

# Simulation zweier aktiver, wechselwirkender Kolloide unter Berücksichtigung hydrodynamischer Kräfte

Bachelorarbeit  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Bachelor of Science

vorgelegt von  
Tim Ehrlich  
geboren in Bielefeld

Lehrstuhl für Theoretische Physik I  
Fakultät Physik  
Technische Universität Dortmund  
2014

1. Gutachter : Prof. Dr. Kierfeld

2. Gutachter : Prof. Dr. Stolze

Datum des Einreichens der Arbeit: 06. Juli 2014

## Kurzfassung

Diese Arbeit untersucht das Verhalten eines Systems aus zwei aktiven Kolloiden in einem Fluid, die über ein Lennard-Jones-Potential wechselwirken. Zunächst wird die Hydrodynamik des Fluids vernachlässigt.

Unter diesen Bedingungen zeigt die Verteilungsfunktion der Abstandskoordinate die Existenz mehrerer stabiler Zustände, **einem** beim Potentialminimum, und je **einem** bei kleineren und größeren Abständen. Die äußeren Zustände sind Charakteristika aktiver Kolloide und wurden schon in anderen Arbeiten gefunden ([7]). Der mittlere Zustand entsteht durch die Oszillation der Antriebsstärke der Relativbewegung.

Im Grenzfall  $k_B T \gg \alpha$  nähert sich das Verhalten dem passiver Teilchen. Während des Übergangs verschmelzen die Maxima in der Verteilung zu einem breiten Maximum außerhalb vom Potentialminimum, das sich mit steigender Temperatur langsam zu diesem verschiebt.

Der Einfluss der Hydrodynamik besteht vor allem darin, dass die zwei Teilchen insgesamt etwas näher beieinander bleiben und der Zustand bei dem Potentialminimum etwas ausgeprägter ist. Die Teilchen verhalten sich wie Teilchen mit einem schwächeren Antrieb. Der Übergang zu einem Verhalten ähnlich dem passiver Teilchen verändert ebenfalls.

## Abstract

This thesis analyzes the behaviour of a system, composed of two active colloids in a fluid, which interact via a Lennard-Jones potential. At first we neglect the hydrodynamic forces.

With this conditions the distribution function of the distance between the colloids shows the existence of three stable states: one at the minimum of the potential, one at a smaller and the last at a greater distance. These outer states are distinctive for active colloids and have been found in other articles like [7]). The state at the minimum exists due to the diversifying impulsion strength of the relative movement.

In case of  $k_B T \gg \alpha$  the system behaves like one composed of passive colloids. During the transition the maxima become one single maxima located between the old and farther than the minimum of the potential. If you keep increasing the temperature, this maximum approaches the minimum.

The influence of hydrodynamic forces are mainly that the two colloids stay closer to each other and the state at the minimum is more distinctive than without hydrodynamic. The particles behave like particles with a weaker impulsion. The way of transition changes also.

# Inhaltsverzeichnis

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Inhaltsverzeichnis</b>                                       | <b>IV</b> |
| <b>Abbildungsverzeichnis</b>                                    | <b>V</b>  |
| <b>Symbolverzeichnis</b>  | <b>VI</b> |
| <b>1 Einleitung</b>   | <b>1</b>  |
| <b>2 Theoretische Grundlagen</b>                                | <b>3</b>  |
| 2.1 Passive Teilchen - Brownsche Bewegung . . . . .             | 3         |
| 2.1.1 Passive Teilchen im Lennard-Jones-Potential . . . . .     | 4         |
| 2.2 Aktive Teilchen . . . . .                                   | 4         |
| 2.2.1 Die Peclet-Zahl . . . . .                                 | 5         |
| 2.2.2 Die Verteilungsfunktion des Winkels $\phi$ . . . . .      | 6         |
| 2.2.3 Ein aktives Teilchen im Lennard-Jones-Potential . . . . . | 6         |
| 2.2.4 Zwei aktive Teilchen . . . . .                            | 6         |
| 2.3 Hydrodynamik . . . . .                                      | 8         |
| 2.3.1 Der Oseen-Tensor . . . . .                                | 8         |
| 2.3.2 Hydrodynamik und thermische Kräfte . . . . .              | 9         |
| <b>3 Simulation</b>   | <b>11</b> |
| 3.1 Einheiten der Simulation . . . . .                          | 11        |
| 3.2 Umsetzung der Simulation . . . . .                          | 12        |
| 3.2.1 Berechnung von Observablen . . . . .                      | 12        |
| 3.3 Charakteristische Größen diffusiver Bewegungen . . . . .    | 12        |
| 3.4 Ein aktives Teilchen im Lennard-Jones-Potential . . . . .   | 15        |
| 3.5 Aktive Zwei-Teilchen-Systeme . . . . .                      | 17        |
| 3.6 Einfluss der Hydrodynamik . . . . .                         | 19        |
| 3.6.1 Passive Zwei-Teilchen-Systeme . . . . .                   | 19        |
| 3.6.2 Aktive Zwei-Teilchen-Systeme . . . . .                    | 19        |
| <b>4 Zusammenfassung und Ausblick</b>                           | <b>22</b> |
| <b>Quellenverzeichnis</b>                                       | <b>23</b> |

