება იწვევს უნილამელის წარმოქმნას, მაშინ როდესაც ბენზოკაინის შემთხვევაში ადგილი აქვს მულტილამელას წარმოქმნას.

მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით მიღებული შედეგები ადასტურებს, რომ განსხვავებით მომზადების მეთოდისგან დამოუკიდებლად, პროპანოლის შემთხვევაში ფორმირდება უნილამელა, ხოლო ბენზოკაინის სუსპენზიის შემთხვევაში კი მულტილამელა წარმოიქმნება. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევით მიღებული შედეგები მოცემულია ცხრილებში 2 და 3. ფოსფოლიპიდი-ბენზოკაინის სისტემისთვის მულტილამელა სისტემა 7 განმეორებადი ლამელალობითაა ფორმირებული და ლიპოსომის მცირე ნაწილი შეიცავს უნილამელურ სტრუქტურას. ასევე აღსანიშნავია, რომ უნილამელური ლიპოსომა შეიძლება შეიცავდეს 2-დან 5-მდე ლამელას ჩვენს საანალიზო მოდელში, სადაც  $N$ -ის პოლიდისპერიულობა არ არის გათვალისწინებული,

ფენების რიცხვი  $N$  ჩვენს მოდელში არის მიახლოებით გამოთვლილი, კერძოდ, მცირე  $Q$ -ს სიდიდეზე ჩანს ორმაგი ლიპიდური შრის ფენების სისქე და აქედან გამომდინარე შეგვიძლია გამოვთვალოთ ფენების რაოდენობაც, თუ გავიგებთ მთლიანი ლიპოსომის სისქეს [157-158]. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდიდან მიღებული ძირითადი სტრუქტურული პარამეტრები თანხვედრაშია და თითქმის მსგავსია ნეიტრონ-რეფლექტივური მეთოდიდან მიღებული შედეგების. ორივე ამ მეთოდიდან მიღებული ორმაგი ლიპიდური შრის სისქის სიდიდე ერთმანეთის მსგავსია. არის გარკვეული პარამეტრები, რომლებიც ერთმანეთს ოდნავ არ ემთხვევა, მაგრამ ეს ცდომილება იმდენად მცირეა, რომ მათზე არ ვფოკუსირდებით. ორმაგი ლიპიდური შრის მოლეკულის მოლუნვის მაღალი კოეფიციენტი, გამოწვეული პროპანოლის დამატებით, განაპირობებს ამ ლიპოსომის შიგა სტრუქტურის ფორმირებას, კერძოდ უნილამელარულ სტრუქტურას. ვიზუალური შემოწმებისასაც ვნახავთ რომ პროპანოლის შემცველი ლიპოსომა არის ნაკლებად მღვრიე, ვიდრე ბენზოკაინის შემცველი ლიპოსომა, რადგან პროპანოლის შემცველი ლიპოსომა არის უფრო მცირე სისქის გამომდინარე იქიდან, რომ ის უნილამელარული სისტემაა. მიუხედავად ამისა ლიპოსომის ზომა მაინც დიდია იმისთვის, რომ მცირე კუთხეების ნეიტრონულ გაბნევაში ჩვენს მიერ გამოყენებულ  $Q$ -ს ინტერვალში მოხერხდეს გუნერის რეჟიმის ფიქსირება. ბენზოკაინის შემთხვევაში ორმაგი ლიპიდური შრის სისქის  $\tau$  სიდიდე, მიღებულიმცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, თანხვედრაშია ნეიტრონ-რეფლექტომეტრული მეთოდით მიღებულ სიდიდესთან, მცირე გადახრები აქაც არის, მაგრამ ეს შეიძლება აიხსნას იმით, რომ ორივე წამლებზე მოქმედებს გარკვეული განუზღვრელობის პარამეტრები. საბოლოოდ ჩვენს მიერ სონიფიკაციის და ფილტრებში გატარების გზით მომზადებულ ნიმუშებს აქვთ ერთი და იგივე ლატერალური სტრუქტურა და ნიმუშის მომზადების მეთოდი გავლენას არ ახდენს ბენზოკაინის და პროპანოლის შემთხვევაში ფოსფოლიპიდის ლატერალურ სტრუქტურაზე. ამავდროულად აღსანიშნავია, რომ მხოლოდ ფოსფოლიპიდების შემთხვევაში მომზადების მეთოდს ძალიან დიდი როლი აქვს მის შიდა სტრუქტურაზე, ვგულისხმობთ მულტილამელარულ და უნილამელარულ სტრუქტურებს. ფილტრებში გატარების მეთოდით იმის და მიხედვით, თუ რა ზომისაა ფორები, ჩვენ შეგვიძლია მივიღოთ უნილამელარული და მულტილამელარული ლიპოსომები. აქვე უნდა ხაზი გავუსვათ იმა, რომ ფილტრებში გატარების გზით მომზადებული ბენზოკაინი-ფოსფოლიპიდის სისტემისთვის, როგორც ეს მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტიდანაც ჩანს, არსებობს გარკვეული უზნები, სადაც გვაქვს უნილამელარული სტრუქტურა და არის უზნები, სადაც გვაქვს მულტილამელარული სტრუქტურა. სონიკირების (Sonication)მეთოდით მომზადების შემთხვევაში, ბენზოკაინთან გვექონდა მხოლოდ მულტილამელარული სტრუქტურა. ფილტრებში გატარების გზით ლიპოსომების

ნიმუშების მომზადება აჩვენებს, რომ აღნიშნული მეთოდი შეიძლება გამოყენებული იყოს როგორც უნილამელარული სისტემების მიღების მეთოდად [159]. თუმცა ზოგ შემთხვევებში, როგორც ექსპერიმენტული შედეგებიდანაც ჩანს, მიიღება მულტილამელარული აგრეგატებიან უფრო კომპლექსური მორფოლოგიები [160] [161].

### **3.7.8. დასკვნები ,თავი 3.7-ისთვის.**

გამოკვლეულია ბენზოკაინის და პროპანოლის მოქმედების პრინციპი ფოსფოლიპიდის ორმაგ ლიპიდურ შრეზე.

დადგენილია, რომ ბენზოკაინს და პროპანოლს აქვს განსხვავებული ეფექტი ფოსფოლიპიდის ორმაგი ლიპიდური შრის სტრუქტურაზე, კერძოდ, ბენზოკაინი იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის მოლეკულის შიგა ნეგატიურ ლუნვადობას, რის შედეგადაც ადგილი აქვს ლიპიდური შრის ჰიდროფობური ჯაჭვის უფრო მჭიდრო ჩალაგებას და ჰიდროფილურ თავებს შორის დისტანციის შემცირებას. ასევე აღსანიშნავია, რომ ბენზოკაინის დამატებისას ადგილი აქვს ფოსფოლიპიდის მხოლოდ მცირე გადახრას იდეალური პარალელური ლამელარული განლაგებისგან.

პროპანოლის შემთხვევაში იმის გამო, რომ ის არის გარკვეული მუხტის მატარებელი, იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის მკვეთრ ლუნვადობას, რაც დაფიქსირებული იქნა ნეიტრონ-რეფლექტივური და მცირე სიღრმეებზე მოქმედი მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით. ლიპიდური ორმაგი შრის აღნიშნული ლუნვადობა იყო ფხვნილის მსგავსი ლამელარული სტრუქტურების ფორმირების ძირითადი მიზეზი. კლასიკური ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით ანალიზისას კი ჩანს, რომ ფოსფოლიპიდებზე პროპანოლის დამატება იწვევს უნილამელარული სტრუქტურების ფორმირებას.

ფოსფოლიპიდების სტრუქტურის ასეთი მოდიფიკაცია შესაძლებელია გახდეს საფუძველი უჯრედული პროტეინების მობილობის ცვლილების, მათი ბიოლოგიური ფუნქციის შემცირების ან გაზრდის ან გახდეს უჯრედის სერიოზულად დაზიანების მიზეზი.

### **3.8. კომპლექსური სითხეების სიბლანტის ცვლილება ნანონაწილაკების დამატებით**

სფერული ნანონაწილაკები იჩენენ სიბლანტის მოდიფიკაციის უნარს. მათი დამატება სითხეებზე ძირითადად იწვევს სიბლანტის მატებას. არასფერული ნანონაწილაკების ეფექტი სითხეების სიბლანტეზე, როგორც დღეს არსებული

თეორიული და ექსპერიმენტული მონაცემებიდან ჩანს, არის უფრო რთული, მაგრამ საბოლოო ეფექტი მათ შემთხვევაშიც არის სიბლანტის მატება. ჩვენ შემთხვევაში კომპლექსურ სითხეებზე დამატებული იქნა განსხვავებული დიამეტრის თევზისებრი ნაწილაკები, რათა შეგვესწავლა კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე მათი გავლენა და ამ გავლენის მექანიზმი. ექსპერიმენტულად ჩვენ შევძელით ნედლი ნავთობის სიბლანტის შემცირება. კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე თევზის მსგავსი ნაწილაკების ამ განსხვავებულმა ეფექტმა შეიძლება ჰპოვოს საინტერესო პრაქტიკული გამოყენება.

### **3.8.1. სამუშაოს ძირითადი მოტივაცია, ზოგადი მიმოხილვა.**

სიბლანტის მოდიფიკატორი მყარი ნაწილაკების გამოყენება საკმაოდ აქტუალურია კვების მრეწველობაში [162] და ნავთობის ამოწვილის საქმეში [163]. უმარტივესი თეორიული მოდელი სითხეების სიბლანტეზე განზავებული სფერული ნაწილაკების ეფექტის შესახებ მოწოდებული იქნა აინშტაინის მიერ [164]. სიბლანტის ნავარაუდები ცვლილება აღნიშნული თეორიული მოდელის საფუძველზე იყო ძალიან მცირე განზავებული სფერული ნაწილაკების გამოყენებისას (მაქსიმალური კონცენტრაცია 1% მოცულობითი პროცენტი). სწორედ ამიტომ სასურველი შედეგის მისაღებად იყენებდნენ უფრო კონცენტრირებულ ნაწილაკებს (მაგ., შოკოლადის შემთხვევაში [165]) ან თიხის არასიმეტრიულ ნაწილაკებს [166], რამაც განაპირობა უფრო კომპლექსური თეორიული მოდელების ჩამოყალიბება [167,168], ხოლო თეორიული მოდელების რაოდენობის მატებამ ინტერპრეტაციის უფრო ფართო საშუალება მოგვცა.

აღნიშნული თეორიული მოდელები ძირითადად ეყრდნობა მარტივ სითხეებს, თუმცა უფრო რთულ სითხეებთან [169,170] ნაწილაკების ურთიერთქმედება შესაძლოა იყოს უფრო კომპლექსური ბუნების [171,172] და ეს მონაცემები შეიძლება გამოყენებული იქნას ახალი თეორიული ხედვის შესაქმნელად. ჩვენი ჯგუფის წინა კვლევაში შესწავლილი იქნა ლუბრიკაციის ეფექტი, რომელიც აღწერს კომპლექსურ სითხეებში ჰიდროფილურ კედლებთან ლამელარულ განლაგებას [172]. ესეთი ლამელარული განლაგება კომპლექსური სითხეების სხვადასხვა უბანს ერთმანეთის ზედაპირზე მოცურების საშუალებას აძლევს [171]. ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტში, ტიპური რელაქსაციის დრო ასეთი ლამელებისთვის არის უფრო სწრაფი, ვიდრე ნიმუშის მთლიან მოცულობაში მყოფი ლამელებისთვის. ამგვარად, მოსალოდნელია, რომ თევზის მსგავსი ნაწილაკები ხელს შეუწყობენ სითხეების დინებას, რამაც უნდა განაპირობოს მათი სიბლანტის შემცირება [172]. თევზის მსგავსი ნაწილაკების დიამეტრის ზრდა კი ხელს უწყობს კომპლექსურ სითხეში სპეციფიური ლამელარული უბნების ფორმირების სრულყოფას. აქედან გამომდინარე უფრო დიდი დიამეტრის

მქონე თეფშის მსგავსი ნანონაწილაკები უფრო შეამცირებენ სიბლანტეს, ვიდრე მცირე დიამეტრის მქონე ნანონაწილაკები.

დღემდე არსებული ექსპერიმენტული და თეორიული მონაცემების საფუძველზე შესაძლებელია დავასკვნათ, რომ კომპლექსურ სისტემებში სიბლანტის ცვლილებას განაპირობებს ამ სისტემის შიგასტრუქტურული მოდიფიკაცია. რეოლოგიური შედეგების ასახსნელად აუცილებელია დეტალურ ინფორმაციას ვფლობდეთ საკვლევი ნიმუშის სტრუქტურაზე. ექსპერიმენტებმა დაადასტურა ნედლი ნავთობის სიბლანტის მკვეთრი შემცირება.

### 3.8.2. თეორია

სფერული ნანონაწილაკებით სიბლანტის მოდიფიკაცია საკმაოდ კარგადაა შესწავლილი და გააზრებული. მცირე კონცენტრაციებზე ძირითადი შედეგი იხსნება აინშტაინის მარტივი თეორიული მოდელით [164], ხოლო მრეწველობისთვის და პრაქტიკული გამოყენებისთვის კი უფრო დიდი კონცენტრაციებია საინტერესო. განვიხილოთ მარტივი ფორმულა [167]:

$$(2.66) \quad \eta_{rel} = \frac{\eta}{\eta_0} = \left[ 1 - \frac{\phi}{1 - c\phi} \right]^{-[\eta]}$$

ფორმულის მარცხენა ნაწილში ჩვენ ვხედავთ ფარდობით სიბლანტეს მარტივ სუფთა სითხესთან შედარებით  $\eta_0$ . ფორმულის მარჯვენა ფრჩხილებში მოთავსებული ნაწილი დამოკიდებულია ნაწილაკების კონცენტრაციაზე  $\phi$  და სიმჭიდროვის კოეფიციენტზე  $c = \phi_c^{-1} - 1$  რომელიც თავისთავად დამოკიდებულია ნაწილაკების მაქსიმალურ კონცენტრაციაზე  $\phi_c \approx \phi_{max} = 0.74$  ( გამოყენებულ ლიტერატურაში 0.64-ია მითითებული [164] ) მონოდისპერსული სფერული ნაწილაკებისთვის. ექსპონენტურ  $[\eta]$  სიდიდეს ჩვენ ვუწოდებთ მახასიათებელ სიბლანტეს, რომელიც სფერული ნანონაწილაკებისთვის 5/2-ის ტოლია. ამრიგად, უმცირესი კონცენტრაციების ლიმიტზე აინშტაინის ფორმულა ღებულობს შემდეგ მნიშვნელობას  $\eta_{rel} = 1 + 5/2\phi$

ძირითადი შედეგები, რომელსაც ამ ცნობილი ფორმულიდან ვღებულობთ: ა) სიბლანტე ყოველთვის იზრდება ნაწილაკების კონცენტრაციის ზრდისას, ბ) ფარდობითი სიბლანტე სუსტადაა დამოკიდებული ნაწილაკების მცირე კონცენტრაციაზე.

უფრო დეტალურ ინფორმაციას მახასიათებელ სიბლანტეზე  $[\eta]$  იძლევა ასპექტის თანაფარდობის სიდიდე  $A_f$ . ელიფსოიდური სისტემებისთვის ასპექტის

თანაფარდობის სიდიდე  $A_f \gg 1$ , ბოჭკოვანი ნაწილაკებისთვისაც  $A_f \gg 1_f$ , ჩვენი კონკრეტული ექსპერიმენტისას ვფოკუსირდებით შეკუმშულ ნაწილაკებზე, სადაც  $A_f < 1$ , თიხის ნანონაწილაკის შემთხვევაში ასპექტის თანაფარდობის სიდიდე იღებს ლიმიტს  $A_f \ll 1$ . გამოყენებული ლიტერატურიდან ჩანს, რომ მახასიათებელი სიბლანტე  $[\eta]$  ძალიან შეკუმშული ნაწილაკებისთვის იღებს ლიმიტს შემდეგ მნიშვნელობაზე [15]:

$$(2.67) \quad [\eta] = \frac{1012}{1497} \cdot A_f^{-1} \approx 0.68 \cdot A_f^{-1}$$

თიხის ნანონაწილაკების შემთხვევაში ჩალაგება ხდება უფრო მკვრივი და ჩალაგების პარამეტრი  $c \approx 0$  თითქმის ქრება. ამგვარი ქცევის დასახასიათებლად შემდეგი ფორმულა შეგვიძლია გამოვიყენოთ.

$$(2.68) \quad \eta_{rel} = [1 - \phi]^{-0.68 \cdot A_f} = [1 - \phi]^{-0.68 \cdot D/t}$$

სადაც  $D$ -თი გამოსახულია თეფშისებრი ნაწილაკების დიამეტრი და  $t$ -თი კი ამ ნაწილაკების სისქე. როდესაც ნაწილაკების კონცენტრაცია  $\phi = 1\%$  და ასპექტის თანაფარდობა  $A_f = 0.01$ . ეს ფორმულაც ამ მონაცემების ჩასმით ვარაუდობს სიბლანტის 2-ჯერ გაზრდას.

ეს შედეგები ეფუძნება იმ არგუმენტს, რომ თეფშის მსგავს ნაწილაკებს აქვთ ძალიან დიდი ჩალაგების უნარი. ბიკერანოს [168] სტატიაში ისინი პერკოლაციაზე დაყრდნობით ამბობენ, რომ კრიტიკული კონცენტრაცია  $\phi_c$  არის გაცილებით ნაკლები, ვიდრე ნაწილაკების მთლიანი კონცენტრაცია. მათი ფორმულის ანალიზით თეფშის მსგავსი ნაწილაკების კრიტიკული კონცენტრაცია შეგვიძლია გამოვთვალოთ შემდეგნაირად:

$$(2.69) \quad \phi_c = \frac{9.875 \cdot 1.658}{7.742} (-2 \ln A_f) A_f = -4.23 A_f \ln A_f$$

ასპექტის თანაფარდობის ტიპიურ სიდიდეზე  $A_f = 0.01$  შედეგი კვლავ არის შედარებით მაღალი  $\phi_c = 0.2$ . ჩვენი ექსპერიმენტული მონაცემებიდან კი ვიცით, რომ თიხის ნაწილაკების გელის ფაზაში გადასვლა ხდება 1%-დან 2%-ის ინტერვალში. ეს განსხვავება გამოწვეულია ნაწილაკების მუხტის არსებობის გამო. როგორც ვხედავთ, თიხის თეფშისებრი ნაწილაკებისთვის ძალას კარგავს მარტივი გეომეტრიული მოცემულობების გათვალისწინება.

გელის ფაზაში გადასვლით სისტემა ხდება ვისკოელასტიური, რომელიც არის პროპორციული კომპლექსური გაცურების მოდული ანუ ძვრის მოდული

$$(2.70) \quad G \sim (\phi - \phi_c)^\gamma$$

ექსპონენტა  $y$  არის 0.8-დან 2-ის ფარგლებში, რადგან კრიტიკული კონცენტრაცია  $\phi_c$  არის მუდმივა, თეფშების დიამეტრის ცვლილების მიუხედავად. ამის გათვალისწინებით ფორმულა 2.70 თეორიულად ვარაუდობს შედარებით მუდმივ მოდულს. მარტივი გეომეტრიული მოცემულობების გათვალისწინება ასეთ შემთხვევაში ვერ ამართლებს, და საჭიროა უფრო რთული და კომპლექსური თეორიული ხედვის ჩამოყალიბება. აქვე უნდა ავლნიშნოთ, რომ ჩვენ შემთხვევაში ფუნქციური კავშირი სიბლანტესა  $\eta$  და ძვრის მოდულს  $G$  შორის დახასიათებულია აქტუალური ფაზის (სითხის და გელის ფაზები) დამოუკიდებლად. არგუმენტია ის, რომ მოძრაობის მიკროსკოპული სიხშირე ერთნაირად ახდენს გავლენას ორივე სიდიდეზე და ამ ორ სიდიდეს შორის ფუნქციური კავშირი თეფშების დიამეტრის ცვლილებისას უნდა იყოს ერთი და იგივე. რეოლოგიური ექსპერიმენტული მონაცემების გათვალისწინებით ჩვენ მივაღწიეთ გელის ფაზას მაშინ, როდესაც კომპლექსური  $G$  ძვრის მოდული დროის საკმაოდ დიდ ინტერვალში იყო მუდმივა. (იხილეთ დამატებითი ფაილი)

### 3.8.3. ლამელარული მემბრანების თეორია.

ერთ-ერთი ძალიან კომპლექსური და მნიშვნელოვანი თეორიული მოდელი ლამელარული თხევადი მემბრანული სისტემებისთვის შემუშავდა საფრანის [175] მიერ. მიკროემულსიებში მემბრანული ზედაპირულად აქტიური ნივთიერებების ქცევის დომინანტია თერმოდინამიკა, სწორედ იგივე კონცეფციაა აღებული ლამელარული მიკროემულსიების შემთხვევაშიც [176,177]. ლამელარული მიკროემულსიები ფორმირდებიან ჰიდროფილური ზედაპირის მიდამოებში [173], განსაკუთრებით მაშინ, როდესაც თიხის ნაწილაკებია [171] სისტემაზე დამატებული. სიბლანტის და კომპლექსური მოდულის თანაფარდობა ორი ლამელარული სისტემიდან შეგვიძლია გამოვსახოთ საფრანის თეორიული მოდელის დახმარებით [175]:

$$(2.71) \quad \eta_{rel} = \frac{\eta_1}{\eta_2} = \frac{E_2 \Lambda_2}{E_1 \Lambda_1}$$

სადაც  $E$  არის ენერგეტიკული ნაწილი, ხოლო  $\Lambda$  არის ოსერნის ტენსორი (კარლ ვილიამ ოსენი იყო ცნობილი მეცნიერი, რომელსაც აქვს ასევე ძალიან ცნობილი თეორიული მოდელი სითხეების დინამიკაზე და მათი დინების თავისებურებებზე, მისი ეს თეორიული მოდელი გახლავთ სტოქსის დინების (Stokes flow) გაუმჯობესებული ვარიანტი). ფორმულის ენერგეტიკული ნაწილი უფრო დეტალურად შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგი ფორმით:

$$(2.72) \quad E_i = \kappa_i k^4 + \frac{1}{\kappa_i d_{E,i}^4}$$



სადაც  $K_i$  არის ლუნვადობის მაჩვენებელი, რომელიც ნორმალიზებულია თერმული ენერგიით  $k_B T$ , ხოლო ტალღური ვექტორი  $k$  არის კრიტიკული საშუალება, რომელიც დაკავშირებულია ჩვენი ნაწილაკების დიამეტრზე, მემბრანებს შორის მანძილი  $d_{E,i}$  იძლევა საშუალებას დავახასიათოთ ენერგეტიკული გადანაცვლება.