# Abbildungsverzeichnis

|      |  |    |
|------|--|----|
| 1.1  | Beispiel eines aktiven Janus-Teilchens mit chemischem Antrieb [1] . . .  | 1  |
| 3.1  | Beispiel-Trajektorien für verschiedene, freie Kolloide . . . . .   | 13 |
| 3.2  | Ortsverteilung eines passiven Teilchens im Lennard-Jones-Potential . . .                                       | 13 |
| 3.3  | Charakteristische Größen der Simulation . . . . .  | 14 |
| 3.4  | Ortsverteilungen eines aktiven Kolloids bei $k_B T = 0$ . . . . .  | 15 |
| 3.5  | Trajektorie eines aktiven Kolloids bei kleinem $k_B T_\phi$ . . . . .  | 15 |
| 3.6  | Ortsverteilungen eines aktiven Kolloids mit $k_B T = k_B T_\phi$ . . . . .                                     | 16 |
| 3.7  | Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit $k_B T = 0$ . . . . .                                    | 17 |
| 3.8  | Verteilung der Antriebsstärke der Relativbewegung in $\alpha$ . . . . .  | 17 |
| 3.9  | Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit $k_B T = k_B T_\phi$ . .                                 | 18 |
| 3.10 | Passive und aktive Teilchen mit und ohne Wechselwirkung unter dem Einfluss der Hydrodynamik . . . . .          | 19 |
| 3.11 | Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit $k_B T = 0$ mit und ohne Hydrodynamik . . . . .          | 20 |
| 3.12 | Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit $k_B T = k_B T_\phi$ mit und ohne Hydrodynamik . . . . . | 21 |

lkajösdfkjäsöldffksfd

# Kapitel 1

## Einleitung

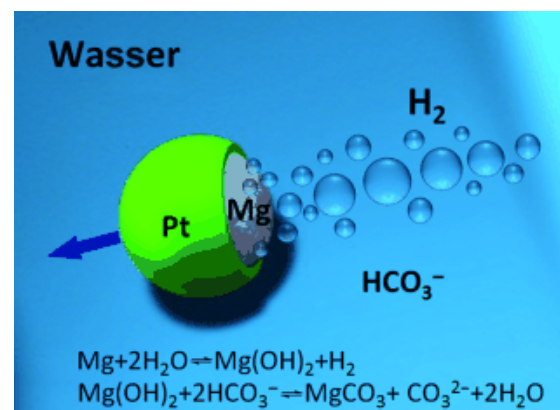
In der Erforschung biologisch oder medizinisch relevanter Systeme spielt das Bewegungsverhalten des Systems, bzw. von Teilen des Systems eine große Rolle. Beispiele sind das Diffusionsverhalten von Zellen, bzw. Bakterien oder Viren in Flüssigkeiten.

Zur Untersuchung des Bewegungsverhaltens dieser Systeme hat sich die Modellierung über modifizierte Random Walks als sinnvoll erwiesen, wie in dem Artikel „Random walk models in biology“[2] gezeigt wird. Bisher erfolgreiche Anwendungen sind die Simulation der Bewegung von Myxobakterien[3], die tumorbedingte Migration von Zellen in Blut[4] oder die Modellierung von Angiogenese[5].

Verhalten sich die untersuchten Objekte wie passive Teilchen in einem Fluid aus leichteren Bestandteilen, kann ihre Bewegung über Brownsche Dynamik beschrieben werden. Viele biologisch Interessante Objekte, zum Beispiel tierisches Sperma oder auch viele Bakterien (etwa *Pseudomonas aeruginosa*), verfügen jedoch über eine Fortbewegungsmöglichkeit, einen Antrieb in eine bestimmte Vorzugsrichtung, etwa mittels Flagellen.

Die Bewegung solcher Objekte setzt sich aus einer Überlagerung von thermischen Fluktuationen und einer Translationsbewegung in eine über eine gewisse Zeit korrelierte Vorzugsrichtung zusammen.

Eine weitere Teilchengruppe mit einem solchen Verhalten bilden einige der Janus-Partikel, Partikel, deren Oberfläche sich in verschiedene Teilflächen mit unterschiedlichen, physikalischen Eigenschaften einteilen lässt. Katalysiert eine der Teilflächen eine exotherme Reaktion mit dem umgebenden Fluid, so erfährt das Teilchen eine Kraft in entsprechende Richtung und besitzt einen Antrieb.



**Abbildung 1.1:** Beispiel eines aktiven Janus-Teilchens mit chemischem Antrieb [1]

Zusammenfassend werden Teilchen mit dem Charakteristikum eines Antriebs aktive Kolloide genannt.

Diese sind aus physikalischer Sicht von Interesse, da die analytische Lösung der zugehörigen Bewegungsgleichungen (z.B. die Langevin-Gleichung) noch nicht gefunden wurde. Bisherige Erkenntnisse beruhen vor Allem auf Simulationen. Die Ergebnissen zeigen einen deutlichen Unterschied zum Verhalten passiver Kolloide. Im Fall eines aktiven Kolloids in einem externen Potential beispielsweise liegt das Maximum der Ortsverteilung nicht länger beim Potentialminimum.

Eine offene Frage ist, ob diese Charakteristik in Systemen mit mehreren bis vielen aktiven Kolloiden erhalten bleibt oder der Effekt verschwindet. In letzterem Fall könnten sich Verteilungen ergeben, die denen passiver Teilchen in einem System mit veränderten Parametern entsprechen.

Diese Arbeit nähert sich dem Viel-Teilchen-Problem, indem ein System aus zwei wechselwirkenden aktiven Kolloiden untersucht wird. Es wird geklärt, ob die Verschiebung des Maximums der Ortsverteilung auch in der Verteilung des Relativabstandes zu finden ist. Außerdem wird der Einfluss der Hydrodynamik des umgebenden Fluids auf das Verhalten der Kolloide betrachtet. Da das Verhalten aktiver Kolloide im Grenzfall  $k_B T \gg \alpha$  gegen das Verhalten passiver Kolloide konvergieren muss, wird außerdem die Übergangsphase von charakteristisch aktivem Verhalten zu passivem Verhalten untersucht.



## Kapitel 2

# Theoretische Grundlagen

Das Ziel dieses Kapitels ist die theoretische Beschreibung eines Systems von zwei aktiven Kolloiden in einem Wärmebad, die über ein Lennard-Jones-Potential miteinander wechselwirken. Das Wärmebad ist hier ein viskoses Fluid, deren Hydrodynamik die Teilchenbewegung ebenfalls beeinflusst.

Dieses Ziel wird Schritt für Schritt erreicht: Ausgangspunkt ist die Beschreibung eines passiven Teilchens in einem Fluid. Darauf aufbauend wird zunächst ein Potential eingeführt, gefolgt von einem aktiven Antrieb, eines zweiten Teilchens und der Hydrodynamik. Die Kapitel 2.1 und 2.3 sind dabei an die Ausführungen in [6] angelehnt.

### 2.1 Passive Teilchen - Brownsche Bewegung

Für passive Teilchen, welche sich in thermischem Kontakt mit einem Fluid befinden, gibt es zwei verschiedene Ansätze, ihre Bewegung zu beschreiben: einen über die Ortskoordinate  $\vec{r}$  des Teilchens und einen über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $\Phi(\vec{r})$ . Beide Formulierungen besitzen Vor- und Nachteile, hier wird aber vor Allem ersterer verfolgt, da sich in diesen leicht der aktive Antrieb involvieren lässt. Um diesen auszuformulieren, benötigt man alle Kräfte die auf das passive Teilchen wirken: Die thermischen Bewegungen der Fluidbestandteile führen zu Stößen mit dem Teilchen und einer Kraft  $\vec{\xi}$ . Diese wird durch eine gaußverteilte Zufallskraft mit folgenden Momenten beschrieben:

$$\langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0, \langle \vec{\xi}(t) \vec{\xi}(t') \rangle = 2\gamma k_b T \delta(t - t') \quad (2.1)$$