ფორმულა 2.89-ში გამოყენებული ტენსორის სიდიდე უფრო დეტალურად შემდეგნაირად შეგვიძლია გამოვსახოთ:

$$(2.73) \quad \Lambda_i = \frac{1}{4k\eta_i} \cdot \left( 1 - \frac{1 + 2d_i k + 2(d_i k)^2 (1 + 2L_i k)}{(1 + 4L_i k) \exp(2d_i k)} \right)$$

სადაც  $\eta_i$  არის სიბლანტე  $i$  სისტემაში მემბრანის გარშემო არსებული სითხის, ხოლო  $L_i$  არის პერფორაციის სიდიდე. უმცირეს სიდიდეებზე ( $k \rightarrow \infty$ ) სიბლანტე არის ერთადერთი სიდიდე, რომელსაც წვლილი შეაქვს ტენსორის სიდიდეში. ფრჩხილებში მოთავსებული ნაწილი გამოსახავს პიკის ფუნქციას შემდეგ მაქსიმუმზე  $k=0.9/d_i$ , სადაც  $d_i$  აღნიშნავს მემბრანებს შორის მანძილს. პერფორაციის შემოღება ამ მაქსიმუმს აკავებს მინიმუმ სიდიდეზე და გადაადგილებს მას უფრო მაღალი  $k$ -სკენ, თუმცა ამ მაქსიმუმით ჩვენ ავლწერთ ორიენტირებული ლამელას გასწვრივ არსებულ დინებას.

### 3.8.4. გამოყენებული მასალები

თიხის ნაწილაკები მივიღეთ Süd Chemie-ს კომერციული ჯგუფიდან. ამ კომპანიიდან ჩვენ მივიღეთ სხვადასხვა ტიპის თიხის ნაწილაკები კერძოდ Laponite RD, რომლის დიამეტრი იყო 25-30ნმ, Laponite OG, რომლის დიამეტრი იყო 80ნმ, Laponite WXFN, რომლის დიამეტრი არის 140ნმ. ეს პროდუქტები ექსპერიმენტში გამოიყენებოდა ყოველგვარი დამატებითი მოდიფიკაციის გარეშე. Montmorillonite EXM 757 ის ნაწილაკების დიამეტრია 500ნმ. თიხის ეს ნაწილაკი დამუშავდა დამატებით ჩვენს მიერ. კერძოდ, გახსნილი იყო დეიონიზირებულ წყალში, მთელი ღამის განმავლობაში ულტრაბგერით სონიკატორში დავტოვეთ, შემდეგ დაცენტრიფუგდა, ცენტრიფუგირების შემდგომ ავიღეთ თხევადი ნაწილი, რომელიც ავართქლეთ და გამოვაშრეთ თიხის ნაწილაკები ვაკუუმის დახმარებით. თიხის ნაწილაკების მახასიათებელი სიდიდეები მოცემულია ცხრილში 1.

## ცხრილი1.

### თიხის ნაწილაკები Südchemie / Rockwood კომპანიიდან

დასახელება	აბრევიატურა	დიამეტრი[nm]	სისქე [nm]
Laponite RD	LRD30	30	1
Laponite OG	LOG80	80	1
Laponite WXFN	WXFN140	140	1
Montmorillonite EXM 757	MMT500	500	1

ნ-დეკანი და NaCl მივიღეთ Sigma Aldrich-დან. ზედაპირულად აქტიური ნივთიერება C<sub>10</sub>E<sub>4</sub> შეძენილი იყო შემდეგი გერმანული კომპანიისგან Bachem, Weil am Rhein, Germany. დეიტერირებული ნ-დეკანი და წყალი მივიღეთ კომპანიისგან Amar Chemicals, Döttingen, Switzerland. ყველა ქიმიური რეაგენტი გამოიყენებოდა პირდაპირ ყოველგვარი დამატებითი მოდიფიკაციის გარეშე.

ნავთობის ნიმუშები მიღებული იყო სხვადასხვა ადგილებიდან, კერძოდ, პენსილვანია და კოლორადო (აშშ), დენვერი და ტორონტო .

1% -იანი (მოცულობითი) თიხის ნაწილაკის მისაღებად შესაბამისი რაოდენობის თიხის ნაწილაკები იხსნებოდა წყალში, ემატებოდა 1% ნატრიუმის ქლორიდი და მთელი ღამის განმავლობაში გვედგა სონიკატორში. მუდმივ მიკროემულსიურ სისტემასაც (შემადგენლობა გახლავთ 17% C<sub>10</sub>E<sub>4</sub> +43% ნ/დეკანი+43% წყალი) ემატებოდა 1% თიხის და 1% ნატრიუმის ქლორიდის ხსნარები. ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტისთვის ვიყენებდით სხვადასხვა კონტრასტს, კერძოდ, მძიმე წყალს ან დეიტერირებულ დეკანს.

ნედლი ნავთობის ნიმუშზე დამატებული გვექონდა მონტმორილონიტი EXM 757 თიხის ნაწილაკი, რომლის სონიფიკაცია გრძელდებოდა სამი დღე. ნედლ ნავთობში მონტმორილონიტი EXM 757 თიხის ნაწილაკის ხსნადობა იყო დაახლოებით 0.6-0.7 მასური პროცენტი. თიხის ნაწილაკები ემატებოდა ნედლ ნავთობს და შემდეგ ვახდენდით ამ ნავთობის აალებას, ამ გზით ვიგებდით თიხის ნაწილაკების გახსნილ რაოდენობას.

### 3.8.5. გამოყენებული ინსტრუმენტები

რეოლოგიური ექსპერიმენტი ჩატარებული იყო MCR302 და MCR501 Anton Paar [178,179] ინსტრუმენტებზე. თეორიულად MCR302 ხელსაწყოს შეუძლია 10-ჯერ უფრო დაბალი სიბლანტის გაზომვა, მისი მგრძობელობა არის უფრო მაღალი, ვიდრე MCR501-ის. სტორიჯ G' და ლუზ G'' მოდული გაზომილი იქნა კუეტის

(კამერის, კიუვეტის) უჯრედის გამოყენებით. ეს გეომეტრია გვადლევს საშუალებას, რომ რეომეტრი დავაინსტალიროთ მცირე კუთხეების ნეიტრონულ გაბნევის ხელსაწყოზე და ერთდროულად ჩავატაროთ გაბნევისა და რეოლოგიის ექსპერიმენტი. ნიმუშის დიდი რაოდენობა და მეტი ზედაპირული ფართობი განაპირობებს უფრო სენსიტიურ და კარგი სტატისტიკის მქონე ექსპერიმენტული შედეგების მიღებას.

მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევა იქნა ჩატარებული KWS1[180,181] და KWS3[182,183] ინსტრუმენტებზე, მიუნხენის კვლევით რეაქტორზე-2, ქ. გარჩინგში (გერმანია). რეომეტრი ძირითადად იყო ინსტალირებული ტანგენციალური დაკვირვებისთვის, სწორედ ეს კონფიგურაცია იძლევა საშუალებას თიხის ნაწილაკების განლაგებას დავაკვირდეთ, ასევე რადიალური გეომეტრიაც იქნა გამოყენებული ექსპერიმენტის მსვლელობისას, თუმცა ტანგენციალური გეომეტრიით მიღებული შედეგები უფრო საინტერესოა, რაც შედეგების ნაწილში განიხილება. ნეიტრონების ტალღის სიგრძე KWS1 ინსტრუმენტზე იყო 5Å, ხოლო KWS3 ინსტრუმენტზე 12.8Å. KWS1 არის კლასიკური მცირე კუთხეების გაბნევის ინსტრუმენტი დინამიური Q-ს ინტერვალით  $10^{-2}$  -დან  $5\text{ნმ}^{-1}$ -მდე. KWS3 ინსტრუმენტი იყენებს ფოკუსირებად მინებს, რომლის დახმარებითაც აღწევს Q-ს მცირე სიდიდეებს, კერძოდ,  $5 \times 10^{-4}$  -დან  $5 \times 10^{-2}$   $\text{ნმ}^{-1}$  ინტერვალში. ასევე ჩატარდა ხელსაწყოების კალიბრაცია სტანდარტული ნიმუშებით.

### 3.8.6. რეოლოგიური შედეგები

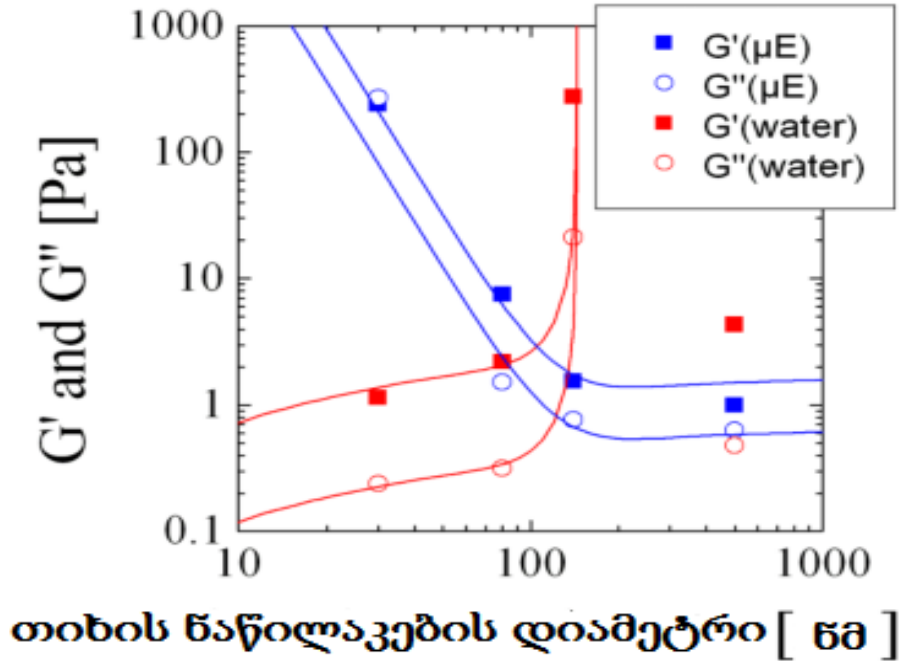
ინტენსიური რეოლოგიური ექსპერიმენტებით დახასიათებული იქნა უამრავი ნიმუში, მათი უმეტესობა ავლენს გელის მსგავს რეოლოგიურ თვისებებს და მათვის დამახასიათებელი მოდულის სიდიდეები იქნა დეტექტირებული  $\omega = 10^{-3}$  -დან  $10^{-2}$   $\text{წმ}^{-1}$  -მდე ინტერვალში. (იხ.მიმაგრებული ფაილი). რეოლოგიური მოდულები შერჩეული იქნა  $\omega = 10$   $\text{წმ}^{-1}$  სიდიდეზე და წარმოდგენილია სურათზე 1. სურათიდან ჩანს, რომ ნაწილაკების დიამეტრის ზრდა იწვევს რეოლოგიური მოდულების ზრდას, ხოლო მიკროემულსიის შემთხვევაში კი ადგილი აქვს საპირისპირო შედეგს. ამ ძალიან საინტერესო რეოლოგიური ქცევის განსჯაზე ჩვენ ვფოკუსირდებით ოდნავ მოგვიანებით, ამ ეტაპზე კი წარმოვადგენთ შედეგებს.

თიხის 30 და 80 ნმ-იანი ნაწილაკების შემცველი წყლის სუსპენზია უკვე იწყებს სიბლანტის მოდიფიკაციას. თუ შევადარებთ წყლის სიბლანტეს, რომელიც ტოლია  $10^{-3}$  პა.წმ შესაბამისი მოდული  $G'' = \omega\eta = 10^{-2}$  პა. სიბლანტის მოდიფიკატორები კი 1%-იან მცირე კონცენტრაციებზეც კი ახდენენ წყლის სიბლანტის მოდიფიცირებას, მარტივი გეომეტრიული თეორია კი ამ მცირე კონცენტრაციებზეც ვერ ვარაუდობს სიბლანტის 20-30 სიდიდით მატებას. უფრო გასაოცარია შედეგები დიდი დიამეტრის 140ნმ მქონე ნაწილაკების შემთხვევაში, სადაც სიბლანტის მატება არის

2000-ის ფარგლებში. 500ნმ დიამეტრის მქონე ნაწილაკები ჩანს, რომ კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე მოქმედებენ განსხვავებული გზით. ზოგადად (2.86) ფორმულა სიბლანტის მატებას რაღაცა დოზით ვარაუდობს, მაგრამ სიბლანტის მატების ის მასშტაბები, რაც ექსპერიმენტულად მივიღეთ, შეუძლებელია თეორიული გზით, ამ ფორმულიდან მივიღოთ.

მიკროემულსიების შემთხვევაში სიბლანტის შემცირება შეიძლება ავხსნათ ლუბრიკაციული [172,175] ეფექტის საშუალებით. ჩვენ წინა კვლევაში ვნახეთ, რომ დიდი დიამეტრის მქონე ნაწილაკები ხელს უწყობენ ლამელარული სტრუქტურის უფრო სრულყოფილად ჩამოყალიბებას. ეს თავისთავად ხელს უწყობს კომპლექსური სითხეების შემთხვევაში კომპლექსური სითხეების სხვადასხვა უბანის უფრო კარგად მოცურებას თიხის დიდი ზომის მქონე ნაწილაკის ზედაპირზე, რაც რეოლოგიური ექსპერიმენტული შედეგებითაც ჩანს (წითელი და ლურჯი დიაგრამები სურათზე 1). ამ ექსპერიმენტული შედეგების თეორიული მოდელი განხილული იქნება შედეგების განსჯაში.

ამგვარად, თიხის ნაწილაკებს აქვთ განსხვავებული ეფექტი სიბლანტეზე იმის და მიხედვით, ისინი დამატებული იქნებიან მარტივ თუ კომპლექსურ სითხეებზე. თიხის ნაწილაკების სიბლანტეზე გავლენა ასევე დამოკიდებულია ამ ნაწილაკების დიამეტრზე, რომელზეც ზემოთ ვისაუბრეთ. ეს არის საკმაოდ საინტერესო და ახალი თვისება, რომელიც აღმოაჩნდათ იმ ზომის თიხის ნაწილაკებს, რომლებიც ჩვენთვის იყო ხელმისაწვდომი.



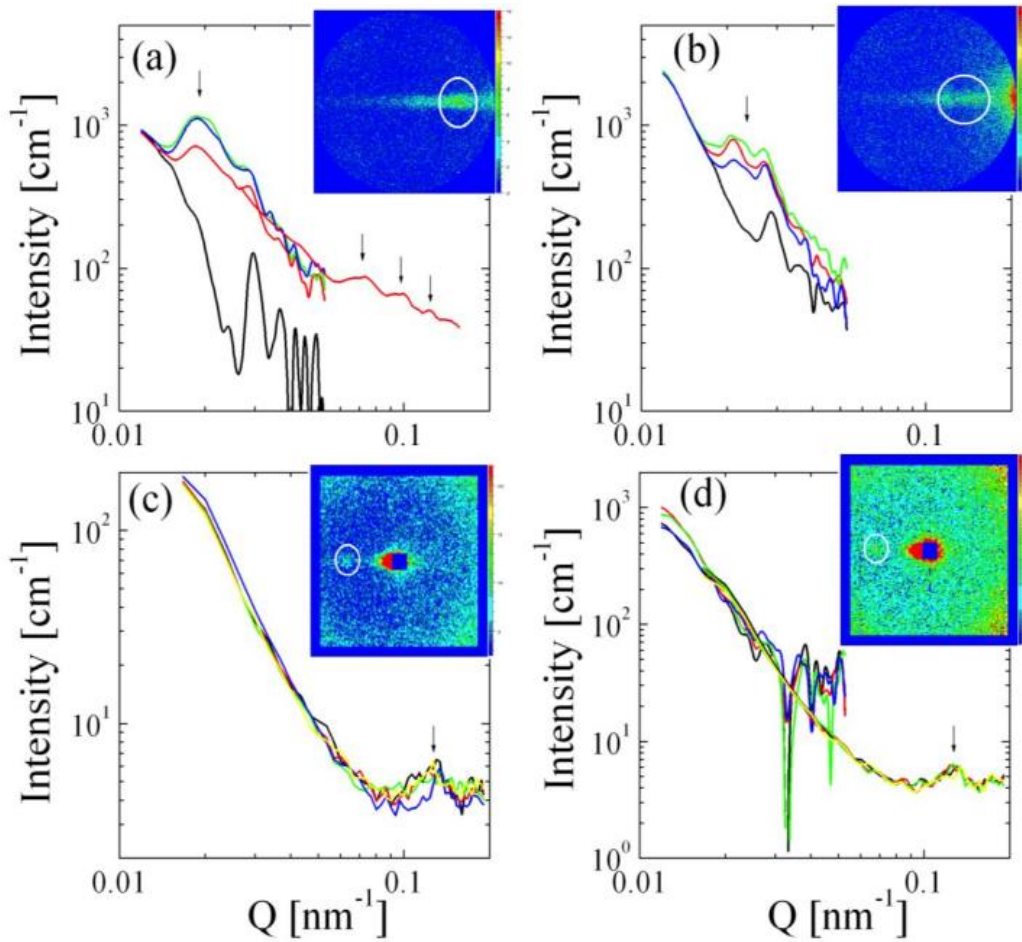
სურათი 1. სტორიჯ და ლუზ მოდული ნაწილაკების სხვადასხვა დიამეტრებზე თიხის ნაწილაკებიანი წყლისა და მიკროემულსიური სისტემებისთვის ( წითელი ხაზით არის წყლის სისტემა, ლურჯით მიკროემულსიური).

### 3.8.7. მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული შედეგები

რეოლოგიური ექსპერიმენტის შედეგების ახსნისთვის აუცილებელია ჩვენი სისტემის მიკროსტრუქტურაზე გვექნოდეს ნათელი წარმოდგენა. სწორედ ამ მიზნით მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტი იქნა ჩატარებული. სხვადასხვა ხსნარებში თიხის ნაწილაკების სტრუქტურის ფორმირების ძირითადი პრინციპი მეტნაკლებად ცნობილია [186,187]. ჩვენი საკვლევი სისტემის ზომები და შესაბამისი ტალღური ვექტორის სიდიდე  $Q$  შეგვიძლია გამოვთვალოთ მარტივი ფორმულებით. კერძოდ, ნაწილაკების ზომაზე წარმოდგენა შეგვიძლია შევიქმნათ  $l = t/\phi$  ფორმულით, ხოლო ექსპერიმენტში გამოსაყენებელი ტალღური ვექტორის სიდიდე ყოველთვის დამოკიდებულია ნაწილაკების ზომებზე და ამ კონკრეტულ შემთხვევაში ის შეგვიძლია გამოვთვალოთ შემდეგი ფორმულით  $Q = l^{-1}$ , ჩვენს შემთხვევაში კი რიცხობრივად არის  $10^{-2}\text{nm}^{-1}$  ფარგლებში. KWS1 გამოყენებულია, როგორც კლასიკური მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ინსტრუმენტი, რომელსაც ტალღური ვექტორის ამ სიდიდეებზე თავისუფლად შეუძლია მუშაობა  $Q = 10^{-2}\text{nm}^{-1}$ , ხოლო KWS3 ინსტრუმენტის შემთხვევაში, რომელიც არაა კლასიკური მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ინსტრუმენტი, შესაძლებელია ტალღური ვექტორის უფრო მცირე სიდიდეებზე მუშაობაც. ამ ხელსაწყოებიდან მიღებული შედეგები

მოცემულია სურათზე 2. ექსპერიმენტმა აჩვენა, რომ ადგილი აქვს ტანგენციალური გეომეტრიის რეფრექტივულ ეფექტს, რომელიც იყო გათვალისწინებული და კორექტირებული.

**სურათი 2.** მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული შედეგები თიხის სხვადასხვა სუსპენზირებული ნიმუშებიდან: a) LRD30-D2O, შავი ნოლი ძვრით, წითელი  $0.1\text{წმ}^{-1}$  ძვრით, მწვანე  $1\text{წმ}^{-1}$ , ცისფერი  $10\text{წმ}^{-1}$  ძვრით. b) MMT500-D2O, შავი ნოლი ძვრით, წითელი  $0.1\text{წმ}^{-1}$  ძვრით, მწვანე  $1\text{წმ}^{-1}$ , ცისფერი  $10\text{წმ}^{-1}$  ძვრით. c) LRD30-ბალკ კონტრასტ მიკროემულსია (მხოლოდ მძიმე წყალი), შავი ნოლი ძვრით, წითელი  $1\text{წმ}^{-1}$  ძვრით, მწვანე  $10\text{წმ}^{-1}$ , ცისფერი  $100\text{წმ}^{-1}$  ძვრით და  $0.1\text{წმ}^{-1}$  ყვითელი. d) MMT500-ბალკ კონტრასტ მიკროემულსია ( მხოლოდ მძიმე წყალი), შავი ნოლი ძვრით, წითელი  $1\text{წმ}^{-1}$  ძვრით, მწვანე  $10\text{წმ}^{-1}$ , ცისფერი  $100\text{წმ}^{-1}$  ძვრით და ყვითელი  $0.1\text{წმ}^{-1}$ . c და d დიაგრამების 2D დეტექტორის სურათი მიღებულია  $k_{\text{ws}}1$  ხელსაწყოს დეტექტორიდან 20 მ-ის მანძილზე, მრგვალი წრით აღნიშნული პიკები წარმოადგენენ ბრეგის პიკებს, ხოლო ზოგადად ისრებით ყველა დიაგრამა მითითებულია ბრეგის პიკების ადგილმდებარეობა.



წყალში გახსნილი თიხის ნაწილაკებისთვის ბრეგის პირველი პიკის დეტექტირება ხდება  $Q_{peak} = 0.02 \text{ nm}^{-1}$  პოზიციაზე, ხოლო მეორე ძალიან სუსტი პიკის იდენტიფიცირება შესაძლებელია  $Q_{peak} \approx 0.03 \text{ nm}^{-1}$ . გაზნევის ექსპერიმენტისას მიღებული ანიზოტროპული სურათი მიუთითებს იმაზე, რომ სისტემას გააჩნია მისთვის კომფორტული მომგებიანი განლაგება. სურათზე 2 გამოსახული დიაგრამიდან ჩანს, რომ ბოლო მცირე ინტენსივობის ბრეგის პიკი გამოჩენას იწყებს ჩვენს ნიმუშში მაშინ, როდესაც ძვრის სიჩქარე გვაქვს ნულის ტოლი. ამგვარად, ეს მიუთითებს იმაზე, რომ ჩვენს ნიმუშში არის რაღაც უბნები, სადაც ნაწილაკებს შორის განმეორებითი მანძილი არის მოკლე, მაგრამ ეს უბნები ჩვენი ნიმუშის სტრუქტურის უმნიშვნელო ნაწილს წარმოადგენს (სწორედ ამიტომ არის სიგნალი სუსტი) და შესაძლოა რომ მათ ფორმირებას ადგილი ჰქონდეს რეოლოგიური კიუვეტის კედელზე. LRD30 თიხის ნაწილაკებისთვის ჩვენ ვხედავთ, რომ გვაქვს უფრო მაღალი რიგის ბრეგის პიკები 3, 4, 5 ( მეორე რიგის ბრეგის პიკი, როგორც ხედავთ არის გამოტოვებული იმის გამო, რომ საბაზისო სიგნალი არის საკმაოდ მაღალი და ტალღური ვექტორის მაღალ სიდიდეზე, ეს სიგნალი განიცდის მკვეთრ

ვარდნას. ამ პარაზიტული გაბნევის და ამ გზით საბაზისო (ბეგრაუნდის) სიგნალის ზრდის ერთ-ერთი წყარო შეიძლება იყოს რეოლოგიური კიუვეტის კედლებიდან ნეიტრონების გაბნევა). ყოველი შემთხვევისთვის განმეორებითი მანძილი თიხის ნაწილაკებს შორის არის 300 ნმ, რომელიც გაცილებით დიდი სიდიდეა, რომელსაც ველოდით ოზილირებული თეფშისებრი ნაწილაკებისგან (100 ნმ). ამგვარად, ეს ნაწილაკები ხელს უწყობენ ტაქტოიდური სტრუქტურის ფორმირებას, სადაც დაახლოებით 3 თეფშისებრი ნაწილაკი გადაფარვს ერთმანეთს ნორმალური მიმართულებით. ეს პრინციპული შედეგი ანუ თიხის ნაწილაკების ამგვარი სტრუქტურის ფორმირების მიდრეკილება ადრეც იქნა აღწერილი ოდნავ განსხვავებული რიცხობრივი მონაცემებით [186]. რეგულარული თხევად-კრისტალური სტრუქტურის ფორმირებას ადგილი აქვს მაშინ, როდესაც სისტემაში ხდება ძვრის სიჩქარის ინიცირება.