Die resultierende Bewegung ist durch das Fluid gedämpft. Die Geschwindigkeit des Teilchens bleibt dadurch so gering, dass von einem laminaren Strömungsverhalten des Fluids ausgegangen werden kann und die dämpfende Reibung gut durch die Stokes-Reibungskraft  $F_S = -\gamma \dot{\vec{r}}$  mit  $\gamma = 6\pi\eta R$  beschrieben wird. Hierbei ist  $\eta$  die Viskosität der Flüssigkeit,  $R$  der Teilchenradius und  $\dot{\vec{r}}$  der Geschwindigkeitsvektor des Teilchens. Es folgt für die Bewegungsgleichung:

$$m\ddot{\vec{r}}(t) = \vec{\xi}(t) + F_S - \vec{\nabla}U(\vec{r}(t)) \quad (2.2)$$

Für Fluide großer Viskosität gilt  $m\ddot{\vec{r}} \ll F_S$  und man erhält die Langevin-Gleichung:

$$\gamma\dot{\vec{r}}(t) = \vec{\xi}(t) - \vec{\nabla}U(\vec{r}(t)) \quad (2.3)$$

Der zweite Ansatz soll auch kurze Erwähnung finden, er beschreibt die Diffusion über die Dichtefunktion  $\Phi(x, t)$ , wobei  $\Phi(x, t)dx$  die Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass Teilchen zum Zeitpunkt  $t$  in einem Intervall  $dx$  um den Ort  $x$  aufzufinden. Dieser Ansatz führt zur Smoluchowski-Gleichung, die in einer Dimension wie folgt aussieht:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\gamma\partial x} \left( k_B T \frac{\partial\Phi}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \Phi \right) \quad (2.4)$$

Die Gleichgewichtslösung entspricht der Phasenraum-dichte aus der statistischen Mechanik integriert über die Impulsdimensionen und lautet:

$$\Phi = \frac{1}{Z} e^{-U(x)/(k_B T)} \quad (2.5)$$

$$\text{mit } Z = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-U(x)/(k_B T)} \quad (2.6)$$

Herleitung der Smoluchowski-Gleichung und Beweis der Lösung sind z.B. in [6] aufgeführt.

### 2.1.1 Passive Teilchen im Lennard-Jones-Potential

Das Lennard-Jones-Potential wird benutzt, um die schwach anziehende Wechselwirkung fester Teilchen zu beschreiben und enthält zwei Parameter,  $\epsilon$  und  $\sigma$ :

$$U(r) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (2.7)$$

$\epsilon$  steht hierbei für die Stärke des Potentials, während  $\sigma$  den Ort des Potentialminimums festlegt. Um nach 2.5 die Aufenthaltswahrscheinlichkeit berechnen zu können, müssen Potentialwände eingeführt werden, da  $\lim_{r \rightarrow \infty} U(r) = 0$  ist. Für Wände bei  $r = 5\sigma$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{Z} e^{-\frac{4\epsilon}{k_B T} \left( \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)} && \text{für } r < 5\sigma \\ \Phi &= 0 && \text{für } r > 5\sigma \end{aligned} \quad (2.8)$$

## 2.2 Aktive Teilchen

Aktive Teilchen zeichnen sich durch eine Vorzugsrichtung  $\vec{n}$  und eine antreibende Kraft der Stärke  $\alpha$  in jene Richtung aus. Somit nimmt die Langevin-Gleichung folgende Form an:

$$\gamma\dot{\vec{r}}(t) = \alpha\vec{n}(t) + \vec{\xi}(t) - \vec{\nabla}U(\vec{r}(t)) \quad (2.9)$$

Die Vorzugsrichtung, beschrieben durch einen Winkel  $\phi$ , unterliegt einer diffusiven Rotationsbewegung (analog zu 2.3):

$$\gamma_\phi \dot{\phi}(t) = \vec{\xi}_\phi(t) \quad (2.10)$$

$\gamma_\phi$  ist die Rotationsreibung und beträgt für eine Kugel mit Radius  $R$ :  $8\pi\eta R^3$ .  $\xi_\phi$  ist die thermische Kraft der Rotationsbewegung mit analogen Momenten wie 2.1. Es wird hier aus theoretischem Interesse zunächst zwischen der Temperatur  $T_\phi$  der Rotationsbewegung und der Temperatur  $T$  der Translationsbewegung unterschieden, auch wenn eine praktische Realisierung dieses Unterschieds schwer umzusetzen ist. Aus 2.10 ergibt sich:

$$\langle (\phi(t + \Delta t) - \phi(t))^2 \rangle = \frac{2k_B T_\phi}{\gamma_\phi} \Delta t \quad (2.11)$$

Kennzeichnend für diffusive Prozesse ist genau die Proportionalität von  $\langle (\phi(\Delta t))^2 \rangle$  und  $\Delta t$ , der charakteristische Faktor heißt daher Diffusionskonstante und wird mit  $D$  bezeichnet.

Eine charakteristische Eigenschaft der Teilchendiffusion aktiver Teilchen ist die zeitliche Korrelation der Vorzugsrichtung:

$$\begin{aligned} \langle (\vec{n}(t + \Delta t) \vec{n}(t)) \rangle &= \langle \cos(\phi(t + \Delta t) - \phi(t)) \rangle \\ &= \exp(-0.5 \langle (\phi(t + \Delta t) - \phi(t))^2 \rangle) \\ &= \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\text{mit } \tau = \frac{\gamma_\phi}{k_B T_\phi} \quad (2.13)$$

$\tau$  ist also ein Maß dafür, wie lange die Vorzugsrichtung in der Zeit korreliert ist.

Analog zur Berechnung von 2.11 lässt sich die zeitabhängigkeit der Diffusion von  $\vec{r}$  berechnen:

$$\langle (\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t))^2 \rangle = \frac{2\alpha^2 \tau}{\gamma^2} \left( \Delta t - \tau \left( 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \right) \right) + \frac{4k_B T}{\gamma} \Delta t \quad (2.14)$$

### 2.2.1 Die Peclet-Zahl

Betrachtet man aktive Teilchen, so gibt es zwei Grenzbetrachtungen, die auf den bekannten Fall passiver Teilchen führen. Der eine ist  $k_B T \gg \alpha$ , da dann die diffusiven Kräfte das System gegenüber dem aktiven Antrieb dominieren. Der andere Grenzfall ist  $\tau \ll 1$ . In diesem Fall ist die Richtung des Antriebs ebenso zufällig wie die thermischen Kräfte. Allerdings ist hier die Stärke  $\alpha$  der Kraft im Gegensatz zur thermischen Kraft  $\xi$  festgelegt.

Ein Maß für die Ausprägung der Charakteristik aktiver Teilchen in einem System ist nach Artikel [7] die dimensionslose Peclet-Zahl  $P_e$ :

$$\begin{aligned} P_e &= \frac{\gamma R \langle \dot{\vec{r}} \rangle}{k_B T} \\ &= \frac{R\alpha}{k_B T} \end{aligned} \quad (2.15)$$

### 2.2.2 Die Verteilungsfunktion des Winkels $\phi$

Für Zeiten  $t \gg \tau$  ist der Winkel  $\phi$  gleichverteilt im Intervall  $(-\pi, \pi)$ . Dieses Ergebniss erhält man über verschiedene Ansätze. Eine Ansatz ist die Smoluchowski-Gleichung (2.5), die besagt, dass für den Gleichgewichtszustands einer Diffusionsbewegung ohne Potential die Verteilungsfunktion eine Konstante ist. Dass das System für  $t \gg \tau$  im Gleichgewichtszustand ist, erkennt man an 2.12, die Vorzugsrichtung ist nach einer Zeit  $t \gg \tau$  nicht mehr mit der des Ausgangszustands korreliert, da die Exponentialfunktion in diesem Limes gegen 0 läuft.

Ein anderer Ansatz betrachtet die Entwicklung der Gaussverteilung des Winkels. Da  $\vec{\xi}_\phi$  gaussverteilt ist, ist  $\phi$  ebenso gaussverteilt. Die Varianz der Gaussverteilung ergibt sich nach 2.11 zu  $\frac{2k_B T_\phi}{\gamma_\phi} \Delta t$ . Ist nun  $t \gg \tau$  so ist die Varianz  $\gg 2$ , also auch  $\gg 2\pi$  und somit der Winkel im Intervall  $(-\pi, \pi)$  gleichverteilt.