მიკროემულსიაში გახსნილი თიხის ნაწილაკები, როგორც გამოსახულია სურათზე 2, იძლევა მკვეთრად განსხვავებულ სურათს. ბრეგის პიკი დეტექტირდება  $Q_{peak} \approx 0.13nm^{-1}$ , რომელიც იძლევა ინფორმაციას ნაწილაკების განმეორებით მანძილს შორის, რომელიც დაახლოებით 50 ნმ-ის ტოლია. ესაა იმ მანძილის ნახევარი, რომელიც გვქონდა ნავარაუდები თეფშისებრი ნაწილაკების განმეორებით მანძილზე. ბრეგის პიკი მიუთითებს ნაწილაკების ორიენტაციაზე მაშინ, როდესაც მიკროემულსიის კორელაციური პიკი არის იზოტროპული. ჩვენ ამ შედეგებით შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ აქ ადგილი აქვს სპეციფიური სტრუქტურის ფორმირებას, კერძოდ, თეფშისებრი ნაწილაკების ნაწილი ქმნის დამცავ ფენას იზოლირებული თეფშისებრი ნაწილაკებისთვის და აყალიბებს ჭადრაკის დაფის მსგავსი განმეორებად სტრუქტურას, რომელიც ორიენტირებულია ნორმალური მიმართულებით და ზედა ნაწილში აქვს ხვრელები. ელექტროსტატიკური განზიდვის დროს აღნიშნული სტრუქტურა იძლევა ყველაზე დიდ მანძილს ორ განმეორებად ნაწილაკს შორის. ამ სტრუქტურის ჩამოყალიბება ხდება ძვრის სიჩქარის გარეშე.

აქვე ვხედავთ ჩვენ ბრეგის პიკის ადგილმდებარეობის და ინტენსივობის ოდნავ ცვლილებას. ამ კონკრეტული ფაქტის ახსნა რთულია, რადგან ფონური სიგნალი საკმაოდ მაღალია ნიმუში სუსტი გაბნევის უნარის გამო. თუმცა შეიძლება ვთქვათ, რომ ბრეგის პიკის ადგილმდებარეობის ცვლილება მიუთითებს ნიმუშზე ძვრის სიჩქარის სიდიდის ცვლილების გავლენაზე და რომ აღნიშნულ ბრეგის პიკებს დარწმუნებით შეგვიძლია ვთქვათ, რომ განაპირობებს ჩვენი ნიმუში და არა რეოლოგიური კიუვეტის კედლებიდან რეფლექცია.

მიუხედავად ყველაფრისა, როგორც სურათზე 2 გამოსახული დიაგრამიდან ვხედავთ, ყველა სიგნალი არის საკმაოდ სუსტი, მაგრამ იდენტიფიცირებადი. წყლის სუსპენზიის შემთხვევაში ტაქტოიდური სტრუქტურა იწვევს გაბნევის



მოცულობის გაზრდას, მიკროემულსიების შემთხვევაში თეფშების მსგავსი ნაწილაკებისთვის მომგებიანია მიმდებარე პოზიცია ეკავოს დეიტერირებული წყლის მოლეკულა, რაც იწვევს დეიტერირებული მასალის სისქის ზრდას 20 ნმ-დე. ამგვარი კონფიგურაცია ვერ იდენტიფიცირდა, როდესაც დეიტერირებული ზეთის და წყლის ფაზა გვქონდა გამოყენებული მიკროემულსიაში. ამ სტრუქტურის იდენტიფიცირება შესაძლებელია მხოლოდ მაშინ, როდესაც მხოლოდ დეიტერირებული წყლის მოლეკულა არის გამოყენებული მიკროემულსიური სისტემის მომზადებისთვის.

### 3.8.8. რეოლოგიური ექსპერიმენტული შედეგების განსჯა

თიხის ნაწილაკების სტრუქტურა სხვადასხვა ხსნარებში დახასიათებულია მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, რაც აადვილებს რეოლოგიური შედეგების განსჯას. წყალხსნარებში თიხის ნაწილაკები ტაქტოიდური მემბრანის მსგავსი სტრუქტურის ფორმირებას უწყობენ ხელს, რომლის სისქე 3 ნმ-ია, ხოლო განმეორებითი მანძილი 300 ნმ (განმეორებითი მანძილში იგულისხმება ის, რომ ჩვენ სისტემაში ადგილი აქვს ტაქტოიდური სტრუქტურის მქონე უნების ფორმირებას, ეს უბნები გარკვეული კანონზომიერებით მეორდებიან სწორედ ამ განმეორებად უბნებს შორის მანძილი არის 300 ნმ ჩვენს შემთხვევაში). თიხის ნაწილაკები მიკროემულსიურ სისტემაში ფორმირდება, როგორც მრავალი ხვრელის მქონე მემბრანული სტრუქტურა, რომლის სისქე არის 1 ნმ და განმეორებითი მანძილი არის 50ნმ. ორივე სტრუქტურული ტიპისთვის ჩვენ გამოვიყენებთ მოდიფიცირებულ ლამელურ მოდელს და ფორმულებს 2.89-2.91. ცხრილში 2 წარმოადგენილია გამოყენებული პარამეტრები, რომლებიც კარგად აღწერენ სურათზე 1 მოცემულ ექსპერიმენტულ შედეგებს. ძირითადი პარამეტრებიდან ერთ-ერთია  $k=2\pi/D$  სიდიდე, რომელიც იცვლება თეფშისებრი თიხის ნაწილაკების დიამეტრის ცვლილების გამო. პრეფაქტორი განსაზღვრულია სტანდარტული ნიმუშის რეოლოგიური მოდულის სიდიდან და სტანდარტული თეფშისებრი ნაწილაკების სისქიდან. წყლის სისტემის შემთხვევაში სტანდარტული რეოლოგიური მოდული  $G''=\omega\eta=0.01\text{Pa}$  მიღებულია წყლის სიბლანტისგან თეფშისებრი ნაწილაკის უმცირესი დიამეტრის სიდიდეზე. მიკროემულსიური სისტემის დიდი პრეფაქტორის სიდიდე დაკავშირებულია  $d_{E,2}$  სიდიდესთან, რომელიც წარმოადგენს მიკროემულსიური სისტემის განმეორებად მანძილს და იზრდება თიხის ნაწილაკის დიამეტრის ზრდისას. თიხის ნაწილაკების მიერ ფორმირებული მემბრანის მოლუნვის პარამეტრი  $\kappa_1$  განისაზღვრება შემდეგი ფორმულით:  $\lambda = D = t \exp(4\pi\kappa_1)$ . როგორც ვხედავთ მემბრანის მოლუნვის სიდიდე დამოკიდებულია ნაწილაკების დიამეტრზე  $D$  და მემბრანის სისქეზე  $t$  [177]. ძვრის (გადანაცვლების, ოფსეტური) ენერგია

ენერგეტიკულ  $E_1$  დონეზე დაკავშირებულია  $d_{E,1}$  სიდიდის სისქესთან, რომელიც ინდივიდუალური ფირფიტისებრი თიხის ნაწილაკებისთვის 1 ნმ-ის ტოლია. ონსინის ტენსორისგან განსხვავებით თიხის ნაწილაკების მემბრანის ფლუქტუაცია დაკავშირებულია განმეორებით მანძილზე, რომელიც განისაზღვრა მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით. თიხის მემბრანული სტრუქტურისთვის დამახასიათებელი ხვრელები დაკავშირებულია იმასთან, რომ ყოველ მეოთხე მეზობელ ფირფიტისებურ თიხის ნაწილაკებში გამოტოვებულია ფირფიტისებრი თიხის ნაწილაკები  $L_1 = (\sqrt{2} - 1)D$  ან ჭადრაკისებრ დაფაზე რაღაც ადგილებში არის სიცარიელები  $L_1 = D$ . სკრინინგის მეთოდი გამოყენებული იყო ზუსტად ისე, როგორც ეს ჭადრაკის დაფის მსგავსი მემბრანული სისტემებისთვის გამოიყენება, ტაქტოიდური სტრუქტურისთვის კი სკრინინგი იქნა 5-ჯერ გაზრდილი გამომდინარე იქიდან, რომ ამ სტრუქტურის ფორმირებისას ადგილი აქვს ზედაპირული ფართობის ზრდას.

**ცხრილი 2:** რეოლოგიური ექსპერიმენტული შედეგების აღმწერი პარამეტრები

პარამეტრები	$G'$ (წყალი)	$G''$ (წყალი)	$G'$ ( $\mu E$ )	$G''$ ( $\mu E$ )
პრეფაქტორი	0.061 Pa	0.01 Pa	$4 \times 10^5$ Pa	$1.6 \times 10^5$ Pa
k	$2\pi/D$	$2\pi/D$	$2\pi/D$	$2\pi/D$
$\kappa_1$	$\ln(D/3nm)/(4\pi)$	$\ln(D/3nm)/(4\pi)$	$\ln(D/1nm)/(4\pi)$	$\ln(D/1nm)/(4\pi)$
$d_{E,1}$	1nm	1nm	1nm	1nm
$d_1$	300nm	300nm	50nm	50nm
$L_1$	$(\sqrt{2}-1) \times D$	$(\sqrt{2}-1) \times D$	D	D
სკრინინგი 1	ტალის სიგრძე $\times 5$	ტალის სიგრძე $\times 5$	ნორმალური	ნორმალური
$\kappa_2$	1	1	1	1
$d_{E,2}$	0.3nm	0.3nm	20nm	20nm
$d_2$	მემბრ პარამეტრები გამოტოვებულია	მემბრ პარამეტრები გამოტოვებულია	10nm	10nm
$L_2$			D	D

წყლის შესადარებელი ნიმუში მარტივად იქნა მოდელირებული გადანაცვლების ენერჯის საშუალებით  $d_{E,2}^4$ , რომელიც თავისთავად დაკავშირებულია მოლეკულურ ზომასთან, ჩვენ შემთხვევაში ეს არის 0.3ნმ. მიკროემულსიის შესადარებელი ნიმუში ავლწერეთ ელასტიურობის ანუ მოლუნვის პარამეტრით [br1], გადანაცვლების ენერჯია მიკროემულსიების შემთხვევაში დაკავშირებულია მიკროემულსიის განმეორებად მანძილზე, რომელიც არის 20 ნმ-ის ტოლი და ასევე დაკავშირებულია მემბრანის ტიპზე ყოველი ზედაპირულად აქტიური ნივთიერების მემბრანული სტრუქტურისთვის. ხვრელები, რომელიც დამახასიათებელია ჩვენი მემბრანული სტრუქტურისთვის, ამ მოცემულობითაა განხილული.

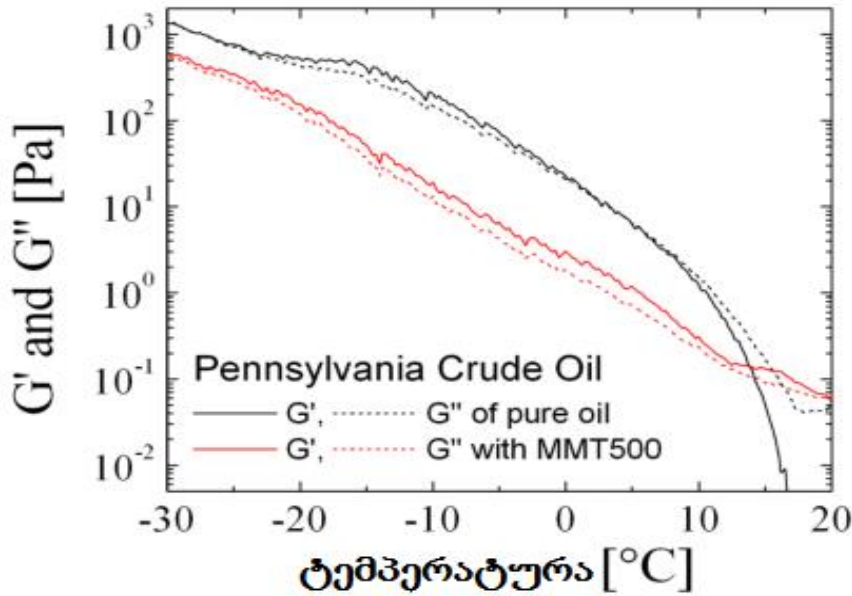
ჩვენი მოდელის ძირითადი შედეგი გახლავთ ის, რომ თიხის ნაწილაკები ახდენენ ეფექტური მემბრანული სტრუქტურის ფორმირებას, რომელიც გავლენას ახდენს საკვლევი ნიმუშების რეოლოგიურ ქცევაზე. შესადარებელი ნიმუშები ზოგ შემთხვევაში მარტივი სითხეებია, ხოლო ზოგ შემთხვევაში არის კომპლექსური სითხეები. აგრეთვე გვაქვს მეორე ფაქტორი, რომელიც გავლენას ახდენს ნიმუშის რეოლოგიურ ქცევაზე. კერძოდ, მარტივი სითხეების შემთხვევაში თიხის ფირფიტისებრი ნაწილაკების დიამეტრის ზრდისას სითხის სიბლანტე იზრდება, ხოლო კომპლექსური სითხეების შემთხვევაში თიხის ფირფიტისებრი ნაწილაკების ზრდისას სიბლანტე მცირდება. მარტივი სითხეების სიბლანტის ზრდა თიხის ფირფიტისებრი ნაწილაკების დიამეტრის ზრდისას განპირობებულია იმით, რომ მემბრანა ხდება უფრო ძლიერი. ყოველ შემთხვევაში სიბლანტის ზრდა ორივე მოყვანილ სიტუაციაში არის უზარმაზარი, რაც ძალიან საინტერესოა პრაქტიკული გამოყენებისთვის. ამ პროცესის აღწერა იზოლირებული ნაწილაკების მარტივი გეომეტრიული თეორიით შეუძლებელია, რადგან აქ ადგილი აქვს კოლექტიურ ურთიერთქმედებებს.

მარტივ სითხეებზე 500 ნმ მქონე თიხის ფირფიტისებრი ნაწილაკების დამატება უკვე აღარ იწვევს სიბლანტის მატებას და ასეთი ნიმუშის სიბლანტე მეტნაკლებად წყლის შესადარებელი მოლეკულის სიბლანტის მსგავსია. როგორც ვხედავთ ამ დიამეტრის მქონე თიხის ნაწილაკებზე სიბლანტის მატების ჩვენს მიერ აღწერილი მექანიზმი არ მუშაობს ანუ ყოველთვის ნაწილაკების დიამეტრის ზრდა არ იწვევს მარტივი სითხეების სიბლანტის მატებას. როგორც ექსპერიმენტული შედეგებიდან ჩანს, ჩვენს შემთხვევაში მარტივი სითხეების სიბლანტე იზრდება 140 ნმ დიამეტრის მქონე ნაწილაკებამდე, ხოლო უკვე ნაწილაკის დიამეტრის შემდგომი ზრდა 500 ნმ იწვევს სიბლანტის ვარდნას და ის მეტნაკლებად უტოლდება წყლის შესადარებელი ნიმუშის სიბლანტეს ( წყლის შესადარებელი ნიმუში არის თიხის ნაწილაკების დამატების გარეშე, ანუ გვაქვს წყლის მოლეკულა ყოველგვარი დამატების გარეშე შემდეგ ვამატებთ თიხის ნაწილაკს ვა ვაფიქსირებთ სიბლანტის ცვლილებას). ეს ყველაფერი შეგვიძლია დავაკავშიროთ სკრინინგის მოდიფიკაციასთან ანუ თუ მემბრანის გასწვრივ კორელაციური სიგრძე ბევრად აღემატება ტაქტოიდური სტრუქტურის განმეორებად მანძილს, მაშინ სითხის ქცევის მართვა და კონტროლი ვერ ხერხდება ტაქტოიდური სტრუქტურის საშუალებით, რის შედეგადაც სისტემა ემსგავსება კომპლექსურ სითხეებს მემბრანის დიდი კორელაციური სიგრძით და სწორედ ამ კორელაციური სიგრძით ხდება სითხეების ქცევის წარმართვა, რაც განაპირობებს სიბლანტის შემცირებას კომპლექსური სისტემების მსგავსად.

### 3.8.9. ნედლი ნავთობიდან მიღებული ექსპერიმენტული შედეგები

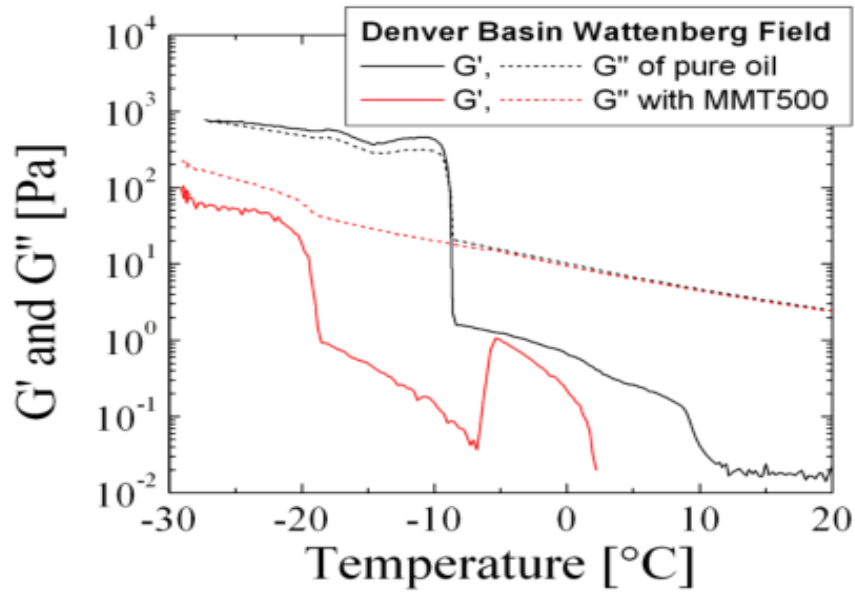
ნედლი ნავთობის შემთხვევაში ჩვენ ვიცით რომ ის შედგება უამრავი სხვადასხვა ჯგუფის მოლეკულებისგან კერძოდ მის შემადგენლობაში ჩვენ გვხდება ნივთიერებების განსხვავებული კლასები. კერძოდ, არომატული ჯგუფი და ჩვეულებრივი მარტივი ნახშირწყალბადური ჯგუფი. ზედაპირულად აქტიური მოლეკულის მსგავსად, ნედლი ნავთობის შემთხვევაშიც, როგორც ვხედავთ, ადგილი აქვს ორი ერთმანეთისგან განსხვავებული მოლეკულური ჯგუფების არსებობას. ნედლი ნავთობის შემადგენლობაში არსებობს სხვადასხვა მოლეკულური უბნები და ამ ფორმით არიან ისინი კომპლექსურ სისტემად ფორმირებული. თიხის ნაწილაკებით ნედლი ნავთობის გარკვეული უბნები ახდენენ ურთიერთქმედებას, რაც მათი სტრუქტურის მოდიფიცირების შანსებს იძლევა. სწორედ ამ მოტივაციით ჩვენ გამოვცადეთ სხვადასხვა ნედლი ნავთობის ნიმუშები, რომლებიც კომერციულად ხელმისაწვდომი იყო და მათზე დავამატეთ 500 ნმ დიამეტრის მქონე თიხის ნაწილაკები. ამ ექსპერიმენტული სტრატეგიით ორი ძალიან პოზიტიური შედეგი იყო მიღებული პენსილვანიის და კოლორადოს ნედლი ნავთობიდან, რომელიც წარმოდგენილი გვაქვს სურათებზე 3 და 4. ოთახის ტემპერატურაზე პირველმა ნავთობმა გამოავლინა მარტივი სითხეებისთვის დამახასიათებელი ქცევა, სადაც G' მოდულის სიდიდე არის უმნიშვნელო და თიხის მოლეკულები იწვევენ ნიმუშის სიბლანტის ზრდას. 14°C-დან იწყება კომპლექსური სისტემის ფორმირება, რის შედეგადაც G' და G'' უტოლდება სტანდარტული ანუ თიხის ნაწილაკების დამატების გარეშე მყოფი ნედლი ნავთობის შესაბამის G' და G'' სიდიდეებს. საბოლოოდ კი თიხის ნაწილაკები განაპირობებენ ნედლი ნავთობის სიბლანტის შემცირებას. ზოგ ტემპერატურებზე სტანდარტულ (შესადარებელ) ნედლ ნავთობთან შედარებით თიხის ნაწილაკების შემცველი ნავთობის სიბლანტის მნიშვნელობა 10-ჯერ უფრო ნაკლებია.

სურათი 3. სხვადასხვა ტემპერატურაზე სტორიჯ(Storage) და ლუზ(loss) მოდული MMT 500 თიხის ნაწილაკის სუსპენზიისთვის პენსილვანიის ნედლ ნავთობში.



კოლორადოს ნავთობი, როგორც ჩანს 8°C-ის ზევით ავლენს მარტივი სითხეების მსგავს რეოლოგიურ ქცევას. აქვე ჩანს, რომ დაახლოებით 10°C-ზე ადგილი აქვს ფაზურ გადასვლას. თიხის ნაწილაკებთან ერთად ძირითადი ფაზური გადასვლა გადანაცვლებულია -8°C-დან -20°C-მდე. აქვე ჩანს რომ 0°C-დან -7°C-მდე ადგილი აქვს შუალედური ფაზური სისტემის ფიქსირებას, რომელზეც ჩვენ კომენტირება არ შეგვიძლია. როდესაც ეს ნედლი ნავთობი გარდაიქმნება კომპლექსურ სითხედ - 8°C, მაშინ თიხის ნაწილაკები ახერხებენ სიბლანტის შემცირებას 10-ჯერ, ხოლო როგორც დიაგრამიდან ჩანს, ზოგიერთ ტემპერატურულ დიაპაზონში სიბლანტე მცირდება 5-ჯერ, რაც საკმაოდ დიდი რიცხვებია ინდუსტრიული პრაქტიკისთვის.

სურათი 4. სტორიჯ და ლუზ მოდული MMT 500 თიხის ნაწილაკების სუსპენზიისთვის კოლორადოს ნავთობში სხვადასხვა ტემპერატურული დიაპაზონით.



პირველი მაგალითის შემთხვევაში, როდესაც კლასიკური მიკროემულსიური სისტემა გვქონდა ადებული, როგორც კომპლექსური სითხეების მოდელი, მისი შემადგენელი კომპონენტების სიბლანტე მეტნაკლებად ერთმანეთის ტოლი იყო. ასეთი სისტემის სიბლანტის ოდნავი შემცირება გამოწვეული იყო მასზე თიხის ნაწილაკების დამატებით. ნელდი ნავთობის შემთხვევაში, როდესაც მისი შემადგენელი კომპონენტების სიბლანტეები ერთმანეთისგან მკვეთრად განსხვავდება, თიხის ნაწილაკების დამატება იწვევს სისტემაში ლამელარული უბნების განლაგების ცვლილებას, რაც საბოლოოდ განაპირობებს ამ კომპლექსური სისტემის სიბლანტის მკვეთრ შემცირებას. იდეალური ლამელარული სისტემების სიბლანტე შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგი ფორმულით:

$$(2.74) \quad \eta_{liq}^{-1} = \sum \frac{\phi_i}{\eta_{bare,i}}$$

ხოლო აბსოლუტურად მოუწესრიგებელი სისტემის სიბლანტე შეგვიძლია გამოვსახოთ ჰეურისტიკული ფორმულის გამოყენებით.

$$(2.75) \quad \eta_{liq} = \alpha \prod_i \eta_{bare,i}^{\phi_i}$$

ჰეურისტიკული ფაქტორი  $\alpha$  ძალიან ბევრი სისტემისთვის მერყეობს 1-დან 10-მდე ინტერვალში. მსგავსი ფორმულის მიღება შესაძლებელია ასევე კომპლექსური მოდულისთვის.

ჩვენი სისტემის ოდნავ განსხვავებული გზით გასაშუალოება შეიძლება გაგებული იქნას მარტივი მაგალითით. ჩვენ გვაქვს სიმეტრიული ორფაზიანი სისტემა ( $\phi_i=0.5$ )

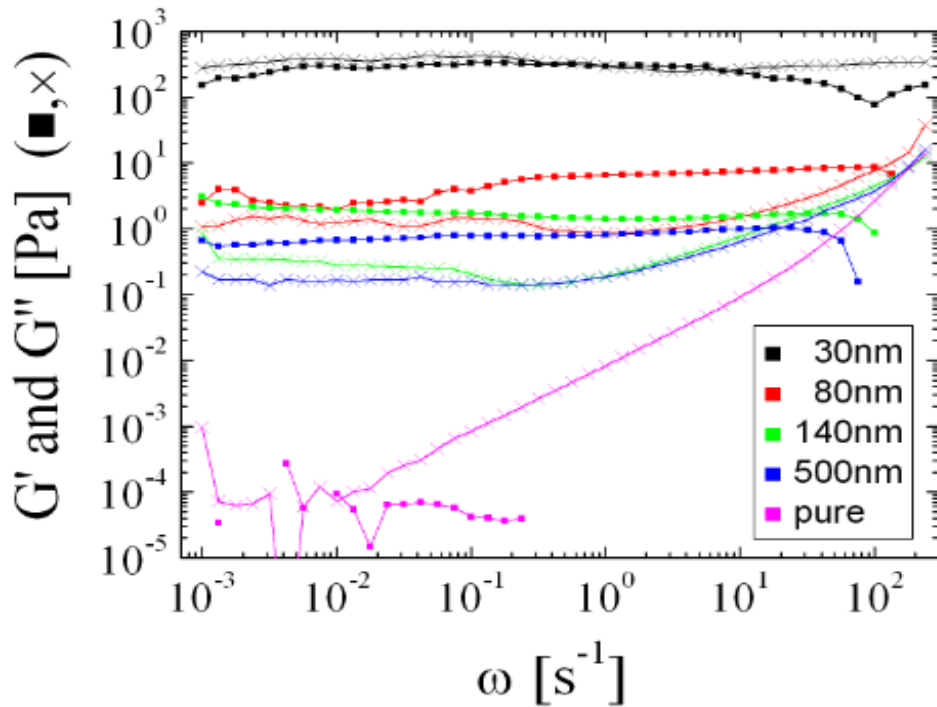
სიბლანტეებით 10 და 100 ო. მოუწესრიგებლ სისტემას აქვს სიბლანტე 10α ო მაშინ, როცა მოწესრიგებული სისტემის სიბლანტე არის 1.98 ო.

### **3.8.10. დამატებითი რეოლოგიური მონაცემები კომპლექსური სითხეების სიბლანტის ცვლილებაზე ნანონაწილაკების დამატებისას.**

სურათებზე ა და ბ ნაჩვენებია სრული რეოლოგიური ექსპერიმენტული შედეგები. როგორც კი ხდება სისტემაზე თიხის ნანონაწილაკების დამატება რეოლოგიური მრუდები იღებს ბრტყელ ფორმას რაც მიუთითებს გელისთვის დამახასიათებელ ქცევაზე. როგორც ჩვენი დაკვირვებებიდან ჩანს სიხშირის ზრდისას ადგილი აქვს კოუტის რეოლოგიური ცილინდრის ინერციის ზრდას რაც იწვევს ნიმუშიდან დამოუკიდებლად რეოლოგიური მოდულების ზრდას. სწორედ ამ მიზეზის გამო ჩვენ გადავწყვიტეთ ჩვენი ექსპერიმენტული შედეგები წარმოგვედგინა  $\omega = 10 \text{წმ}^{-1}$  სიხშირეზე. MMT500 თიხის ნაწილაკების და წყლის სისტემის რეოლოგიური ქცევა ოდნავ განსხვავებულია როგორც ექსპერიმენტიდან ჩანს დაბალ სიხშირეებზე რეოლოგიური მოდულები არის მაღალი ვიდრე საშუალო და მაღალ სიხშირეებზე. რაშიც წვლილი მიუძღვის ბროუნის მოძრაობას, რომელიც ანგრევს ამ სისტემებისთვის დამახასიათებელი რეოლოგიური ქცევის განმპირობებელ სტრუქტურას.

მიკროემულსიური სისტემებისთვის ნათლად ჩანს რომ თიხის ნაწილაკების დიამეტრის ზრდისას მცირდება რეოლოგიური მოდულები. სუფთა( დანამატების გარეშე) მიკროემულსიურმა სისტემამ  $\omega > 10 \text{წმ}^{-2}$  სიხშირეებზე გვანახა ნიუტონისეული სითხეებისთვის დამახასიათებელი ქცევა. დაბალ სიხშირეებზე კი ადგილი აქვს მიკროემულსიური სტრუქტურის აღდგენას და აგრეთვე ადგილი აქვს შესაბამისი რეოლოგიური სურათის მიღებას.

სურათი ა. სხვადასხვა სიხშირეზე წყალი-თიხის სუსპენზიის რეოლოგიური დიაგრამა. გამოყენებული გვერდიანი თიხის 4 განსხვავებული ნაწილაკის ზომა.



### 3.8.11. დასკვნები, თავი 3.8-ისთვის.

ჩატარებულ ექსპერიმენტებში ნედლმა ნავთობმა გამოავლინა კომპლექსური სითხისთვის დამახასიათებელი ქცევა. თიხის ნაწილაკების დამატება ამცირებს ამ სისტემაში ლამელარულ განლაგებას, რითაც შეგვიძლია ავხსნათ ასეთი სხვაობა ნედლი ნავთობის და თიხის შემცველი ნედლი ნავთობის სიბლანტეებს შორის.

ამგვარად, შეგვიძლია დავასკვნათ, რომ დიდი ზომის თიხის ნაწილაკები ხელს უწყობენ კომპლექსური სითხეების სიბლანტის შემცირებას. კომპლექსურ სითხეების მოდელად შესაძლებელია მიკროემულსიების გამოყენება, რათა გარკვეული წარმოდგენები შევიქმნათ უფრო ფართოდ გამოყენებული კომპლექსური სისტემების ქცევაზე.

### 3.9. მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდი, როგორც ახალი შესაძლებლობა ტრიბოლოგიური მექანიზმის ნაწილაკებზე დასახასიათებლად

ჩვენ ამ თავში წარმოგიდგინთ მოდელური უჯრედული მემბრანის დინამიკურ თვისებებს, რომელიც გაზომილი იქნა ფოსფოლიპიდური მემბრანის ფაზათაშორის



ზედაპირთან ახლოს. ამ ექსპერიმენტში ჩვენ ნიმუშად გვაქვს ფოსფოლიპიდური მემბრანა დაფენილი სილიკონის მყარ ბლოკზე. ამ ნიმუშში ჩვენ შევძელით გაგვეზომა ფოსფოლიპიდის სხვადასხვა ფენების ლოკალური ურთიერთქმედება და ხახუნის მახასიათებელი პარამეტრები მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპის გამოყენებით, სადაც მიღებული (ევანესცენცული) ტალღები იძლევა საშუალებას დაფიქსირდეს ფოსფოლიპიდის ფლუქტუაციები სხვადასხვა ფენებს შორის გამყოფ ზედაპირზე. კვლევის ამ მეთოდით შესაძლებელია დავაფიქსიროთ ნანომეტრის ზომების მქონე მოლეკულები, ხოლო ენერგეტიკული თვალსაზრისით ეს მეთოდი იძლევა საშუალებას დავაფიქსიროთ ისეთი მოლეკულური ფლუქტუაციები, რომლებიც მდებარეობს მიკროელექტონვოლტის რეგიონში. ნეიტრონული რეზონატორის გამოყენება გვაძლევს საშუალებას ნეიტრონების ინტენსივობა გავზარდოთ რამოდენიმე მაგნიტუდით. ექსპერიმენტში გამოვლენილ იქნა ფოსფოლიპიდური მემბრანის ადგენების უბნები, რომელიც შესაძლებელი გახდა მხოლოდ ამ მეთოდის გამოყენებისას და ისინი დეტექტირებული არ იყო სხვა ექსპერიმენტული მეთოდით. ჩვენ ვვარაუდობთ, რომ ენერჯის ტალღოვანი ტრანსპორტი ამ ენერჯის ფოსფოლიპიდური მემბრანის მთელ მოცულობაზე განაწილებას ხდის შესაძლებელს და ამ გზით მის სტაბილირებას ახდენს. ჩვენ მიერ შემოთავაზებული კვლევის ახალი მეთოდი იძლევა შესაძლებლობას, რომ შევიქმნათ წარმოდგენა ბიოლოგიური მემბრანების ვისკოელასტიურ თვისებებზე ნეიტრონების გამოყენებით. ჩვენს მიერ შემუშავებული კვლევის ამ ახალი მეთოდით ბიოლოგიური მემბრანის ჩვენთვის უცნობი თვისებების ფიქსირება და დეტექტირება გახდა შესაძლებელი, რაც მეტყველებს აღნიშნული მეთოდის კონკურენტუნარიანობაზე ტრიბოლოგიური თვისებებისა და მექანიზმების შესასწავლად ნანოდონეზე.

ბიოლოგიური და სამედიცინო მეცნიერებისთვის ძალიან მნიშვნელოვანია ბიოლოგიური მოლეკულების რეოლოგიური თვისებების გაგება და ასევე ამ მოლეკულების მრავალფენოვანი სისტემების ფაზათაშორის ზედაპირებზე (ინტერფეისებზე) ხახუნის პროცესის მექანიზმების ფუნდამენტური გააზრება [189]. მსგავსი ცოდნა იძლევა პრაქტიკული პრობლემების უკეთ გადაჭრის შესაძლებლობას, მაგალითად: მემბრანების დიფუზიის პროცესი წამლების გადატანისას [190], ან ზოგადად მემბრანების გამტარუნარიანობა [191] დამოკიდებულია მათ რეოლოგიურ თვისებებზე და ამ მემბრანის მრავალფენოვანი სისტემის ფენების ზედაპირებს შორის ხახუნის თავისებურებებზე. უჯრედული მემბრანის ქცევასა და ფოსფოლიპიდური მოდელური მემბრანას შორის მსგავსება შემოთავაზებული იქნა ტანაკას მიერ [192]. მსგავსი სისტემების დასახასიათებლად გამოყენებული იქნა უამრავი კვლევის მეთოდი, მათ შორის სინათლის გაბნევის მეთოდი [192], ატომური ძალის მიკროსკოპი [193], რენტგენის სხივების გაბნევის

მეთოდი[194-199], ისევე როგორც ნეიტრონული გაბნევის ელასტიური[199, 201] და არაელასტიური მეთოდი[197, 202]. ზოგადი მიმოხილვა ფოსფოლიპიდების კვლევაში გამოყენებული ნეიტრონული გაბნევის მეთოდების შესახებ წარმოდგენილი იქნა ფრაგნეტოს და რეინშტოდტერის მიერ[203], ხოლო სალდიტი ფოკუსირდა კვლევის ამ სფეროში რენტგენის სხივების გაბნევის მეთოდის მიმოხილვაზე[199]. მრავალფენოვანი ფოსფოლიპიდური მემბრანული სისტემის ნეიტრონული სპინ-ექო სპექტროსკოპიით დახასიათება შემოგვთავაზა რეინშტოდტერმა[204]. ჩვენს მიერ შემუშავებულია მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული სპინ-ექო სპექტროსკოპიის კვლევის ახალი მეთოდი, რომელიც როგორც ბიოლოგიური, ასევე კომპლექსური სისტემების ზედაპირზე მყოფი მოლეკულების დინამიკის და ფლუქტუაციების შესწავლის საშუალებას იძლევა. ჩვენს მიერ გამოყენებულია ფოსფოლიპიდური მემბრანა, ხოლო გამხსნელად გამოვიყენეთ დეიტერირებული წყალი, რამაც მოგვცა შესაძლებლობა, რომ ჩვენი ანალიზური სიგნალის საბაზისო სიგნალი (ფონი, ბექგრაუნდი) ყოფილიყო ძალიან მცირე, რაც კარგი საშუალებაა მემბრანის ზედაპირზე მყოფი მოლეკულების დინამიკის ფიქსაციისთვის. მეთოდის ზოგადი პრინციპი სინათლის მილევადი (ევანესცენტული) გაბნევის [205, 206] მსგავსია, ნეიტრონების შემთხვევაში გვაქვს უფრო მცირე სიგრძეებზე და უფრო მოკლე დროის ინტერვალებში მიმდინარე პროცესების ფიქსაციის შესაძლებლობა, რაც განპირობებულია იმით, რომ სინათლე ნივთიერებასთან ურთიერთქმედებს სხვანაირად, ხოლო ნეიტრონი სხვანაირად. მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიის მეთოდი ჩვენი ჯგუფის მიერ ადრეც იქნა გამოყენებული [207]. ამ კონკრეტული ექსპერიმენტისას ნეიტრონული რეზონატორის გამოყენებამ უფრო მეტი ნეიტრონების დეტექტირების და უფრო კარგი სტატისტიკის მქონე საანალიზო სიგნალების შესაძლებლობა მოგვცა, რამაც განაპირობა ის, რომ პირველად ჩვენს ექსპერიმენტში ტალღური ვექტორის Q-ს საშუალებით განვასხვავეთ ზედაპირზე მყოფი და ნიმუშის შიგნით მყოფი მოლეკულები ერთმანეთისგან. აღნიშნულ ექსპერიმენტში გავზომეთ მემბრანის შიგა სიბლანტე და კუმშვადობა სილიკონი-წყლის ზედაპირზე დაფენილი ფოსფოლიპიდური მემბრანისთვის. ნეიტრონულმა რეზონატორმა მოგვცა შესაძლებლობა, რომ მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიით დაგვეფიქსირებინა თერმული ფლუქტუაციები სილიკონის მყარ ზედაპირზე დაფენილი ფოსფოლიპიდური მოლეკულისთვის. მრავალფენოვანი ( ტიტანიუმი- პლატინიუმი) სტრუქტურის მქონე ნეიტრონული რეზონატორი აძლიერებს მილევად ტალღებს ნიმუშის ზედაპირზე, რაც ლიმიტირებული საკვლევი ნიმუშის გამხსნევი მოცულობიდან (0.1მკლ) იძლევა გაბნეული ნეიტრონების ინტენსივობის გაზრდის საშუალებას. აღნიშნული გვაძლევს საშუალებას, რომ გვქონდეს წვდომა უჯრედული მემბრანის იმ თვისებებზე და ქცევის ფიქსაციაზე, რომელიც კვლევის ჩვენს მიერ შემოთავაზებულ მეთოდად შეუძლებელი იყო. კვლევის აღნიშნული მეთოდით

გამოვიყენეთ ფოსფოლიპიდის მოდელური უჯრედული მემბრანის მოლეკულის დახასიათებისას. ექსპერიმენტისას დეტექტირებული იქნა მოლეკულის ზედაპირული რეჟიმი, რომელიც კვლევის სხვა მეთოდებით ვერ ფიქსირდება. მოცემული კონკრეტული ფოსფოლიპიდური მემბრანის ზედაპირული სტრუქტურა ადრეც იქნა შესწავლილი[86], საიდანაც ჩანს, რომ ფოსფოლიპიდი ახდენს მრავალფენოვანი სტრუქტურის ფორმირებას მემბრანის ზედაპირთან ახლოს. ჩვენ მიერ შემოთავაზებული ახალი ძალიან იმედის მომცემი მეთოდი მოლეკულების ზედაპირზე მყოფი ატომების დინამიკის და ფლუქტუაციების დაკვირვების საშუალებას იძლევა, რაც ძალიან მნიშვნელოვანია ბიო-სამედიცინო პრაქტიკისთვის, რადგან ბიოლოგიური მოლეკულების თვისებები განპირობებულია მათი სტრუქტურით და ამ სტრუქტურაში მყოფი მოლეკულების ფლუქტუაციებითა და თერმული მოძრაობებით.

### 3.9.1. მეთოდი

### 3.9.2. ექსპერიმენტული დეტალები.

ნეიტრონული სპინ-ექო სპექტროსკოპული ექსპერიმენტი ჩატარებული იქნა Spallation Neutron Source SNS Oak Ridge, USA. ამ კვლევით ცენტრში არსებული ნეიტრონულ სპინ-ექო სპექტრომეტრზე ჩვენ შეგვიძლია ძალიან მცირე ენერგეტიკული ცვლილებების დაფიქსირება, ხელსაწყო მგრძობელობა ნიმუშის ენერგეტიკულ ცვლილებებზე არის მსოფლიოში ერთ-ერთი ყველაზე მაღალი. ხელსაწყო ზომავს ნორმალიზებულ დროის კორელაციის ფუნქციას reciprocal სივრცეში  $S(q, \tau)$ . ხელსაწყო იყენებს პოლარიზებულ ნეიტრონებს.

ხელსაწყო მაღალი მგრძობელობა მიიღწევა ნეიტრონების სიხშირის კოდირებით გაზნევამდე და გაზნევის შემდეგ. მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული სპინ-ექო ექსპერიმენტში გამოყენებული ნიმუშის მოსათავსებელი სისტემა ჩვენი ჯგუფის მიერ ნეიტრონულ რეფლექტომეტრული ექსპერიმენტისას გამოყენებული სისტემის მსგავსია. ინიცირებული ნეიტრონების ნაკადი ეცემა სილიკონის ბლოკს და მასზე დაფენილ ჩვენი საკვლევი ნიმუშის ფაზათა გამყოფ ზედაპირს (ინტერფეისს), სადაც დაცემის კუთხე ამ ზედაპირზე არის კრიტიკულ კუთხეზე გაცილებით ნაკლები, რათა ადგილი ქონდეს ტოტალურ არეკვლას (რეფლექციას). ასეთ შემთხვევაში მხოლოდ მიღევადი (ევანესცენციული) ტალღები ურთიერთქმედებს ნიმუშზე და განიბნევიან მემბრანის ფაზათა გამყოფი ზედაპირიდან. ჩვენი ექსპერიმენტული გეომეტრიით მხოლოდ ნიმუშის ფაზათა გამყოფი ზედაპირული დინამიკის დეტექტირებაა შესაძლებელი. ევანესცენციული ტალღების ნიმუშზე ურთიერთქმედების სიდიდის შეცვლა შესაძლებელია დაცემის კუთხის ვარირებით და სილიციუმის ბლოკსა და ნიმუშს შორის

კონტრასტის შეცვლით (დეტერირებული ნიმუში). იმის გამო, რომ თავიდან ავიცილოთ მცირე ინტენსივობის პრობლემა, რომელიც გამოწვეულია იმით, რომ ექსპერიმენტისას გვაქვს მკაცრად კოლიმინირებული ნეიტრონების ნაკადი და ნიმუშიდან განიზნევა მხოლოდ მიღევადი (ევანესცენციული) ტალღები, სწორედ ამის გამო სილიკონის ბლოკზე მოვათავსეთ ნეიტრონული რეზონატორი, რომელიც შეიცავს Pt-Ti მრავალფენოვან სისტემას, რომელიც გვამღევს საშუალებას ჩვენთვის საინტერესო ტალღური ვექტორი იქნეს გამოყენებული ამ კონკრეტული ნეიტრონული გაზნევის ექსპერიმენტში.

სილიკონის ბლოკზე დაფენილია ჩვენი საკვლევი ნიმუში, ამავე სილიკონის ბლოკზე დაფენილი გვაქვს ჩვენი ნეიტრონული რეზონატორი Pt-Ti მრავალფენოვანი სისტემა, რეზონატორი მოთავსებულია ნიმუშსა და სილიკონის ბლოკს შორის, როგორც ეს გამოსახული გვაქვს სურათზე 3. Pt-Ti ფენა ქმნის ნეიტრონულ რეზონატორს, რომელიც მიღევადი (ევანესცენციული) ტალღების ინტენსივობას ზრდის 1-2 ერთეულით (მაგნიტუდით) იმ ექსპერიმენტულ პირობებში, რომელშიც ჩვენ ვატარებთ ექსპერიმენტს. აღნიშნული, სინათლის ოპტიკაში დიელექტრიკული ფენის გამოყენების მსგავსია [216]. თხევადი საკვლევი ნიმუში დატანილი იქნა სილიკონის ბლოკზე, სადაც 0.1მმ დაშორებით დაფარებული გვაქვს მინის ფენა, რომელიც ნიმუშის ზედაპირიდან კადმიუმის ფირფიტებით არის დაშორებული [208]. აქტიური საექსპერიმენტო არე ამ გეომეტრიით იყო  $2 \times 15 \text{ სმ}^2$ . იგივე გეომეტრიის ნიმუშის მოსათავსებელი გეომეტრია გამოყენებულია, როგორც გამოვიყენეთ რეფლექტომეტრულ ექსპერიმენტში [208]. ნიმუშიანი სილიკონის ბლოკი ნეიტრონების ნაკადისკენ ისე იყო მიმართული, რომ ნეიტრონები ურთიერთქმედებდნენ მხოლოდ სილიკონის ინტერფეისზე დაცემის კრიტიკულ კუთხეზე ქვემოთ  $a_c = \lambda \sqrt{\Delta\rho / \pi}$  (სადაც  $\Delta\rho$  გამოსახავს გაზნევის განიკვეთის ფართობის სიმკვრივეს). ამგვარად, ჩვენ მივიღებთ ძალიან ვიწრო მიღევად ტალღებს ჩვენს საკვლევ ნიმუშზე. ამ შემთხვევაში დაცემის კუთხედ  $\alpha = 0.02^\circ$  იქნა არჩეული. პირდაპირ მიმართული ნეიტრონები კადმიუმის ფირფიტის მიერ იქნა აბსორბირებული, რომელიც მოთავსებული გვექონდა სილიკონის ბლოკის მეორე ბოლოში. ნიმუშიდან გაზნეული ნეიტრონები დეტექტორზე დეტექტირდებოდა  $\Delta\Omega = 4^\circ \times 4^\circ$  კუთხეზე. დეტექტირებული ნეიტრონების ინტენსივობა კი საკმარისი იყო, რათა შუალედური გაზნევის ფუნქცია  $S(Q, t)$  გამოგვეთვალა.