### 2.2.3 Ein aktives Teilchen im Lennard-Jones-Potential

Aktive Teilchen verhalten sich in Potentialen grundlegend anders als passive. So wurde schon in diversen Artikeln (z.B. [7]) der Effekt beschrieben, dass das Maximum der Dichtefunktion des Teilchens sich mit zunehmender Antriebsstärke vom Potentialminimum entfernt. Dieser Effekt entsteht durch eine Rotation des Teilchens um das Potentialminimum. Da das Minimum des radialsymmetrischen Lennard-Jones-Potentials bei einem Abstand  $r = 2^{1/6}\sigma$  zum Ursprung liegt, sind hier zwei stabile, rotierende Zustände zu erwarten, einer, der innerhalb des Minimums kreist und einer, der außerhalb des Minimums kreist. Dabei sollte der Abstand dieser zwei Zustände mit steigendem Antrieb zunächst wachsen, bis  $\alpha$  eine Stärke erreicht, die es dem Teilchen ermöglicht, dass Potentialminimum innerhalb weniger Korrelationszeiten zu verlassen. Ab diesem Punkt ist mit einem Verschwinden des äußeren Zustandes zu rechnen.

### 2.2.4 Zwei aktive Teilchen

Für zwei aktive Teilchen, die über ein Lennard-Jones-Potential wechselwirken ergibt sich folgendes, gekoppeltes DGL-System:

$$\gamma \dot{\vec{r}}_1 = \vec{\xi}_1 + \alpha \vec{n}_1 - \vec{\nabla}_{\vec{r}_1} U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.16)$$

$$\gamma \dot{\vec{r}}_2 = \vec{\xi}_2 + \alpha \vec{n}_2 - \vec{\nabla}_{\vec{r}_2} U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.17)$$

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)^6 \right) \quad (2.18)$$

Diese Bewegung lässt sich in die interessantere Relativbewegung mit den Koordinaten  $\vec{R} = 1/2(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$  und  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  transformieren:

$$\dot{\vec{R}} = \frac{1}{2}(\vec{\xi}_1 + \vec{\xi}_2 + \alpha(\vec{n}_1 + \vec{n}_2)) \quad (2.19)$$

$$\dot{\vec{r}} = \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}_2 + \alpha(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) + 2\vec{\nabla}_r U(r) \quad (2.20)$$

Auf die Relativkoordinate  $r$  wirkt also eine thermische Kraft, die der doppelten Temperatur entspricht, da sich bei der Addition zweier gaussverteilter Zufallszahlen die Varianzen addieren und die Varianz von  $\vec{\xi} \propto T$  ist. Außerdem ist die potentielle Kraft doppelt so stark und die Charakteristik des Antriebs ändert sich grundlegend:

$$\begin{aligned} |\vec{n}_1 - \vec{n}_2| &= \sqrt{(\cos \phi_1 - \cos \phi_2)^2 + (\sin \phi_1 - \sin \phi_2)^2} \\ &= 2 \left| \sin \left( \frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \right) \right| \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \arg(\vec{n}_1 - \vec{n}_2) &= \arctan \left( \frac{\sin \phi_1 - \sin \phi_2}{\cos \phi_1 - \cos \phi_2} \right) \\ &= -\frac{\pi}{2} + \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}, \text{ wenn } \frac{\phi_1 + \phi_2}{2} \in [0, \pi] \end{aligned} \quad (2.22)$$

Die Einschränkung in 2.22 muss erfolgen, da der  $\tan$   $\pi$ -periodisch ist und somit Information über den Winkel verloren geht. Dies lässt sich beheben, indem man in 2.21 nicht den Betrag nimmt, so dass die Information in dieser Größe erhalten bleibt. Nach der Einführung von  $\theta_1 = -\pi/2 + 0.5(\phi_1 + \phi_2)$  und  $\theta_2 = 0.5(\phi_1 - \phi_2)$  lässt sich die antreibende Kraft der Relativbewegung neu formulieren als:

$$F_r = -2\alpha \sin(\theta_2) \begin{pmatrix} \cos \theta_1 \\ \sin \theta_1 \end{pmatrix}$$

Da  $\theta_{1,2}$  die Summe, bzw. Differenz von  $\phi_{1,2}$  multipliziert mit  $1/2$  ist, ändern sich die Varianzen der Verteilungen nicht. An ?? erkennt man, dass die Richtung genau wie zuvor diffundiert, während die Stärke oszilliert. Es ist somit für die Relativbewegung ein Verhalten zu erwarten, dass zum Teil dem eines Teilchens mit doppelter Antriebsstärke und zum Teil dem eines passiven Teilchens jeweils in einem doppelt so starken Potential entspricht.