რადგან Oak Ridge-ში ნეიტრონების მიღება ხდება Spallation სისტემით, ამიტომ ინსტრუმენტი იყენებს ფართე  $\Delta\lambda \approx 3\text{\AA}$  სიდიდეს, აქედან გამომდინარე, ნეიტრონების დაცემის კრიტიკული კუთხე და ევანესცენციული ტალღების ურთიერთქმედება ვერ იქნება დიდი სიზუსტით განსაზღვრული. სწორედ ამის საკომპენსაციოდ გამოვიყენეთ  $\text{MgF}_2$  პრიზმა, რამაც საშუალება მოგვცა ტალღის

სიგრძესა და კუთხეს შორის კორელაცია ყოფილიყო ისე, რომ ნიმუშზე მოქმედი ევანესცენციული ტალღები  $\Lambda = 1 / \sqrt{4\pi\Delta\rho(1 - \alpha_{in}^2 / \alpha_c^2)}$  დარჩენილიყო უცვლელი 500Å [85] ინტერვალში.

სურათზე მოცემულია ექსპერიმენტის გეომეტრია. ჩვენს ექსპერიმენტში დაცემის კუთხე არის ფიქსირებული (0.2°), დეტექტორის პოზიცია და გამომავალი ნეიტრონების კუთხე კი იცვლებოდა ექსპერიმენტის მსვლელობისას. ძირითადი ტალღური ვექტორი  $\vec{k}$  განიცდის მთლიან რეფლექციას ნიმუშის ფაზათაშორისი ზედაპირებიდან (ინტერფეისებიდან) და გარდაიქმნება  $\vec{k}_f$ .

კლასიკურ რეფლექტომეტრულ ექსპერიმენტში  $\alpha_i = \alpha_f$ , სადაც პირველი ნაწილი არის დაცემის კუთხე, ხოლო მეორე ნაწილი არის რეფლექციის კუთხე, ჩვენს ექსპერიმენტში კი ეს ორივე სიდიდე ერთმანეთისგან განსხვავებულია, რაც გვადლევს საშუალებას სიბრტყითი კომპონენტი  $\vec{Q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$  დაფიქსირდეს და ამით წარმოდგენა შევიქმნათ ჩვენი სისტემის ზედაპირზე მიმდინარე პროცესებზე, კერძოდ  $Q_{\parallel} = Q \times \sin([\alpha_{in} - \alpha_{out}]/2)$  როგორც ეს ნაჩვენებია გვაქვს სურათზე 3.

დაცემის და არეკვლის (incoming and outgoing angle of reflection) შორის სხვაობა არის ძალიან მცირე, სულ რამოდენიმე გრადუსი, რაც გვადლევს ძალიან მცირე  $\vec{Q}$ , რომელიც დაახლოებით  $10^{-3}\text{Å}^{-1}$ . სხვაობა დაცემის და არეკვლის კუთხეს შორის ჩვენი ექსპერიმენტისას არის მხოლოდ 7°. ეს გვადლევს საშუალებას, რათა გამოვთვალოთ  $Q$  ვექტორი შემდეგი ფორმულის გამოყენებით  $Q_{\parallel} = Q \times \sin([\alpha_{in} - \alpha_{out}]/2)$ , სადაც  $Q=0.11\text{Å}^{-1}$  ამ სიდიდის ჩასმით  $Q_{\parallel} = 6.7 \times 10^{-3}\text{Å}^{-1}$ . ჩვენი გამოცდილებით ეს არის ყველაზე მცირე  $Q$  ტალღური ვექტორის სიდიდე, რომელიც ოდესმე გამოყენებულა ნეიტრონულ სპინ-ექო სპექტროსკოპიაში.

### 3.9.3. რეზონატორი

ჩვენი ჯგუფის წინა კვლევებში ჩატარებული იყო მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული სპინ-ექო ექსპერიმენტები, მაგრამ გამომდინარე იქიდან, რომ საანალიზო ნიმუშის რაოდენობა ამ ექსპერიმენტში შეზღუდულია და ასევე ლიმიტირებულია ნიმუშიდან გაბნეული ნეიტრონების რაოდენობა, ჩვენ ყოველთვის ვერ ვაგროვებდით იმ დეტექტირებული ნეიტრონების რაოდენობას, რომელიც საჭირო იყო შუალედური გაბნევის ფუნქციის დასათვლელად. სწორედ ამ ინტენსივობის პრობლემის გადალახვაში გვეხმარება ნეიტრონული რეზონატორი, რომელიც დაფენილი გვექონდა სილიკონის ბლოკის ზედაპირზე და რომელიც იწვევდა ევანესცენციული ტალღების მოქმედების ინტენსივობის ზრდას საკვლევ ნიმუშზე. სამი ორმაგი შრე ტიტანის (130Å), პლატინის(320Å) და

საბოლოო მესამე ფენა ისევ ტიტანის (130Å) იძლეოდა გაბნევის განივკვეთის ფართობის ისეთ მნიშვნელობას, რომელიც განაპირობებდა სამივე ფენიდან კონსტრუქციულ შერევას ნეიტრონების არეკვლის (რეფლექციის) კრიტიკულ კუთხეზე დაბლა. სურათზე 3 გამოსახულია ეს პროცესი ერთი მუქი ევანესცენციული ტალღით, რომელიც რეზონატორის გარეშე იქნა წარმოქმნილი და დანარჩენი ევანესცენციული ტალღები კი უფრო ნათელი ფერით, რომელიც წარმოიქმნა რეზონატორის დახმარებით.

კონსტრუქციული შერევა იქნა ფიქსირებული, ვიდრე ევანესცენციული ტალღები ახდენდნენ ფორმირებას ნიმუშზე, რაც განაპირობებს გაბნეული ნეიტრონების ინტენსივობის აკუმულირებას და ამ გზით თეორიულად 10-დან 100-მდე ერთეულით შესაძლებელია ინტენსივობის ზრდა. ჩვენი კონკრეტული ექსპერიმენტისას გაბნეული ნეიტრონების ინტენსივობა 3 ერთეულით იქნა გაზრდილი. უფრო ფოკუსირებული (კოლიმინირებული collimator) და უფრო დიდი მოცულობის მქონე ნიმუშებისთვის ჩვენს მიერ წარმოდგენილ რეზონატორს ინტენსივობის ზრდის კარგი პერსპექტივები გააჩნია.

#### 3.9.4. გამოყენებული მასალა

საკვლევი ნიმუშის მოსამზადებლად ჩვენ გვაქვს სპეციალური პროცედურა, რომელიც ჩვენი ჯგუფის წინა კვლევებშია მოცემული[208]. 15 მლ SoyPC-იზოპროპანოლის ხსნარი კონცენტრაციით  $174.6 \text{ მგმლ}^{-1}$  ფოსფოლიპიდური ხსნარი იქნა მომზადებული. ხსნარი ინჯღრეოდა დაახლოებით 15 წუთის განმავლობაში, ვიდრე გამჭვირვალე სითხეს არ მივიღებდით. ამის შემდეგ ეს სითხე იქნა დეპოზიტირებული სილიკონის სპეციალურ ბლოკზე, რომელიც წინასწარ იყო გასუფთავებული ჰემანექსის 2% ხსნარით. ამის შემდეგ ნიმუში ოთახის ტემპერატურაზე ყოვნდებოდა 2500 პასკალი წნევის პირობებში მთელი ღამის განმავლობაში. მომზადების ეს მეთოდი საბოლოოდ სილიკონის ზედაპირზე გვაძლევდა ჩვენი საკვლევი ნიმუშის მაკროსკოპულ ფენას. იმისთვის, რომ გაზომვის პროცესები აგვეჩქარებინა ნიმუშის მოსათავსებელ ყუთს ვაჩერებდით  $35^{\circ}\text{C}$ -ზე. ყუთი მთლიანად გავსებული იყო დეიტერირებული წყლით, რათა საბოლოოდ მიგველო მრავალფენოვანი ჰიდრატირებული ფოსფოლიპიდური სისტემა სილიკონის ბლოკზე.

### 3.9.5. ექსპერიმენტული ანალიზის სტრატეგია

სტანდარტული ნეიტრონული სპინ-ექო სპექტროსკოპიის ექსპერიმენტული მონაცემების ანალიზი მოითხოვს, რომ ძალიან ზუსტად განისაზღვროს დეტექტირებული ნეიტრონების პოლარიზაციის ხარისხი და ნორმალიზდეს სტანდარტული ნიმუშიდან ელასტიურად გაბნეული და დეტექტირებული ნეიტრონების პოლარიზაციის ხარისხთან. ასეთი ნიმუში ჩვენს შემთხვევაში იყო გრაფიტის ფირფიტა. ამ გზით განსაზღვრული შუალედური გაბნევის ფუნქციის სიდიდე  $S(q, \tau)$  მორგებული იყო შესაბამის მოდელთან, ჩვენს შემთხვევაში ეს მოდელი არის რომანოვის [209] მიერ აღწერილი გაბნევის ფუნქცია ჩვენი მსგავსი სისტემებიდან.

საბაზისო ხაზის (ბეგრაუნდის) გათვალისწინება. არაკოჰერენტული ფონის (ბეგრაუნდის) გათვალისწინება ამ ექსპერიმენტში შესაძლებელია ორი გზით: ფოსფოლიპიდში არსებული წყალბადის მოლეკულა და დეიტერირებული წყლის მოლეკულა.

ფოსფოლიპიდური მოლეკულის ზედაპირიც შეიცავს გარკვეული რაოდენობით წყალბად-ატომებს, რაც იწვევს ექო ექსპერიმენტის პოლარიზაციის შემცირებას და ასევე შეამცირებს ელასტიური პოლარიზაციის გაზომვებს. გრძელ ტალღებზე ფოსფოლიპიდის ტალღოვანი მოძრაობის ფიქსირება არაკოჰერენტული გაბნევით შეუძლებელია, რადგან ისინი შეიცავენ თვითკორელაციის ფუნქციას და არა ატომწყვილური კორელაციის ფუნქციას. ეს პირობა ჩვენს მოდელში იქნა გათვალისწინებული, როგორც სტატიკური არაკოჰერენტული წვლილი, რომელიც ითვალისწინებს მხოლოდ ფოსფოლიპიდში არსებულ წყალბადის ატომს.

$D_2O$  დეიტერირებულ წყალსაც შეაქვს გარკვეული წვლილი არაკოჰერენტულ გაბნევაში. ეს განსაკუთრებით ადვილად შესამჩნევია საწყის პერიოდში, როდესაც ადგილი აქვს გაბნევის ფუნქციის ზრდას შემდეგ ფურიე დროებზე  $\tau < 0.5$  ნანო წმ. რელაქსაციის დრო  $\tau_0 = 1/(DQ^2)$  შედარდა დიფუზიის კონსტანტას  $D = 190 \text{ \AA}^2/\text{ნანო წმ}$ . გამხსნელის  $D_2O$ -ს არაკოჰერენტული წვლილი არის ოდნავ მეტი შედარებით ფოსფოლიპიდურ ფენებთან, რაც შეიძლება გამოწვეული იყოს ნარჩენი პროტონირებული გამხსნელის მოლეკულებით ნიმუშის მომზადების პროცესში.

### 3.9.6. შედეგები

მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიული ექსპერიმენტი ჩავატარეთ ფოსფოლიპიდურ ნიმუშზე, რომელიც გახსნილი იყო  $D_2O$ -ში და დეპოზირებული იყო სილიკონის ბლოკზე. აღნიშნული სისტემის სტრუქტურა ჩვენი ჯგუფის წინა კვლევებში იქნა შესწავლილი მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით, ასევე რეფლექტომეტრული მეთოდით [86].

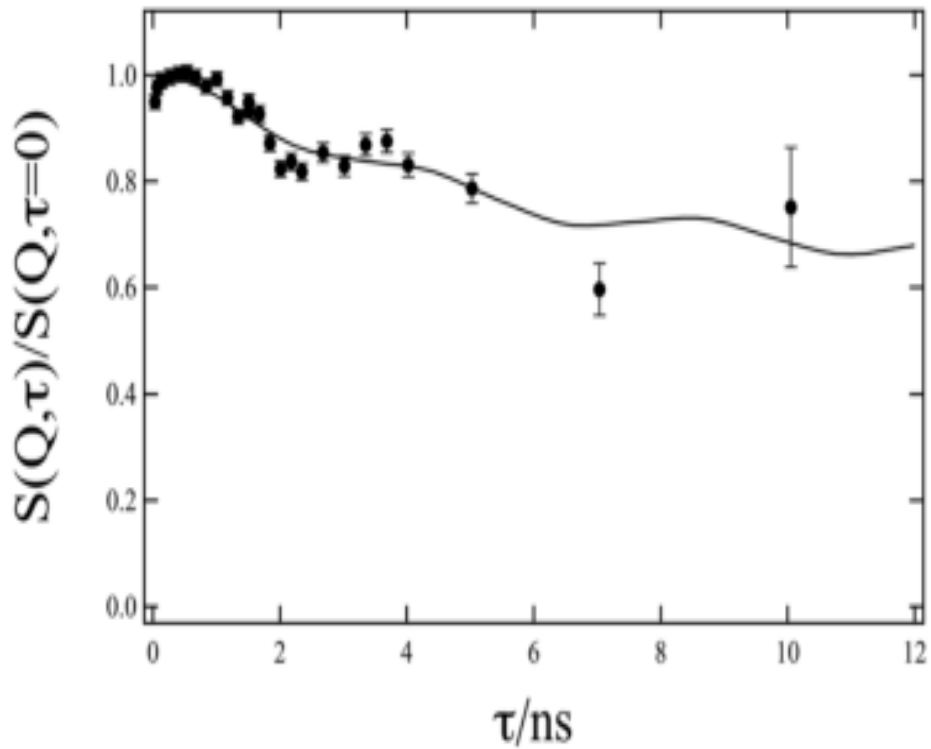
ჩვენი ჯგუფის ადრეულ ექსპერიმენტებში დადგენილ იქნა, რომ ფოსფოლიპიდის მოლეკულა D2O-სთან კონტაქტისას წარმოქმნის ორმაგ ლიპიდურ შრეს განმეორებადი დისტანციით  $d=68.4\text{\AA}$  [208]. ამ სიდიდის განმეორებადი დისტანცია იძლევა ფსევდო ბრეგის პიკს  $Q=0.092\text{\AA}^{-1}$  პოზიციაზე.

რათა თავიდან აგვეცილებინა ფსევდო ბრეგის პიკის გავლენა ჩვენი ნიმუშის დინამიკური თვისებების გაზომვებზე, ექსპერიმენტი ჩავატარეთ  $Q=0.11\text{\AA}^{-1}$  სიდიდეზე შემდეგი სიბრტყითი კომპონენტით  $Q_{\parallel} = Q \times \sin([\alpha_{in} - \alpha_{out}]/2) = 6.7 \times 10^{-3} \text{\AA}^{-1}$  (უფრო დეტალურად განხილულია მეთოდების ნაწილში). სხვაობა დაცემულ და არეკვლილ კუთხეებს შორის იყო  $7^\circ$ , რის საფუძველზეც გავსაზღვრეთ შუალედური გაბნევის ფუნქცია (Intermediate scattering function), რომელიც გამოსახული გვაქვს სურათზე 1. გაზომვები გავიმეორეთ რამოდენიმეჯერ, რათა მიგველო ექსპერიმენტული შედეგების უფრო კარგი სტატისტიკა, ანუ მიღებული შედეგები უფრო საიმედო ყოფილიყო. ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიის ექსპერიმენტული შედეგების განსჯისას, რომელიც წარმოდგენილი გვაქვს სურათზე 1, ოსცილირება დაიკვირვება მინიმუმ 2 ნანო წამზე და პირველი მაქსიმუმი 4 ნანო წამზე. ადვილად დეფორმირებადი ნიმუშებისთვის ტიპური ნეიტრონული სპინ-ექო სპექტროსკოპიაში დროის და ხილვადი ნაწილაკების ზომით ინტერვალში მიღევადი (underdamped) ოსცილირების ფიქსირება არ არის მოსალოდნელი და ამ ოსცილირებაზე თვალყურის დევნება შესაძლებელია მხოლოდ გრძელი სიბრტყითი პარამეტრის არსებობის პირობებში, რომელიც გამოვიყენეთ მოცემული კონკრეტული ექსპერიმენტისას ( $Q=6.7 \times 10^{-3}\text{\AA}^{-1}$  რომელიც დაახლოებით ტოლია 1005მ).

ასეთი ტიპის ოსცილირებას ჩვენ მივაკუთვნებთ ფოსფოლიპიდის ტალღოვან მოდელს, რომელსაც ის წარმოქმნის სილიკონის სუბსტრატის მყარ ზედაპირზე. მოწოდებული მოდელი დადასტურებულია კომპიუტერული მოდელით, რომელიც სურათზე 1 გამოსახულია უწყვეტი ხაზით შემდეგი პარამეტრებით  $B=3.4 \times 10^6 \text{ Pa}$  შეკუმშვის მოდულისთვის და  $\eta=0.0075 \text{ Pa}$  მემბრანის ზედაპირულ სიბრტყეზე არსებული სიბლანტისთვის.

**სურათი 1.** მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპის ექსპერიმენტული მონაცემები ფოსფოლიპიდის მოდელური მემბრანიდან, სადაც  $Q_{\parallel} = 6.7 \times 10^{-3} \text{\AA}^{-1}$  უწყვეტი ხაზით გამოსახულია რომანოვის თეორიული მოდელი  $B=3.4 \times 10^6 \text{ Pa}$  და  $\eta=0.0075$  პარამეტრებით, როგორც ეს აღწერილია ტექსტში.





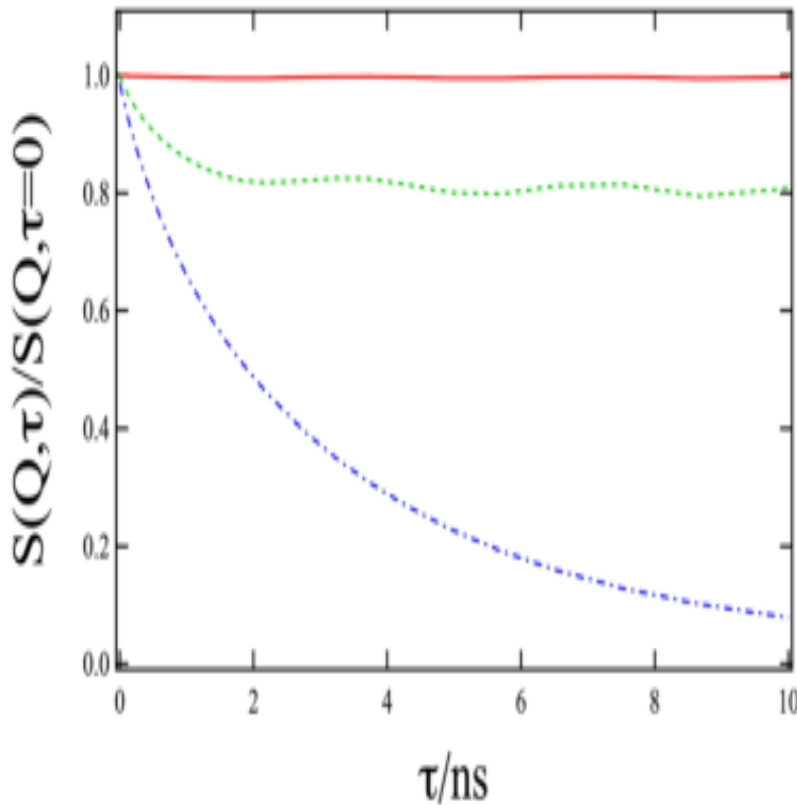
### 3.9.7. შედარება კომპიუტერულ სიმულაციასთან

ფოსფოლიპიდის ზედაპირის ტალღოვანი ოსცილაციების ასახსნელად, განვახორციელეთ მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონული სპინ-ექო სპექტროსკოპიის ექსპერიმენტის კომპიუტერული მოდელირება, რომელიც ეფუძნება რომანოვის მეთოდს [209]. მიღებული შედეგები გამოსახულია სურათზე 2. ჩვენი კომპიუტერული მოდელი მემბრანის დინამიკის რომანოვის მოდელის მსგავსია, რომელიც ვალიდურია ჩვენი ნეიტრონული გაბნევის ექსპერიმენტული პირობებისთვის და ადვილად დეფორმირებად სისტემებში მყარი სილიკონის ზედაპირზე დაფენილი მემბრანული სისტემების დინამიკაზე დაკვირვების საშუალებას იძლევა. გამოყენებული მოდელი ვალიდურია თხევადი კრისტალური მრავალფენოვანი სისტემისთვისაც და უკვე იყო გამოყენებული რაინშტედტერის (Rheinstädter) მიერ მსგავსი სისტემების ანალიზისას [203]. სურათზე 2 გამოსახული კომპიუტერული სიმულაციით მიღებული შედეგების ყურადღებით დაკვირვებისას ვიგებთ, რომ შუალედური გაბნევის ფუნქციის  $S(Q, \tau)$  ოსცილაციების ფიქსირება შესაძლებელია გარკვეულ  $Q_{\parallel}$  სიდიდეზე. ჩვენ ამ ფაქტის ახსნა შეგვიძლია შემდეგნაირად: ძალიან მცირე  $Q_{\parallel}$  სიდიდეზე ჩვენ ვხედავთ მემბრანის მოლეკულის ზედაპირის დიდ ნაწილს, სადაც შესაძლებელია მხოლოდ მემბრანის მთლიანი მოლეკულის მოძრაობის ფიქსირება, ხოლო ძალიან მაღალ  $Q_{\parallel}$  სიდიდეზე შესაძლებელია მემბრანის მოლეკულის ლოკალური მოძრაობის და

მილევადი (over-damped) ოსცილირების ფიქსირება, სადაც მცირე ფოსფოლიპიდურ ჯგუფებს შეაქვთ ძირითადი წვლილი. აქედან გამომდინარე, მხოლოდ გარკვეულ  $Q_{||}$  სიდიდეზე არის შესაძლებელი ფოსფოლიპიდური მემბრანის ტალღური ოსცილირების ფიქსირება.

(ამ dampe -ზე ცოტა განმარტებას გავაკეთებ რადგან ვერ ვახერხებ ქართული სიტყვის მოძებნას, dampe არის სისტემა რომელიც ზეგავლენას ახდენს ოსცილირებაზე, ჩვენ ვიცნობთ 3 სახის ასეთ პროცესს Overdamped, Critically damped, Underdamped. თითოეული რომ განვმარტოთ ამისთვის პირველ ეტაპზე მოდით წარმოვიდგინოთ ოთახის კარი რომელსაც აქვს სპეციალური პრუჟინა თუ რაღაც რაც ქვია მაგას, კარის გაღებისას თუ საქმე გვაქვს Underdamped სისტემასთან მაშინ კარი სანამ დაიხურება მანამ წინ და უკან გარკვეული მანძილით ოსცილირებს, თუ საქმე გვაქვს Overdamped სისტემასთან მაშინ კარი ოსცილირების გარეშე ძალიან ნელა უბრუნდება საწყის პოზიციას ანუ იხურება კარი, ხოლო Critically damped-ის შემთხვევაში კარი უბრუნდება თავის საწყის პოზიციას ოსცილირების გარეშე რაც შეიძლება სწრაფად, სხვადასხვა სისტემებს სხვადასხვანაირი მოძრაობა გააჩნიათ და ერთერთი ასეთი მოძრაობა დამახასიათებელია ჩვენი სისტემისთვის.)

სურათი 2. შუალედური გაბნევის ფუნქციის  $S(Q, t)$  გამოთვლა რომანოვის მოდელით.  $S(Q, t)$  -ს რელაქსაცია და ოსცილირება ძალიან სენსიტიურია ფოსფოლიპიდის ზედაპირის სიბრტყითი ნაწილის. კერძოდ, აქ წითელი უწყვეტი ხაზით გამოსახულია  $Q_{||} = 5.5 \times 10^{-3} \text{Å}^{-1}$ , წყვეტილი მწვანე ხაზით  $11 \times 10^{-3} \text{Å}^{-1}$  ხოლო ლურჯი წყვეტილი ხაზით  $16.5 \times 10^{-3} \text{Å}^{-1}$ . სხვა ყველა პარამეტრი იყო უცვლელი და ამ გზით მიღებული ანალიზის შედეგები მოცემულია სურათზე 1.



### 3.9.8. შედეგების განსჯა

ჩვენ ექსპერიმენტში შედეგები მიღებულია მყარი-თხევადი ზედაპირიდან, სადაც მემბრანები განლაგებულია პარალელურად მყარ ზედაპირთან ძალიან ახლოს. აღნიშნული განლაგება ძალიან ახლოსაა ბუნებაში მემბრანების არსებობის ფორმასთან, მნიშვნელოვანია, რომ ჩვენ ისინი არ აგვერიოს კაპილარულ სახეობებთან [210], რომლებიც ფიქსირებული იყო გამა სხივების ფოტონ-კორელაციური ექსპერიმენტით [210].

განსაზღვრული ლამელარული სისტემის ფენების ტალღოვანი ოსცილაციების დინამიკის აღმწერი თეორიული მოდელი მოცემული იქნა რომანოვის მიერ [209], სადაც გამოყენებულია პონიევიერსკის (Poniewierski)-ის ძირითადი ფორმულა [211].

მოდელი შეიცავს  $N$  ელასტიურ ფენას, ეკვივალენტური მანძილით დაშორებული მრავალი ერთმანეთზე დადებული ფენებისგან შემდგარი სისტემის ერთ ბოლოში, რომელიც კონტაქტშია მყარ ზედაპირთან, ხოლო ამავე სისტემის მეორე ბოლო ფენა არის თავისუფალი. ფენებს შორის ურთიერთქმედება აღიწერება შეკუმშვის მოდულით  $B$ , ხოლო ფენის მოლუნვის ელასტიურობა აღიწერება მოლუნვის

მოდულით  $K = \kappa / d$  (სადაც  $\kappa$  არის მოლუნვის მოდული, ხოლო  $d$  არის ფენის სისქე), ორივე სიდიდეები მოცემულია მთლიანი ნიმუშისთვის და არა მისი მხოლოდ რომელიმე ფენისთვის. მოდელი ასევე შეიცავს ზედაპირული დაჭიმულობის სიდიდეს  $\gamma$  თავისუფალი ზედაპირისთვის და ფენებს შორის მოცურების სიბლანტეს  $\eta_3$ . ეიჯენის სიდიდეები (Eigen values) მოდელისთვის 1, რომლის ამოხსნები მოცემულია პუბლიკაციაში [209], სადაც  $n$ -ით გამოსახული ფენების რაოდენობა, რომელიც დამოკიდებულია წანაცვლებაზე  $u_l(\vec{r}_l, n)$  და ეიჯენის სიხშირეზე  $\omega_l$ . ყოველი  $\omega_l$  ყოველთვის შეიცავს სიბლანტეზე დამოკიდებულ ჩაქრობად (damping) ნაწილს  $-i\eta_3 q_l / (2\rho)$  და დამატებით ნაწილს  $\sqrt{f(q_l, t)}$ , სადაც  $f$  დამოკიდებულია მოდელის პარამეტრებზე.

მოდელი არის ზეჩაქრობადი, თუ  $f$  არის (ნეგატიური) თხელი ფენისთვის, რომელიც შეიძლება დანახული იყოს ქვემოდან, მილევადი (ევანესცენტული) ტალღები ახდენენ მათზე ზემოქმედებას, ზედაპირული დაჭიმულობა  $\gamma$  მხოლოდ ძალიან სუსტად ახდენს გავლენას მთლიან სისტემაზე, და გაბნეული ნეიტრონების ინტენსივობაზე ძირითადი წვლილი მოდის 1-ის მაღალ პარამეტრზე შესაბამისი სიდიდის მქონე ერთმანეთზე ზედდებული ფენების წანაცვლების კოეფიციენტით. იმ დაშვებით, რომ  $l = N$  რომანოვის მიერ მის ნაშრომში გამოყენებული ფორმულა 2.19 გვამღებს საშუალებას დავაფიქსიროთ ოსცილირების პროცესი მრავალშრიან მემბრანულ სისტემაში [209].

$$(2.76) \quad q_{\parallel} < \left[ \frac{16B\rho}{d^2\eta_3^2} \right]^{1/4}$$

თუ გამოვსახავთ ეიჯენის სიხშირებს მოდელური მემბრანული სისტემისთვის 1, მაშინ მივიღებთ შემდეგი სახის ფორმულას.

$$(2.77) \quad \omega_{\pm}^{(l)} = -i \frac{\eta_3 q_{\parallel}^2}{2\rho} \pm \sqrt{\frac{4B}{\rho d^2} \sin^2 \frac{(2l-1)\pi}{2(2N-1)} + \frac{4\gamma q_{\parallel}^2}{(2N-1)\rho d} \cos^2 \frac{(2l-1)\pi}{2(2N-1)} + \frac{Kq_{\perp}^4}{\rho} - \frac{\eta_3 q_{\perp}^4}{4\rho^2}}$$

სადაც  $K = \frac{\kappa}{d}$ . თუ ჩავსვამთ შესაბამისი პარამეტრების მნიშვნელობებს ( $B=10^6$

$J/m^3$ ,  $\rho = 10^3 kg/m^3$ ,  $\eta_3 = 10^{-2} kg/(ms)$ ,  $d = 6 \times 10^{-9} m$ ), ვნახავთ, რომ

$q_{\parallel} = 1.5 \times 10^{-7} m^{-1} = 1.1 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ , რომელიც იძლევა გაცილებით მცირე  $Q$  სიდიდეს კლასიკურ ნეიტრონულ სპინ-ექო სპექტროსკოპიაში გამოყენებულ ტალღურ ვექტორთან შედარებით, მაგრამ არის  $Q_{\parallel}$  სიდიდის ინტერვალში, რომელიც გამოიყენება მცირე სიღრმეზე მოქმედ ნეიტრონულ სპინ-ექო სპექტროსკოპიაში. აღსანიშნავია ისიც, რომ  $q_{\parallel}$  -ით გამოსახულია სხვადასხვა

სახეების ვექტორი და ის განსხვავებულია გაბნევის ტალღური ვექტორისგან  $Q_{\parallel}$ -ისგან. ზუსტად თანმხვედრი სხვადასხვა ტალღური ვექტორი ახდენს დიდ გავლენას გაბნეული ნეიტრონების ინტენსივობაზე, რომელიც დეტექტირდება მცირე სიღრმეზე მოქმედი  $Q_{\parallel}$  სიდიდის განსაზღვრულ მნიშვნელობაზე, აქვე აღსანიშნავია, რომ სხვა ტალღური ვექტორის სახეობებიც ახდენენ ჩვენს ექსპერიმენტში გაბნეული ნეიტრონების დეტექტირებულ ინტენსივობაზე გავლენას. სწორედ ეს არის მიზეზი, რის გამოც ჩვენ პირდაპირ ვერ ვიყენებთ ეიჯენის სიხშირეების გამოსათვლელ ფორმულას და გვიხდება მისი ინტეგრირება ეიჯენის ყველა სახეობისთვის,

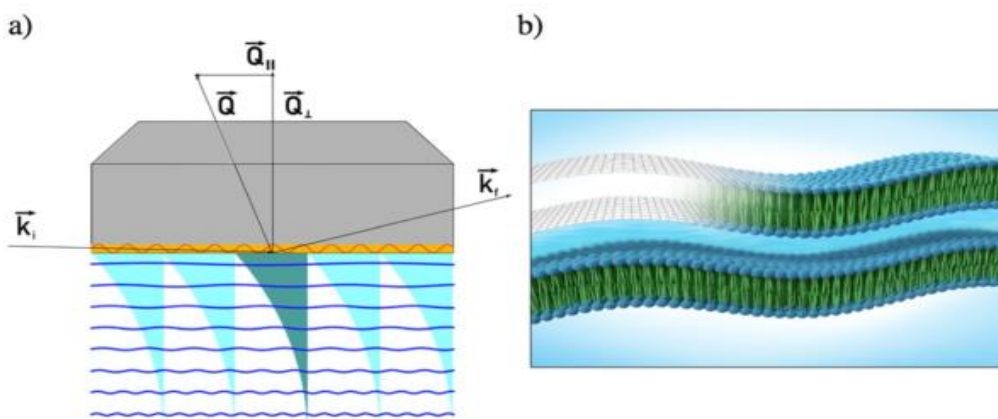
რაც  $Q_{\parallel}$  -ის ნებისმიერი მნიშვნელობისთვის გვამღევს ეიჯენის სიხშირის მნიშვნელოვან სიდიდეებს.

მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპია ხასიათდება სხვა დამატებითი უპირატესობით, რომელიც იძლევა საშუალებას იქნეს ფიქსირებული ტალღური მოძრაობა ჩვენი ლამელარული სისტემისთვის. ლამელარული ფენების წანაცვლება  $\vec{u}$  მიმართული  $z$  მიმართულებით (ფაზათაშორისი ზედაპირის მართობულად) არის ძირითადი გაბნევის ვექტორის  $\vec{Q}$  მიმართულებით. ძირითადად საანალიზო სიგნალის ინტენსივობა დამოკიდებულია  $\vec{Q}$  და  $\vec{u}$  სიდიდეების ერთმანეთის მიმართულებით პროექტირებაზე  $(1 - (\vec{Q} \cdot \vec{u})^2)$ , რაც განაპირობებს უფრო

პერპენდიკულარულად მიმართული  $\vec{Q}$  სიდიდის მიღებას.

კუმშვადობის მოდული  $B$  და სიბრტყული სიბლანტე  $\eta$  იძლევა საშუალებას, რომ წარმოდგენა შევიქმნათ მემბრანის რელაქსაციურ პროცესზე მყარ ზედაპირთან ახლოს (მემბრანა დაფენილია სილიკონის მყარ ზედაპირზე და ჩვენ ვაკვირდებით ამ მყარ ზედაპირთან ახლოს მყოფი ლამელარული ფენების ქცევას) იხილეთ სურათი 3. აღსანიშნავია ისიც რომ შეკუმშვის მოდული  $B$ -ის განსაზღვრა შესაძლებელია სხვა კვლევის მეთოდებითაც, კერძოდ, რენტგენის სხივების რეფლექტომეტრული მეთოდით [194, 199, 212], მაგრამ ლამელარული სისტემის სიბრტყეზე არსებული ე.წ სიბრტყული სიბლანტის განსაზღვრა ამ ნანომეტრის და ნანოწამების ინტერვალში აქამდე ცნობილი მეთოდებით შეუძლებელი იყო. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ კაილეს (Caille) ექსპონენტური მეთოდი წარმოადგენს ჩვენს მიერ გამოყენებული მეთოდის საპირისპირო (არაპირდაპირ) მეთოდს [213]. ეს განპირობებულია იმით, რომ Caille-ს თეორია ეფუძნება ელასტიურ ენერგიას და არაა დამოკიდებული სიბლანტეზე მაშინ, როდესაც ჩვენს მიერ გამოყენებული მეთოდი დამოკიდებულია ორივე პარამეტრზე, როგორც ელასტიურ ენერგიაზე, ასევე სიბლანტეზე.

სურათი 3. ა) მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპის გეომეტრიული სურათი. განსხვავებით რეფლექტომეტრისგან დაცემული და არეკლილი (რეფლექტირებული) რადიაციის კუთხეები ერთმანეთის ტოლი არ არის, რაც ნიშნავს იმას, რომ ჯამური  $Q$  ვექტორი არაა ზედაპირის პერპენდიკულარული. აღსანიშნავია ისიც, რომ დაცემული ნეიტრონული რადიაცია პირველად გაივლის სილიკონის ბლოკს, სანამ ის ურთიერთქმედებს მემბრანასთან და იქნება გაბნეული მემბრანიდან. ექსპონენტურად კლებადი მილევადი (ევანესცენციული) ტალღების ნიმუშთან ურთიერთქმედება გამოსახულია ლურჯი ტალღების სახით. დამატებითი ნაკლებად ინტენსიური ევანესცენციული ტალღების ურთიერთქმედება ნიმუშის სხვადასხვა ფენებზე ნაჩვენებია ლურჯი ტალღოვანი ხაზით; ბ) საკვლევი ნიმუშის სტრუქტურის ვიზუალური ფორმა.



თუ შევადარებთ ერთმანეთს სურათზე 2 გამოსახულ კომპიუტერული სიმულაციით მიღებულ ექსპერიმენტულ მონაცემებს და სურათზე 1 გამოსახულ რეალურ ექსპერიმენტულ მონაცემებს, მაშინ ჩვენ შეგვიძლია დავასკვნათ შემდეგი: ა) ფოსფოლიპიდის ზედაპირისთვის დამახასიათებელი ტალღური მოძრაობა ერთმანეთის მსგავსია, კერძოდ, სიხშირის და ამპლიტუდის კონტექსტით, რომელიც გაზომილი იყო, როგორც კომპიუტერული, ასევე რეალური ექსპერიმენტული კვლევისას მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპით, ბ) ზედაპირის ტალღური მოძრაობა მაღალ  $Q_{\parallel}$  სიდიდეზე ქრება, რაც ნათლად მიაჩნებოდა, რომ ჩვენს ექსპერიმენტში დეტექტირებული ზედაპირული სახეობები არის ნამდვილად დიდი სიდიდის კორელაციები.

ჩვენ გვაქვს მყარ სუბსტრატზე დაფენილი ფოსფოლიპიდური მემბრანა, რაც ქმნის მყარ-თხევად გამყოფ ზედაპირს. ეს იძლევა საშუალებას, რომ მათი ზედაპირული უბნები განვასხვავოთ თხევადი-აირადი ზედაპირისგან [210] და ასევე შიგამემბრანული ზედაპირებისგან [204].

ცხრილში 1. მოცემულია შედარება ლიტერატურულ სიდიდეებსა და ექსპერიმენტული მორგებადობით (Fit) მიღებულ შედეგებს შორის, რომელთა პარამეტრები გამოსახული გვექონდა სურათზე 1. აღნიშნული პარამეტრები იქნა განსაზღვრული კვაზი ელასტიური ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით[203], აგრეთვე ტენზიომეტრის გამოყენებით [214], მოკლედ, საკვლევი ნიმუში ეძლეოდა კვლევის სხვადასხვა მეთოდის განმახორციელებელ ჯგუფებს და ასევე აძლევდნენ მათ მიახლოებით პარამეტრულ სიდიდეებს.

ცხრილი 1. შედარება ლიტერატურულ მონაცემებსა და ექსპერიმენტულ მონაცემებს შორის. ჩვენ ვცვლიდით  $\gamma$  პარამეტრს, რათა მიგველო კარგი მორგებადობა (fitting).

	Literature value	Fitted value
$B/\text{Pa}$	$1.1 \cdot 10^{16}$	$3.4 \pm 0.4 \cdot 10^6$
$\gamma/N \cdot m$	0.045 <sup>30</sup>	0.01
$\eta_3/\text{Pa} \cdot s$	0.016 <sup>16</sup>	$0.0076 \pm 0.0009$
$\kappa/k_B \cdot T$	19.5 <sup>31</sup>	$22.4 \pm 1.2$

ამ მონაცემების დეტალური მონიტორინგისას ჩვენ ვნახავთ, რომ ზოგიერთ პარამეტრებს შორის სხვაობა საკმაოდ თვალშისაცემია. ფოსფოლიპიდური ფენების მოღუნვის მოდული  $K = \frac{\kappa}{d}$ , როგორც ფოსფოლიპიდური მემბრანის კოლექტიური მოძრაობის ამსახველი, თეორიულად არის თითქმის ერთმანეთის ტოლი, შიდა მემბრანული სიბლანტე  $\eta_3$  მცირდება. ეს შემცირება შეგვიძლია ავხსნათ, თუ დავაკვირდებით მოლეკულურ ზომებს, რომლებსაც ამ კონკრეტულ ექსპერიმენტში ვიკვლევთ. კერძოდ, რაინშტედტერის (Rheinstädter) ექსპერიმენტში ის იყენებს  $Q_{\parallel} \leq 1 \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$ , ხოლო ჩვენს მიერ გამოყენებული  $Q_{\parallel} = 6.7 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ . ეს რომ მივუსადაგოთ საკვლევი მოლეკულის ზომებს, მაშინ ჩვენი ექსპერიმენტის შემთხვევაში ჩვენ ვაკვირდებით 500Å ტოლ ან ნაკლებ ზომებს, ხოლო რაინშტედტერი თავის ექსპერიმენტში აკვირდებოდა 1000Å ტოლ ან უფრო დიდ ზომებს. ეს გვადლევს საშუალებას, რომ დავასკვნათ შემდეგი: ფოსფოლიპიდის ლოკალური სიბლანტე გაცილებით დიდია, ვიდრე ამ ფოსფოლიპიდის მთლიანი მოლეკულის საშუალო სიბლანტე.

შეკუმშვის მოდულის B-ის ზრდა შეგვიძლია ავხსნათ აგრეთვე მსგავსი მსჯელობით. კერძოდ, მემბრანის ლოკალური სიხისტე (სიუხეშე) შეიძლება იყოს უფრო მაღალი, ვიდრე ამ მემბრანის მთლიანი მოლეკულის საშუალო სიხისტე (სიუხეშე), რადგან თითოეული ფოსფოლიპიდური მოლეკულის წანაცვლება

თანდათანობით მცირდება, რაც უფრო მეტი მოლეკულა ღებულობს მონაწილეობას გადაადგილების გაზრდაში.

ჩვენს მოდელში ვცვლიდით ზედაპირული დაჭიმულობის სიდიდეს, რათა მიგველო კარგი ფიტინგი. აქვე უნდა აღინიშნოს, რომ ზედაპირული დაჭიმულობა წყალი-აირის ფაზათაშორისი ზედაპირიდან, რომელიც გამოკვლეული იქნა ბროზოზოვსკას [214] (Brozowska) მიერ, ფუნდამენტურად განსხვავდება მემბრანის ფენებს შორის არსებული ზედაპირული დაჭიმულობისგან, აქედან გამომდინარე, ამ სიდიდის ვარირება ჩვენთვის მოსალოდნელი იყო. რაინშტედტერი [203] გვეუბნება, რომ ასეთ შემთხვევაში ზედაპირული დაჭიმულობა შეგვიძლია საერთოდ უგულებელვყოთ (დავაიგნოროთ). ჩვენ შემთხვევაში ზედაპირული დაჭიმულობა გათვალისწინებულია მხოლოდ ბიომემბრანის ყველაზე ზემოთ მყოფი ფენისთვის [209].

გომპერის (Gompper) მიერ თეორიულად მოწოდებული იყო მიღვეადი (damp) ოსცილირების კორელაციური ფუნქცია უწყვეტი მიკროემულსიური სისტემებისთვის სხვადასხვა საფუძვლებზე

$S(Q, \tau) / S(Q, \tau = 0) = (A - 1) \exp(\Gamma_1 \tau) + A \exp(\Gamma_2 \tau) \cos(\omega \tau)$  [93]. თუმცა მის თეორიულ მოდელში ჩვენ არ გვქონდა პირდაპირი წვდომა შეკუმშვის მოდულზე  $B$ , ზედაპირულ დაჭიმულობაზე  $\gamma$ , სიბლანტეზე  $\eta_3$  და მემბრანის ფენების მოლუნვის მოდულზე. ჩვენი ექსპერიმენტული მონაცემები ნამდვილად ადასტურებს იმას, რომ მსგავს პროცესს მემბრანის ზედაპირზე ნამდვილად აქვს ადგილი, თუმცა მისი ფიქსირება შესაძლებელია მხოლოდ ჩვენს მიერ გამოყენებული  $Q$  სიდიდის ინტერვალში.

ჩვენს ექსპერიმენტში გამოკვლეული ფოსფოლიპიდური მოლეკულის პარამეტრები და მისი რეოლოგიური პარამეტრების მონიტორინგი შეიძლება პრაქტიკული გამოყენების კუთხით მნიშვნელოვანი აღმოჩნდეს ბიოტექნოლოგიური და სამედიცინო სფეროში დაკავებული მეცნიერებისთვის. ნებისმიერი მსჯელობა აქ მიღებულ ექსპერიმენტულ პარამეტრებსა და კონკრეტული მემბრანის სტაბილურობას შორის დამოკიდებულებაზე იქნება ძალიან ზოგადი. ჩვენს მიერ დახასიათებული მემბრანის სტრუქტურა ძუძუმწოვრების სახსრების (mammalian joints) მემბრანის სტრუქტურის მსგავსია [189]. ჩვენ ამ ექსპერიმენტში მიღებული მემბრანის ქცევის შესახებ ინფორმაციას არ განვაზოგადებთ ჩვენს წინა კვლევის ნიმუშებზე, კერძოდ მიკროემულსიურ სისტემებზე [207]. ზოგადი დაკვირვებით, ძუძუმწოვრების სახსრების მემბრანები უნდა იყვნენ ძალიან მტკიცე ( ზოგი მათგანი აღწევს 100 წელს) მიკროემულსიურ მემბრანებთან შედარებით, რომლებიც რამოდენიმე წამის თუ წუთის დროის პერიოდში არსებობენ. ამგვარი თვითმასტაბილელი მექანიზმი უნდა



არსებობდეს მსგავს მემბრანებში და ეს ტალღოვანი ოსცილირება არის საუკეთესო საშუალება, რათა ენერგია გაიფანტოს მემბრანის მთელ ზედაპირზე. მემბრანების სტაბილურობა ასევე დამოკიდებულია სალდიტის [77] (Saldit) მიერ აღწერილ სტაბილურობის პირობებზე, მაგრამ აქ ძირითად როლს ფაზურ გადასვლებში ალბათ ტემპერატურა თამაშობს.