Die Verteilungsfunktion der Antriebsstärke  $|\vec{n}_1 - \vec{n}_2|$  lässt sich leicht angeben unter der Annahme, dass  $\theta_2$  gleichverteilt ist. Werden aus gleichverteilten Zufallszahlen  $x$  neue Zufallszahlen  $x' = f(x)$  generiert, so ergibt sich nach der Inversionsmethode für die Transformation von Zufallszahlen die Dichtefunktion  $\rho$  der Zufallszahlen  $x'$  zu:

$$\begin{aligned}\rho(x') &= d/dx'(f^{-1}(x')) \\ &= d/dx' \arcsin\left(\frac{x'}{2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{4 - x'^2}}\end{aligned}\tag{2.23}$$

## 2.3 Hydrodynamik

Nach Newton wirkt die Reibungskraft nicht nur auf ein Teilchen in einer Flüssigkeit, sondern genauso in entgegengesetzte Richtung auf die Flüssigkeit. Es entsteht eine Strömung in Form eines Geschwindigkeitsfelds  $\vec{v}(\vec{r})$ . Betrachtet man ein System aus zwei Teilchen, so erzeugt jedes ein Geschwindigkeitsfeld, das wiederum mit dem anderen Teilchen wechselwirkt. Die Wechselwirkung beeinflusst sowohl die Rotation als auch die Translation des Teilchens. Hier wird jedoch nur der schwach abfallende Einfluss auf die Translation berücksichtigt, da der Einfluss auf die Rotation schnell abfällt ([8]). Zunächst wird die Hydrodynamik für beliebige, erzeugende Kräfte formuliert.

### 2.3.1 Der Oseen-Tensor

Mit den Stokesschen Näherungen - die Inertialkräfte auf das Fluid sind vernachlässigbar, wir befinden uns in einem Gleichgewichtszustand und das Fluid ist inkompressibel - lassen sich die Auswirkungen einer Volumenkraft  $f$  auf das Fluid als eine Änderung des Spannungstensors  $\sigma_{ab}$  schreiben:

$$\sum_b \frac{\partial}{\partial r_b} \sigma_{ab} = -f_a(\vec{r}).\tag{2.24}$$

Dabei lautet die Definition des Spannungstensors in Fluiden:

$$\sigma_{ab} = \eta \left( \frac{\partial v_b}{\partial r_a} + \frac{\partial v_a}{\partial r_b} \right) + p \delta_{ab}\tag{2.25}$$

$p$  steht in 2.25 für den Druck und  $v$  für die Geschwindigkeit an einem Ort  $\vec{r}$ , während die Indizes  $a, b$  für die entsprechenden Komponenten der Tensoren stehen. Wird 2.25 in 2.24 eingesetzt und die Bedingung der Inkompressibilität ( $\vec{\nabla}_{\vec{r}} \vec{v}(\vec{r}) = 0$ ) ausgenutzt, erhält man die Stokes-Gleichung:

$$\eta \triangle_{\vec{r}} \vec{v}(\vec{r}) + \vec{\nabla}_{\vec{r}} p(\vec{r}) = -\vec{f}(\vec{r})\tag{2.26}$$

Wird ein System betrachtet, indem die externen Volumenkräfte  $\vec{f}(\vec{r})$  mit  $\sum_n \vec{f}_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$  genähert werden können, ergibt sich die Lösung von 2.26 z.B. über eine Fouriertransformation zu:

$$v(\vec{r}) = \sum_n H(\vec{r} - \vec{r}_n) F_n \quad (2.27)$$

$$\text{mit } H(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta|\vec{r}|} (I + \hat{r}\hat{r}) \quad (2.28)$$

$H$  wird auch Oseen-Tensor genannt.  $I$  ist der Einheitstensor,  $\hat{r}$  ist  $\vec{r}$  auf die Länge eins normiert.

Im Fall hydrodynamisch wechselwirkender Teilchen sind die externen Kräfte, die das Geschwindigkeitsfeld erzeugen, das ein Teilchen  $n$  beeinflusst, gerade die Reibungskräfte aller anderen Teilchen. Oder andersherum, das Geschwindigkeitsfeld, das ein Teilchen erzeugt, beeinflusst alle Teilchen außer dem erzeugenden. Der Einfluss des Felds auf ein Teilchen wird genähert, in dem Fluidgeschwindigkeit und die Geschwindigkeit, die sich nach 2.9 ergibt, zu einer Gesamtgeschwindigkeit addiert werden.