## დასკვნები

1. გამოკვლეულია ბენზოკაინის მოქმედების მექანიზმი ორმაგ ფოსფოლიპიდურ შრეზე. დადგენილია, რომ ბენზოკაინი იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის მოლეკულის შიგა ნეგატიურ ღუნვადობას, რის შედეგადაც ადგილი აქვს ლიპიდური შრის ჰიდროფობური ჯაჭვი უფრო მჭიდროდ ჩალაგებას და ჰიდროფილურ თავებს შორის დისტანციის შემცირებას. ამასთან, ბენზოკაინის დამატებისას ფოსფოლიპიდი მხოლოდ მცირედ გადაიხრება იდეალური პარალელური ლამელარული განლაგებისგან.

2. გამოკვლეულია პროპანოლის მოქმედების მექანიზმი ორმაგ ფოსფოლიპიდურ შრეზე. ნეიტრონ-რეფლექტივური და მცირე სიღრმეებზე მოქმედი მცირე კუთხეების ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით დადგენილია, რომ პროპანოლი იწვევს ორმაგი ლიპიდური შრის მკვეთრ ღუნვადობას, რაც განაპირობებს ფხვნილის მსგავსი ლამელარული სტრუქტურების ფორმირებას. კლასიკური ნეიტრონული გაბნევის მეთოდით ანალიზმა აჩვენა, რომ ფოსფოლიპიდებზე პროპანოლის დამატება იწვევს უნილამელარული სტრუქტურების ფორმირებას.

3. შესწავლილია ფირფიტისებური ნაწილაკების დანამატების გავლენა კომპლექსური სითხეების სიბლანტეზე. დადგენილია, რომ თიხის ფირფიტისებური ნაწილაკების დამატება კომპლექსურ სითხეებზე, კერძოდ ნედლ ნავთობზე იწვევს სიბლანტის შემცირებას აინშტაინის სფერული ნანონაწილაკებით სიბლანტის მოდიფიკაციის თეორიული მოდელის საპირისპიროდ. დადგენილია, რომ ნედლი ნავთობის და თიხის შემცველი ნედლი ნავთობის სიბლანტეებს შორის სხვაობას განსაზღვრავს სისტემაში ლამელარულ განლაგების ცვლილება თიხის ნაწილაკების დამატების პირობებში. დადგენილია,

რომ დიდი ზომის თიხის ნაწილაკები ხელს უწყობენ კომპლექსური სითხეების, კერძოდ მიკროემულსიების სიბლანტის შემცირებას.

4. გამოკვლეულია მოდელური უჯრედული მემბრანის დინამიკური თვისებები ფოსფოლიპიდური მემბრანის ფაზათაშორის ზედაპირთან ახლოს. შეფასდა ფოსფოლიპიდის სხვადასხვა ფენების ლოკალური ურთიერთქმედება და ხახუნის მახასიათებელი პარამეტრები მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიის გამოყენებით, სადაც მიღევადი (ევანესცენციული) ტალღები იძლევა საშუალებას დაფიქსირდეს ფოსფოლიპიდის ფლუქტუაციები სხვადასხვა ფენებს შორის გამყოფ ზედაპირზე.

5. მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიული მეთოდით შესაძლებელი გახდა ნანომეტრის ზომების მქონე მოლეკულების დაფიქსირება, ხოლო ენერგეტიკული თვალსაზრისით ეს მეთოდი იძლევა საშუალებას ავღრიცხოთ ისეთი მოლეკულური ფლუქტუაციები, რომლებიც მდებარეობს მიკროელექტონვოლტების უბანში. ნეიტრონული რეზონატორი ზრდის ნეიტრონების ინტენსივობას რამოდენიმე ერთეულით.

6. გამოვლენილია ფოსფოლიპიდური მემბრანის ადგენების უბნები, რომლებიც აქამდე დეტექტირებული არ იყო სხვა ექსპერიმენტული მეთოდით და პირველად დეტექტირდა ჩვენს მიერ მცირე სიღრმეზე მოქმედი ნეიტრონ სპინ-ექო სპექტროსკოპიული მეთოდის გამოყენებით.

7. კვლევის მოწოდებული ახალი მეთოდი იძლევა შესაძლებლობას, რომ ნეიტრონების გამოყენებით შევიქმნათ წარმოდგენა ბიოლოგიური მემბრანების ვისკოელასტიურ თვისებებზე. კვლევის შემუშავებული ახალი მეთოდით ბიოლოგიური მემბრანის უცნობი თვისებების ფიქსირება და დეტექტირებაა შესაძლებელი, რაც მეტყველებს აღნიშნული მეთოდის კონკურენტუნარიანობაზე ტრიბოლოგიური თვისებებისა და მექანიზმების შესასწავლად ნანოდონზე.

### გამოყენებული ლიტერატურა:

- [1] A.B. ] H.Lodish, P. Matsudaria, P. Kaiser, M.Krieger, M. Scott, S.L Zipursky, and J.Darnell, Molecular Cell biology John Wiley and Sons, New York, 2004.
- [2] E.a.o.c. articles., Nature Insight: Membrane Biology, 438(7068) (2005) 577-621.
- [3] P.L. Fegner, Scietific American, 276 (1997) 102-106.
- [4] W. Helfrich, Elastic properties of lipid bilayers: theory and possible experiments, Z Naturforsch C, 28 (1973) 693-703.
- [5] R. Lipowsky, The conformation of membranes, Nature, 349 (1991) 475-481.
- [6] S.J.S.a.G.L. Nicolson, The fluid mosaic model of the structure of cell membranes, Science, 175 (1972) 720-731.
- [7] D. Marsh, Elastic curvature constants of lipid monolayers and bilayers, Chem Phys Lipids, 144 (2006) 146-159.
- [8] R. Parthasarathy, C.H. Yu, J.T. Groves, Curvature-modulated phase separation in lipid bilayer membranes, Langmuir, 22 (2006) 5095-5099.
- [9] S.H. White, The progress of membrane protein structure determination, Protein Sci, 13 (2004) 1948-1949.
- [10] C. Ostermeier, H. Michel, Crystallization of membrane proteins, Curr Opin Struct Biol, 7 (1997) 697-701.
- [11] A. Arora, L.K. Tamm, Biophysical approaches to membrane protein structure determination, Curr Opin Struct Biol, 11 (2001) 540-547.
- [12] C. Tanford, The hydrophobic effect and the organization of living matter, Science, 200 (1978) 1012-1018.
- [13] J.Israelashvili, Intermolecular and Surface forces, Academic press  
1992.
- [14] J.N. Israelachvili, S. Marcelja, R.G. Horn, Physical principles of membrane organization, Q Rev Biophys, 13 (1980) 121-200.
- [15] S.A. S.W Hyde, K.Larsson, Z.Blum, T.Landh,S.Lidin, and B.Niham., Tle language of shape, Elsevier Science, Amsterdam., (1997).

- [16] a.D.B. S.Puvvada, Thermodynamic description of micellization, phase behavior, and phase separation of aqueous solution of surfactant mixture, *Phys.,Chem.*, 96 (1992).
- [17] a.E.R. R.Nagarajan, Theory of surfactant self-assembly: a predictive molecular thermodynamic approach, *Langmuir*, 7 (1981) 2934-2969.
- [18] G. van Meer, D.R. Voelker, G.W. Feigenson, Membrane lipids: where they are and how they behave, *Nat Rev Mol Cell Biol*, 9 (2008) 112-124.
- [19] J.U. Bowie, Solving the membrane protein folding problem, *Nature*, 438 (2005) 581-589.
- [20] J. Zimmerberg, K. Gawrisch, The physical chemistry of biological membranes, *Nat Chem Biol*, 2 (2006) 564-567.
- [21] S.J. Singer, G.L. Nicolson, The fluid mosaic model of the structure of cell membranes, *Science*, 175 (1972) 720-731.
- [22] S. McLaughlin, D. Murray, Plasma membrane phosphoinositide organization by protein electrostatics, *Nature*, 438 (2005) 605-611.
- [23] G.W. Feigenson, Phase boundaries and biological membranes, *Annu Rev Biophys Biomol Struct*, 36 (2007) 63-77.
- [24] J.A. Killian, T.K. Nyholm, Peptides in lipid bilayers: the power of simple models, *Curr Opin Struct Biol*, 16 (2006) 473-479.
- [25] J. Gruenberg, Lipids in endocytic membrane transport and sorting, *Curr Opin Cell Biol*, 15 (2003) 382-388.
- [26] A. Hinderliter, R.L. Biltonen, P.F. Almeida, Lipid modulation of protein-induced membrane domains as a mechanism for controlling signal transduction, *Biochemistry*, 43 (2004) 7102-7110.
- [27] J.J. Myher, A. Kuksis, S. Pind, Molecular species of glycerophospholipids and sphingomyelins of human erythrocytes: improved method of analysis, *Lipids*, 24 (1989) 396-407.
- [28] A.L. Lehninger, D.L. Nelson, and M.M. Cox (eds.) In *Principles of Biochemistry*,., Worth Publishers, Inc., NY, USA, Worth Publishers, Inc., NY, USA, 1997.
- [29] Z. Mamdouh, M.C. Giocondi, C. Le Grimellec, In situ determination of intracellular membrane physical state heterogeneity in renal epithelial cells using fluorescence ratio microscopy, *Eur Biophys J*, 27 (1998) 341-351.

- [30] O.G. Mouritsen, and P.K.J. Kinnunen, Role of lipid organization and dynamics for membrane functionality. In *Biological membranes: A molecular perspective from computation and experiment*, (Merz, K.M.Jr., and B. Roux, Eds.) Birkhäuser, Berlin, (1996) 463-502.
- [31] O.G. ] Mouritsen, and O.S. Andersen, eds, *In Search of a new Biomembrane Model*, The Royal Danish Academy of Science and Letters, Copenhagen. , (1998).
- [32] P.K. Kinnunen, On the principles of functional ordering in biological membranes, *Chem Phys Lipids*, 57 (1991) 375-399.
- [33] P.K. Kinnunen, A. Koiv, J.Y. Lehtonen, M. Rytomaa, P. Mustonen, Lipid dynamics and peripheral interactions of proteins with membrane surfaces, *Chem Phys Lipids*, 73 (1994) 181-207.
- [34] J.F. Tocanne, L. Cezanne, A. Lopez, B. Piknova, V. Schram, J.F. Tournier, M. Welby, Lipid domains and lipid/protein interactions in biological membranes, *Chem Phys Lipids*, 73 (1994) 139-158.
- [35] E.M. Bevers, P. Comfurius, D.W. Dekkers, R.F. Zwaal, Lipid translocation across the plasma membrane of mammalian cells, *Biochim Biophys Acta*, 1439 (1999) 317-330.
- [36] E. Prenner, A. Sommer, N. Maurer, O. Glatter, R. Gorges, F. Paltauf, A. Hermetter, Lateral microheterogeneity of diphenylhexatriene-labeled choline phospholipids in the erythrocyte ghost membrane as determined by time-resolved fluorescence spectroscopy, *J Membr Biol*, 174 (2000) 237-243.
- [37] R. Welti, M. Glaser, Lipid domains in model and biological membranes, *Chem Phys Lipids*, 73 (1994) 121-137.
- [38] G.J. Schutz, G. Kada, V.P. Pastushenko, H. Schindler, Properties of lipid microdomains in a muscle cell membrane visualized by single molecule microscopy, *EMBO J*, 19 (2000) 892-901.
- [39] A.R. Kessler, S. Yehuda, Learning-induced changes in brain membrane cholesterol and fluidity: implications for brain aging, *Int J Neurosci*, 28 (1985) 73-82.
- [40] F. Schroeder, J.K. Woodford, J. Kavecansky, W.G. Wood, C. Joiner, Cholesterol domains in biological membranes, *Mol Membr Biol*, 12 (1995) 113-119.
- [41] R. Dahiya, B. Boyle, B.C. Goldberg, W.H. Yoon, B. Konety, K. Chen, T.S. Yen, W. Blumenfeld, P. Narayan, Metastasis-associated alterations in phospholipids and fatty acids of human prostatic adenocarcinoma cell lines, *Biochem Cell Biol*, 70 (1992) 548-554.

- [42] J. Zicha, J. Kunes, M.A. Devynck, Abnormalities of membrane function and lipid metabolism in hypertension: a review, *Am J Hypertens*, 12 (1999) 315-331.
- [43] F.L. S.Jaksch, A. Koutsioubas, S. Mattauch, O. Holderer, O. Ivanova, and H. Frielinghaus, Influence of ibuprofen on phospholipid membranes, *Physical Review E*, 91 (2015).
- [44] R.S. Cantor, The lateral pressure profile in membranes: a physical mechanism of general anesthesia, *Biochemistry*, 36 (1997) 2339-2344.
- [45] J.M. Seddon, and R.H. Templer, polymorphism of lipid-water systems. In handbook of Biological Physics volume 1. , Elsevier Science B.V., Amsterdam 1995
- [46] J.M. Boggs, Lipid intermolecular hydrogen bonding: influence on structural organization and membrane function, *Biochim Biophys Acta*, 906 (1987) 353-404.
- [47] D. Marsh, Lateral pressure in membranes, *Biochim Biophys Acta*, 1286 (1996) 183-223.
- [48] T. Inoue, H. Kamaya, and I. Ueda, Alcohol effects on rapid kinetics of water transport through lipid membranes and location of the main barrier, *Biochim Biophys Acta*, 815 (1985) 168-190.
- [49] H.I. Petrache, S.W. Dodd, M.F. Brown, Area per lipid and acyl length distributions in fluid phosphatidylcholines determined by  $(2)H$  NMR spectroscopy, *Biophys J*, 79 (2000) 3172-3192.
- [50] T.X. Xiang, B.D. Anderson, Permeability of acetic acid across gel and liquid-crystalline lipid bilayers conforms to free-surface-area theory, *Biophys J*, 72 (1997) 223-237.
- [51] G.L. Jendrasiak, The hydration of phospholipids and its biological significance, *J Nutr Biochem*, 7 (1996) 599-609.
- [52] G.L. Jendrasiak, J.H. Hasty, The hydration of phospholipids, *Biochim Biophys Acta*, 337 (1974) 79-91.
- [53] H.E. Alper, D. Bassolino-Klimas, and T.R. Stouch. 1993., The Limiting behavior of water hydrating a phospholipid monolayer: a computer simulation study, *Chem Phys*, 99 5547-5559.

- [54] H. Brockman, Dipole potential of lipid membranes, *Chem Phys Lipids*, 73 (1994) 57-79.
- [55] T.J. McIntosh, Hydration properties of lamellar and non-lamellar phases of phosphatidylcholine and phosphatidylethanolamine, *Chem Phys Lipids*, 81 (1996) 117-131.
- [56] M.S. Webb, S.W. Hui, P.L. Steponkus, Dehydration-induced lamellar-to-hexagonal-II phase transitions in DOPE/DOPC mixtures, *Biochim Biophys Acta*, 1145 (1993) 93-104.
- [57] V.A. Parsegian, R.P. Rand, D.C. Rau, Osmotic stress, crowding, preferential hydration, and binding: A comparison of perspectives, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 97 (2000) 3987-3992.
- [58] R. Koynova, M. Caffrey, Phases and phase transitions of the phosphatidylcholines, *Biochim Biophys Acta*, 1376 (1998) 91-145.
- [59] D.V. Luu, L.Cambon, and M. matlouthi, Perturbation of liquid-water structure by ionic substances, *J Mol Struct*, 237 (1990) 411-419.
- [60] C. Leidy, W.F. Wolkers, K. Jorgensen, O.G. Mouritsen, J.H. Crowe, Lateral organization and domain formation in a two-component lipid membrane system, *Biophys J*, 80 (2001) 1819-1828.
- [61] L.K. Nielsen, T. Bjornholm, O.G. Mouritsen, Fluctuations caught in the act, *Nature*, 404 (2000) 352.
- [62] J.Y.A. Lehtonen, and P.K.J. Kinnunen., Evidence for phospholipid microdomain formation in liquid crystallin liposomes reconstituted with *Escherichia coli* lactose permease., *Biophys J*, 80 (1997) 1819-1828.
- [63] L.K. Srivastava, S.M.I kazmi, A.J.Blume, and R.K.Mishra., Reconstitution of affinity-purified dopamine D2 receptor binding activities by specific lipids., *Biochim Biophys Acta*, 900 (1987) 175-182.
- [64] J.M. Holopainen, M.I. Angelova, T.Söderlund, and P.K.J: Kinnunen, Vectorial budding of vesicles by asymmetrical enzymatic formation of ceramide in giant liposomes. , 78, 830-835.(2009)
- [65] R.M. Epand, Relationship of phospholipid hexagonal phases to biological phenomena, *Biochem Cell Biol*, 68 (1990) 17-23.

- [66] Y.B.Y.a.A. Kornberg, membrane attachment activates DnaA protein, The initiation protein of chromosome replication in *Escherichia coli.*, *proc Natl Acad Sci Usa*, 85 (1988) 7202-7205.
- [67] P. Laggner, M. Kriechbaum, Phospholipid phase transitions: kinetics and structural mechanisms, *Chem Phys Lipids*, 57 (1991) 121-145.
- [68] M. Bloom, E. Evans, O.G. Mouritsen, Physical properties of the fluid lipid-bilayer component of cell membranes: a perspective, *Q Rev Biophys*, 24 (1991) 293-397.
- [69] P.a.P.K.J.K. Moustonen, Activation of phospholipase A2 by adriamycin in vitro. Role of drug-lipid interaction, *J Biol Chem*, 266. (1991) 6302-6307.
- [70] R. Kumar, O. Holian, B. Cook, and P. Roshani, Inhibition of rat brain protein kinase C by lipid soluble psychotropics, *Neurochem Res*, 22 (1997) 1-10.
- [71] S.D. Krämer, N.J. Abbott, and D.J. Begley, Biological models to study blood-brain barrier permeation. In *Pharmacokinetic optimization in Drug research. Biological, Physicochemical, and Computational Strategies*, Testa, B., H. van de Waterbeemd, G. Folkers and R. Guy, Eds., Wiley-VCH& Verlag Helvetica Chimica Acta, Weinheim and Zürich, Germany, (2001) 127-153.
- [72] R.L.-R. Lüllman. H, and O. Wassermann. , Lipidosis induced by amphiphilic cationic drugs., *Biochem Pharmacol.*, 27 (1978) 1103-1108.
- [73] J.P. Adler-Moore, and R.T. Proffit., Development, characterization, efficacy and mode of action of AmBisome, a unilamellar liposomal formulation of amphotericin B., *J lipos Res.*, 3 (1993) 429-450.
- [74] D.C. Drummond, O. Meyer, K. Hong, D.B. Kirpotin, D. Papahadjopoulos, Optimizing liposomes for delivery of chemotherapeutic agents to solid tumors, *Pharmacol Rev*, 51 (1999) 691-743.
- [75] P.Winsor, Hydrotropy, solubilisation and related emulsification processes., *Transactions of the faraday Society*, 44 (1948) 376-398.
- [76] W.S. J.Schulman, and L.Prince., Mechanism of formation and structure of microemulsions by electron microscopy., *The Journal of Physical Chemistry*, 63 (1959) 1677-1680.
- [77] T.H.a. J.Schulman, Transparent Water-in-Oil Dispersions: The Oleopathic Hydro-Micelle., *Nature*, 152 (1943) 102-103.



- [78] C.Solans and H.Kunieda, Industrial Applications of Microemulsions., Surfactant Science Series, M.Dekker, (1997).
- [79] S.Friberg, Micellazation, solubilization, and microemulsions, Mittal, K.L and American Chemical Society. Micellazation, solubilization, and microemulsions, Band 1, Plenum Press,, (1977).
- [80] H.L.a.S.F. G.Gillberg, *NMR and IR investigation of the conditions detemining the stability of microemulsions*, *Journal of Colloid and interface Science.*, 33 (1970) 40-53.
- [81] K.Shinoda and T. Ogawa, *The solubilization of water in nanoqueus solutions of nonionic surfactans.*, *Journal of Colloid and interface Science.*, 24 (1967) 56-60.
- [82] K.S.a. H.Saito, The stability of o/w type emulsion as functions of temperature and HLB of emulsifiers: The emuslification by PIT-method., *Journal of Colloid and interface Science.*, 30 (1969) 258-263.
- [83] D.Shah, Surface phenomena in enhanced oil recovery., Plenum Press, (1981).
- [84] K.S.a.R.S. M.J. Schwuger, Microemulsion in technical processes, *Chemical Reviews*, 95 (1995) 849-864.
- [85] R.L. J.Sjöblom, and S.E. Friberg, Microemulsions- phase equilibria characterization, structure, applications and chemical reactions., *Advances in Colloid and Interface Scieince.*, 65 (1996) 125-287.
- [86] R.S.a. Bayer-Ag., mikroemulsionen als medium für chemische Reaktionen., *Nachrichten aus Chemie, Technik und Laboratorium*, 40 (1992) 1344-1352.
- [87] M.Pileni, Reverse micelles as microreactors, *The Journal of Physical Chemistry*, 97 (1993) 6961-6973.
- [88] M.Höfer, Chemische Kampfstoffe: Ein Überblick, *Chemie in unserer Zeit*, 36 (2002) 148-155.
- [89] M.-M.B.a.A. Richardt, Decontamination of Warfare Agents: *Enzymatic methods for the removal of B/C Weapons*, Wilel-VCH Verlag GmbH&Co.KGaA, (2008).
- [90] C.Stubenrauch, Microemulsion:Background, new Concepts, Applications, prespectives., Oxford: Wiley-VCH verlag, (2009).
- [91] T.Hellweg, Phase structure of microemulsions, *Current opinion in Colloid and Intarface Science*, 7 (2002) 50-56.

- [92] C.C. A.Biasio, P. Codastefano, P.Tartaglia, J.rouch and S.Chen, Phase behavior of dense three-component ionic microemulsions and electrical conductivity in the lamellar phase., *Physical Review E*, 47 (1993) 4258-4264.
- [93] C.M. N.Freiberger, L.de Campo and O.Glatte, An attempt to detect bicontinuity from sans data, *Journal of Colloid and interface Science.*, 312 (2007) 59-67.
- [94] B.T. S.Wellert, J.Koetz, A.Richardt, A.lapp, O.Holderer, J.Gäb, M-M.Blum, CSchulreich, R.Stehle and T. Hellweg, The DFphase from loligo vulgaris in sugar surfactant-based bicontinuous microemulsions: Structure, dynamics, and enzyme activity, *European Biophysics Journal*, 40 (2011) 761-774.
- [95] A.Zilman and R.Granek, Undulations and dynamic structure factor of membranes, *Physical Review Letters*, 99 (1996) 5605-5614.
- [96] R.Strey, microemulsion microstructure and interfacial curvature, *Colloid and Polymer Science.*, 272 (1994) 1005-1019.
- [97] G.M.C.a.R.E. Hausman, *The Cell: A Molecular approach*, Sinauer Associates (2016).
- [98] A.J.J.L. B. Alberts, D. Morgan, M.Raff, K.Roberts and P.Walter, *Molecular Biology of Cell*, Taylor&Francis Group Sixth Edition (2014).
- [99] B.M.a.T.P. W.Lim, *Cell Signaling: principles and mechanisms*, Taylor&Francis Group, (2014).
- [100] K.I.G. M. A. Yildirim, M.E.Cusick, A.L. Barbasi and M.Vidal, *Nat Biotechnol*, 25 (2007) 1119-1125.
- [101] P.Cohen, Protein kinases — the major drug targets of the twenty-first century?, *Nat Rev Drug Discov*, 1 ( 2002) 309-315.
- [102] K. Hac-Wydro, J. Kapusta, A. Jagoda, P. Wydro, P. Dynarowicz-Latka, The influence of phospholipid structure on the interactions with nystatin, a polyene antifungal antibiotic A Langmuir monolayer study, *Chem Phys Lipids*, 150 (2007) 125-135.
- [103] A.M. A. Grancelli, M. E. Cabañas, Ò. Domènech, S. Merino, J. Luis Vázquez, M.Teresa Montero, M.Viñas, and J. Hernández-Borrell, Interaction of 6-Fluoroquinolones with Dipalmitoylphosphatidylcholine Monolayers and Liposomes, *Langmuir*, 18 (24) (2002) 9177-9182.
- [104] T. Guinan, C. Godefroy, N. Lautredou, S. Pace, P.E. Milhiet, N. Voelcker, F. Cunin, Interaction of antibiotics with lipid vesicles on thin film porous silicon using reflectance interferometric Fourier transform spectroscopy, *Langmuir*, 29 (2013) 10279-10286.

- [105] Z. Sajjadian, Cheraghi, N., Mohammadi Nejad, S., Hassani, L., , Interaction of aurein 1.2 and its analogue with DPPC lipid bilayer", *Journal of Biological Physics*, 43(1) (2017) 127-137.
- [106] L.M.T. A.V. Agasosler, D.Cejka, E.Bakstad, L.K.Sydnes and H.Holmsen, , Chorpromazine-induced increase in dipalmitoylphosphatidylserine surface area in monolayers at room temperature, *Biochemical Pharmacology*, 61 (2001) 817-825.
- [107] A.T. S.Goncvaes, J. Abade, L.N. de Medeiros, E. Kurtenbach and N.C. Santos, , Evaluation of the membrane lipid selectivity of the pea defensin Psd1, *Bba-biomembranes*, 1818 (2012) 1420-1426.
- [108] J. Y.-W, G.Gao, Z.Chen and F.-G.Wu, Fluorescence studies on the interaction between chlorpromazine and model cell membranes, *New Journal of Chemistry*, 41 (2017) 4048-4057.
- [109] G.B. A. Ambrosini, and G. Zolese, Lipid-drug interaction: thermodynamic and structural effects of antimicotic fluconazole on DPPC liposomes, *Chem Phys Lipids*, 95 (1998) 37-47.
- [110] N.H.a.R.B. A.Preetha, Comparison of paclitaxel penetration in normal and cancerous cervical model monolayer membranes, *Colloid Surface B*, 53 (2006) 179-186.
- [111] K.G.a.J.C. S.S. Feng, Molecular Interactions between a Lipid and an Antineoplastic Drug Paclitaxel (Taxol) within the Lipid Monolayer at the Air/Water Interface, *Langmuir*, 18 (2002) 4061-4070.
- [112] A.S.a.V.L. C.Peetla, Biophysical Interactions with Model Lipid Membranes: Applications in Drug Discovery and Drug Delivery, *Mol. Pharmaceutics*, 6 (2009) 1264-1276.
- [113] J.E.P. A.Doisy, T.Ivanova, I. Panaiotov and J.L.Dubois, Phospholipid/Drug Interactions in Liposomes Studied by Rheological Properties of Monolayers, *Langmuir*, 12 (1996) 6098-6103.
- [114] G.B.a.H. Mohwald, Langmuir monolayers to study interactions at model membrane surfaces, *Adv Colloid Interfac*, 100 (2003) 563-584.
- [115] J.D.a.A. Gibaud, *X-ray and Neutron reflectivity: principles and application*, Springer, Berlin, (2009).
- [116] E.B.S. S.K.Sinha, S.Garoff and H.B. Stanley, X-ray and neutron scattering from rough surfaces, *Physical Review B*, 38 (1988) 2297-2311.

- [117] A.K.a.S.P. S.Mattauch, Magnetic reflectometer with high incident angle, Journal of large-scale research facilities JLSRF, 1 (2015) A8.
- [118] O.S.a.T.K. Y.Khaydukov, Neutron reflectometer with X-ray option, Journal of large-scale research facilities JLSRF, 1 (2015) A38.
- [119] MLZ, Neutron optics- Instrument service- Science-projects, [www.mlzgarching.de](http://www.mlzgarching.de).
- [120] A.F. H.Frielinghaus, I.Berts and G.Magiapia. , KWS1 Instrument, Journal of large-scale research facilities, JLSRF, 1 (2015) A28.
- [121] G.D.W.a. F.S.Bates, Absolute calibration of small-angle neutron scattering data, Journal of Applied Crystallography, 20 (1987) 28-40.
- [122] V.pipich and Z.Fu, Very small angle scattering diffractometer with focusing mirror, Journal of large-scale research facilities JLSRF, 1 (2015) A31.
- [123] V.T. S.Desert, J.Oberdisse and A.Brulet, The new very-small-angle neutron scattering spectrometer at Laboratoire Léon Brillouin, J Appl Crystallogr, 40 (2007) S471-473.
- [124] G.Fragneto-Cusani, Neutron reflectivity at the solid/liquid interface: examples of applications in biophysics,  
Journal of Physics: Condensed Matter, 13 (2001).
- [125] R.J Roe, Methods of x-ray and Neutron scattering in polymer science, , Oxford University Press, New York, (2000).
- [126] A. Nelson, Co-refinement of multiple-contrast neutron/X-ray reflectivity data using MOTOFIT, J Appl Crystallogr, 39 (2006) 273-276.
- [127] H. Frielinghaus, Small-angle scattering model for multilamellar vesicles, Physical Review E, 76 (2007).
- [128] M.K.a. S.M.Ritzau, J. Appl Crystallogr, J. Appl Crystallogr, 24 (1991) 753-758.
- [129] J.Israelashvili, Intermolecular and Surface forces, Academic press  
1992.
- [130] R. Nagarjan, Molecular Packing Parameter and Surfactant Self-Assembly: The Neglected Role of the Surfactant Tail†, Langmuir, 18 (2002) 31-38.
- [131] D.F.E.a.H.K. Wenneström, The colloidal domain: where physic , chemistry, biology and technology meet, Wiley-VCH, New York, 1999, (1999).

- [132] J.T.M.a.C.H. S.W.Hui, Acyl Chain Interdigitation in Saturated Mixed-Chain Phosphatidylcholine Bilayer Dispersions, *Biochemistry-US*, 23 ( 1984) 5570-5577.
- [133] L.F.Braganza and D.L Worcester, Hydrostatic pressure induces hydrocarbon chain interdigitation in single-component phospholipid bilayers, *Biochemistry-US*, 25 (1986) 2591-2596.
- [134] T.J.M. R.V.McDaniel, and S.A. Simon, Induction of an interdigitated gel phase in fully hydrated phosphatidylcholine bilayers, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*, 731 (1983) 97-108.
- [135] I.C. M.L.Manca, P.Matricardi, S.Lampis, X. Fernandez-Busquets, A.M.Fadda and M. Manconi, Molecular arrangements and interconnected bilayer formation induced by alcohol or polyalcohol in phospholipid vesicles, *Colloid Surface B*, , 117 (2014) 360-367.
- [136] G.C.a.S.K. N.E.Nagel, The mechanism of the solute-induced chain interdigitation in phosphatidylcholine vesicles and characterization of the isothermal phase transitions by means of dynamic light scattering, *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*, 1111 (1992) 263-269.
- [137] T.R. H.Martinez-Seara, M. Pasenkiewicz-Gierula, I.Vattulainen, M.Kartunen and R. Reigada, Effect of Double Bond Position on Lipid Bilayer Properties: Insight through Atomistic Simulations, *J Phys Chem B*, 111 (2007), 1162-1168.
- [138] W.J.a.R.v.K. R.Steitz, Influence of Charge Density and Ionic Strength on the Multilayer Formation of Strong Polyelectrolytes, *Langmuir*, 17 (2001) 4471-4474.
- [139] C.Tanford, *The hydrophobic effect: formation of micelle and biological membranes*, Wiley, New York, 1973, (1973).
- [140] S. Jaksch, F. Lipfert, A. Koutsioubas, S. Mattauch, O. Holderer, O. Ivanova, H. Frielinghaus, S. Hertrich, S.F. Fischer, B. Nickel, Influence of ibuprofen on phospholipid membranes, *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 91 (2015) 022716.
- [141] R.D.R. M.Vaccaro, G.Mangiapia, A.M. Carnerup, G. D Errico,, F.Ruffo and L.Padauano, Lipid based nanovectors containing ruthenium complexes: a potential route in cancer therapy, *Chem. Commun.*, (2009) 1404-1406.
- [142] L.C.a.M.J.H. B.Mui, Extrusion technique to generate liposomes of defined size., *Methods in Enzymology*, 367 (2003) 3-14.
- [143] A.S. G. D'Ericco, G. Mangiapia, G. Vitiello, A. Radulescu, A. Molinaro, R. Lanzetta and L.Paduano, Characterization of liposomes formed by lipopolysaccharides from *Burkholderia cenocepacia*, *Burkholderia multivorans* and *Agrobacterium tumefaciens*:

from the molecular structure to the aggregate architecture, *Phys Chem Chem Phys*, 12 (2010) 13574-13585.

[144] M.v. G. Mangiapia, G.D'Ericco, H.Frielinghaus, A.Radulescu, A. Molinaro, R. Lanzetta and L. Paduano, Cubosomes for ruthenium complex delivery: formulation and characterization, *Soft Matter*, 7 (2011) 10577-10580.

[145] E.J.W. P. Fischer, Rheology of food materials, *Curr. Op. Coll. Interf. Sci*, 16 (2011) 36-40.

[146] R.S.S. D.O. Shah, "Improved Oil Recovery by Surfactant and Polymer Flooding", , Academic Press, New York, (1977).

[147] A. Einstein, Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen, *Annalen der Physik*, 19 (1906) 289-306.

[148] E.K. S. Hoffmann, N. Willenbacher, Using capillary bridges to tune stability and flow behavior of food suspensions, *Food Hydrocolloids* 40 (2014) 44-52.

[149] A.D. A. Mourchid, J. Lambard, E. Lécolier, P. Levitz, Phase Diagram of Colloidal Dispersions of Anisotropic Charged Particles: Equilibrium Properties, Structure, and Rheology of Laponite Suspensions, *Langmuir*, 11 (1995) 1942-1950.

[150] J.F.D. J. Bicerano, D.A. Brune, Model for the Viscosity of Particle Dispersions, *J. Macromol. Sci. C* 39 (1999) 561-642.

[151] M.K. H. Frielinghaus, O. Holderer, M. Monkenbusch, D. Richter, Acceleration of membrane dynamics adjacent to a wall, *Phys. Rev. E* 85 (2012).

[152] O.H. F. Lipfert, H. Frielinghaus, M.-S. Appavou, C. Do, M. Ohl, D. Richter, Long wavelength undulations dominate dynamics in large surfactant membrane patches, *Nanoscale* 7(2015) 2578-2586.

[153] H. Frielinghaus, M. Kerscher, O. Holderer, M. Monkenbusch, D. Richter, Acceleration of membrane dynamics adjacent to a wall, *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 85 (2012) 041408.

[154] C.I.M. ] I. Santamaría-Holek, The rheology of concentrated suspensions of arbitrarily-shaped particles, *J. Coll. Interf. Sci.*, 346 (2010) 118-126.

[155] M.M. H. Endo, M. Monkenbusch, J. Allgaier, G. Gompper, D. Richter, B. Jakobs, T. Sottmann, R. Strey, I. Grillo, Effect of amphiphilic block copolymers on the structure and phase behavior of oil–water-surfactant mixtures, *J. Chem. Phys*, 115 (2001) 580-600.

- [156] M.S. G. Gompper, Phase Transitions and Critical Phenomena”, Academic, London, 16 (1994) 1-176.
- [157] A.G.Z. N. Gov, S. Safran, , Hydrodynamics of confined membranes, Phys. Rev. E 70 (2004), 011104.
- [158] <http://www.anton-paar.com/us-en/products/group/rheometer>, <http://www.anton-paar.com/us-en/products/group/rheometer>, <http://www.anton-paar.com/us-en/products/group/rheometer>, <http://www.anton-paar.com/us-en/products/group/rheometer>.
- [159] H.F. A.V. Feoktystov, Z. Di, S. Jaksch, V. Pipich, M.-S. Appavou, E. Babcock, R. Hanslik, R. Engels, G. Kemmerling, H. Kleines, A. Ioffe, D. Richter, T. Brückel, KWS-1 high-resolution small-angle neutron scattering instrument at JCNS: current state, J. Appl. Cryst. , 48 (2015) 61-70.
- [160] L.D. E. Kentzinger, B. Alefeld, U. Rücker, J. Stellbrink, A. Ioffe, D. Richter, T. Brückel, KWS-3, the new focusing-mirror ultra small-angle neutron scattering instrument and reflectometer at Jülich, Physica B 350 (2004) E779-E781.
- [161] S.T.M. H. E. King, M.Y. Lin, J.P. Singh, T.G. Mason, , Structure and rheology of organoclay suspensions, Phys. Rev. E 75 (2007) 021403.
- [162-fish] P. Fischer, E.J. Windhab, Curr. Op. Coll. Interf. Sci. (2011) 16, 36-40
- [163or] D.O. Shah, R.S. Schechter, “Improved Oil Recovery by Surfactant and Polymer Flooding”, Academic Press, New York (1977)
- [164einst] A. Einstein, AdP (1906) 19, 289-306, und A. Einstein, AdP (1911) 34, 591-592
- [165koos] S. Hoffmann, E. Koos, N. Willenbacher, Food Hydrocolloids (2014) 40, 44-52
- [166lrd] A. Mourchid, A. Delville, J. Lambard, E. Lécolier, P. Levitz, Langmuir (1995) 11, 1942-1950
- [167holek] I. Santamaría-Holek, C.I. Mendoza, J. Coll. Interf. Sci. (2010) 346, 118-126
- [168bicerano] J. Bicerano, J.F. Douglas, D.A. Brune, J. Macromol. Sci. C (1999) 39, 561-642
- [169cf] H. Rehage, H. Hoffmann, Mol. Phys. (1991) 74, 933-973
- [170cf2] C.-M. Chen, G.G. Warr, J. Phys. Chem. (1992) 96, 9492-9497
- [171clay] F. Lipfert, O. Holderer, H. Frielinghaus, M.-S. Appavou, C. Do, M. Ohl, D. Richter, Nanoscale (2015) 7, 2578-2586

- [172ginses] H. Frielinghaus, M. Kerscher, O. Holderer, M. Monkenbusch, D. Richter, *Phys. Rev. E* (2012) 85, 041408
- [173gisans] M. Kerscher, P. Busch, S. Mattauch, H. Frielinghaus, D. Richter, M. Belushkin, G. Gompper, *Phys. Rev. E* (2011) 83, 030401
- [174supporting mat] Supporting Materials: Tunable viscosity modification through particles: When particles decrease the viscosity of complex fluids.
- [175safran] N. Gov, A.G. Zilman, S. Safran, *Phys. Rev. E* (2004) 70, 011104
- [176gg] H. Endo, M. Mihailescu, M. Monkenbusch, J. Allgaier, G. Gompper, D. Richter, B. Jakobs, T. Sottmann, R. Strey, I. Grillo, *J. Chem. Phys.* (2001) 115, 580-600
- [177gg2] G. Gompper, M. Schick, "Phase Transitions and Critical Phenomena", edited by C. Domb, J. Lebowitz, Academic, London, (1994) Vol. 16, pp. 1-176
- [178ap] S. Rogers, J. Kohlbrecher, M.P. Lettinga, *Soft Matter* (2012) 8,7831-7839
- [179ap2] <http://www.anton-paar.com/us-en/products/group/rheometer/>
- [180kws1] A.V. Feoktystov, H. Frielinghaus, Z. Di, S. Jaksch, V. Pipich, M.-S. Appavou, E. Babcock, R. Hanslik, R. Engels, G. Kemmerling, H. Kleines, A. Ioffe, D. Richter, T. Brückel, *J. Appl. Cryst.* (2015) 48, 61-70
- [181kws11] H. Frielinghaus, A. Feoktystov, I. Berts, G. Mangiapia, *J. large-scale res. facil.*, <http://dx.doi.org/10.17815/jlsrf-1-26>
- [182kws3] E. Kentzinger, L. Dohmen, B. Alefeld, U. Rücker, J. Stellbrink, A. Ioffe, D. Richter, T. Brückel, *Physica B* (2004) 350, E779-E781
- [183kws33] V. Pipich, Z. Fu, *J. large-scale res. facil.*, <http://dx.doi.org/10.17815/jlsrf-1-28>
- [184prism] H. Frielinghaus, O. Holderer, F. Lipfert, M. Monkenbusch, N. Arend, D. Richter, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* (2012) 686, 71-74
- [185br1] O. Holderer, H. Frielinghaus, D. Byelov, M. Monkenbusch, J. Allgaier, D. Richter, *J. Chem. Phys.* (2005) 122, 094908
- [186king] H. E. King, S.T. Milner, M.Y. Lin, J.P. Singh, T.G. Mason, *Phys. Rev. E* (2007) 75, 021403
- [187hanley] H.J.M. Hanley, G.C. Straty, *Langmuir* (1994) 10, 3362-3364
- [188] H.F. O. Holderer, D. Byelov, M. Monkenbusch, J. Allgaier, D. Richter, , Dynamic properties of microemulsions modified with homopolymers and diblock copolymers: The



- determination of bending moduli and renormalization effects, *J. Chem. Phys.*, 122 (2005), 094908.
- [189] D.-A.e.a. Mirea, Role of the biomolecular interactions in the structure and tribological properties of synovial fluid., *Tribology International*, (2013) 302-311
- [190] G. Cevc, Drug delivery across the skin, *Expert Opinion on Investigational Drugs*, 6 (1997) 1887-1937.
- [191] E. Touitou, N. Dayan, L. Bergelson, B. Godin, M. Eliaz, Ethosomes - novel vesicular carriers for enhanced delivery: characterization and skin penetration properties, *J Control Release*, 65 (2000) 403-418.
- [192] M. Tanaka, Physics of interactions at biological and biomaterial interfaces, current opinion in *Colloid and Interface Science*, 18 (2013) 432-439.
- [193] H.J. Butt, Cappella, B. & Kappl, M., Force measurements with the atomic force microscope. Technique, interpretation and applications., *Surface science reports* 59 (2005) 1-152.
- [194] D. Constantin, G. Brotons, T. Salditt, E. Freyssingeas, A. Madsen, Dynamics of bulk fluctuations in a lamellar phase studied by coherent x-ray scattering, *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 74 (2006) 031706.
- [195] T. Reusch, D.D. Mai, M. Osterhoff, D. Khakhulin, M. Wulff, T. Salditt, Nonequilibrium collective dynamics in photoexcited lipid multilayers by time resolved diffuse x-ray scattering, *Phys Rev Lett*, 111 (2013) 268101.
- [196] C.R. Safinya, D. Roux, G.S. Smith, S.K. Sinha, P. Dimon, N.A. Clark, A.M. Bellocq, Steric interactions in a model multimembrane system: A synchrotron x-ray study, *Phys Rev Lett*, 57 (1986) 2718-2721.
- [197] G. Pabst, Katarasas, J., Raghunathan, V.A. & Rappolt, M., Structure and interactions in the anomalous swelling regime of phospholipid bilayers, *Lagmuir*, 19 (2003) 1716-1722.
- [198] L. Malaquin, T. Charitat, J. Daillant, Supported bilayers: combined specular and diffuse X-ray scattering, *Eur Phys J E Soft Matter*, 31 (2010) 285-301.
- [199] T. Salditt, Thermal fluctuations and stability of solid-supported lipid membranes., *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17 (2005) R287.

- [200] C.R. Safinya, E.B. Sirota, D. Roux, G.S. Smith, Universality in interacting membranes: The effect of cosurfactants on the interfacial rigidity, *Phys Rev Lett*, 62 (1989) 1134-1137.
- [201] E. Schneck, F. Rehfeldt, R.G. Oliveira, C. Gege, B. Deme, M. Tanaka, Modulation of intermembrane interaction and bending rigidity of biomembrane models via carbohydrates investigated by specular and off-specular neutron scattering, *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 78 (2008) 061924.
- [202] C.L. Armstrong, W. Haussler, T. Seydel, J. Katsaras, M.C. Rheinstadter, Nanosecond lipid dynamics in membranes containing cholesterol, *Soft Matter*, 10 (2014) 2600-2611.
- [203] G.R. Fragneto, M., Structure and dynamical studies from bio-mimetic systems: an overview, *Comptes Rendus Physique*, 8 (2007) 865-883.
- [204] C.L. Armstrong, M.A. Barrett, A. Hiess, T. Salditt, J. Katsaras, A.C. Shi, M.C. Rheinstadter, Effect of cholesterol on the lateral nanoscale dynamics of fluid membranes, *Eur Biophys J*, 41 (2012) 901-913.
- [205] K.H. Lan, N. Ostrowsky, D. Sornette, Brownian dynamics close to a wall studied by photon correlation spectroscopy from an evanescent wave, *Phys Rev Lett*, 57 (1986) 17-20.
- [206] H. Matusuoka, **Evanescent wave light scattering fusion of the evanescent wave and light scattering techniques to the study of colloids and polymers near the interface.**, *Macromolecular rapid communications*, 22 (2001) 51-67.
- [207] H.e.a. Frielinghaus, Scattering depth correction of evanescent waves in inelastic neutron scattering using a neutron prism, *Nuclear Instruments and methods in Physics research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.*, 686 (2012) 71-74.
- [208] F.L. S.Jaksch, A. Koutsioubas, S. Mattauch, O. Holderer, O.Ivanova, and H. Frielinghaus, Influence of ibuprofen on phospholipid membranes, *Physical Review E*, 91 (2015).
- [209] V.P. Romanov, S.V. Ul'yanov, Dynamic and correlation properties of solid supported smectic-A films, *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 66 (2002) 061701.
- [210] S.K. Sinha, Z. Jiang, L.B. Lurio, X-ray photon correlation spectroscopy studies of surfaces and thin films, *Adv Mater*, 26 (2014) 7764-7785.

- [211] I. Sikharulidze, I.P. Dolbnya, A. Fera, A. Madsen, B.I. Ostrovskii, W.H. de Jeu, Smectic membranes in motion: approaching the fast limits of x-ray photon correlation spectroscopy, *Phys Rev Lett*, 88 (2002) 115503.
- [212] W.H. de jeu, ostrovskii, B.I.&Shalaginov, A.N., Structure and fluctuations of smectic membranes, *Reviews of Modern Physics*, 75 (2003) 181.
- [213] A. Caille, Remarques sur la diffusion des rayons x dans les smectiques., *CR Acad. Sci. Serie B*, 274 (1972) 891-893.
- [214] I.F. Brozowska, Z.A., The influence of pH on phosphatidylcholine monolayer at the air/aqueous solution interface, *Colloid and Surface B: Biointerfaces*, 27 (2003) 303-309.
- [215] M.e.a. Ohl, The spin-echo spectrometer at the spallation neutron source, *Nuclear Instruments and methods in Physics research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.*, 696 (2012) 85-99.
- [216] R.C.W. Nesnidal, T.G., Multilayer dielectric structure for enhancement of evanescent waves., *Applied optics.*, 35 (1996) 2226-2229.