### 2.3.2 Hydrodynamik und thermische Kräfte

In einem System von  $N$  Teilchen mit den kennzeichnenden Indices  $1, 2, \dots, N$  (allgemein  $n$  oder  $m$ ) entsteht durch die Einführung der Hydrodynamik eine Kopplung der thermischen Kräfte  $\vec{\xi}_n$ . Diese lässt sich über eine Mobilitätsmatrix  $M_{nm}$  beschreiben, die folgender Maßen definiert ist:

$$M_{n,n} = \frac{1}{\gamma} I \quad (2.29)$$

$$M_{n,m} = H(\vec{r}_n - \vec{r}_m) \text{ bei } n \neq m \quad (2.30)$$

Die korrelierten Momente von  $\vec{\xi}_n$  lauten:

$$\langle \vec{\xi}_n(t) \rangle = 0 \quad (2.31)$$

$$\langle \vec{\xi}_n(t) \vec{\xi}_m(t') \rangle = 2(M^{-1})_{nm} k_B T \delta(t - t') \quad (2.32)$$

Da die Korrelation ortsabhängig ist, würde sie zu einem Drift der Teilchen führen, der in der Langevingleichung 2.9 ausgeglichen werden muss:

$$\dot{\vec{r}}_n = \sum_{m=1}^N M_{nm} \left( -\vec{\nabla}_{\vec{r}_m} U + \vec{\xi}_m(t) + \alpha \vec{n}_m \right) + \frac{1}{2} k_B T \sum_{m=1}^N \frac{\partial}{\partial r_m} M_{nm} \quad (2.33)$$

2.33 ergibt für zwei Teilchen formuliert:

$$\dot{\vec{r}}_{1,2} = \frac{\vec{F}_{1,2}}{\gamma} + H(\vec{r}_{1,2} - \vec{r}_{2,1}) \vec{F}_{2,1} + \frac{1}{2} k_B T \frac{\partial}{\partial r_{2,1}} H(\vec{r}_{1,2} - \vec{r}_{2,1}) \quad (2.34)$$

$$\text{mit } F_{1,2} = \vec{\xi}_{1,2} + \alpha \vec{n}_{1,2} - \vec{\nabla}_{\vec{r}_{1,2}} U(\vec{r}_{1,2}, \vec{r}_{2,1}) \quad (2.35)$$

Hierbei sind entweder überall die ersten oder überall die zweiten Indices zu benutzen.  $\vec{v}_1$  steht für das Geschwindigkeitsfeld, das durch Teilchen 2 erzeugt und am Ort des Teilchens 1 ausgewertet wird. Hier erkennt man auch die oben erwähnte Addition von Fluidgeschwindigkeit und Teilcheneigengeschwindigkeit. Der letzte Summand ist die zu Beginn des Abschnitts genannte Korrektur.



## Kapitel 3

# Simulation

In diesem Kapitel werden die Bewegungsgleichungen aus Kapitel 2 mit numerischen Methoden gelöst und die Ergebnisse präsentiert. Dazu wird zunächst auf wichtige Aspekte wie die verwendeten Einheiten und das verwendete Simulationsverfahren eingegangen.

Anschließend wird analog zum Aufbau vorigen Kapitels Schritt für Schritt das betrachtete System ausgehend vom analytisch gelösten Fall für passive Teilchen erweitert, bis schließlich ein System von zwei aktiven Teilchen mit Lennard-Jones- und hydrodynamischer Wechselwirkung simuliert wird.

### 3.1 Einheiten der Simulation

Um sich für die Simulation nicht auf ein System mit konkreten Maßen für Teilchendurchmesser u.ä. festlegen zu müssen, werden die Differentialgleichungen 2.9 und 2.33 mit einer Variablentransformation  $r, t, m \rightarrow r', t', m'$  dimensionslos geschrieben. Dazu werden Längen, Zeiten und Massen über die Bezugsgrößen  $r_0$ ,  $t_0$  und  $m_0$  ausgedrückt. Diese, beziehungsweise Kombinationen aus diesen können beliebig gesetzt werden, so dass Anzahl und Werte der Parameter der Simulation sich stark vereinfachen. Hier wurde  $r_0 = R$  und  $t_0/m_0 = 1/(6\pi R\eta)$  gewählt, so dass:

$$R' = 1 \quad (3.1)$$

$$\eta' = \eta r_0 t_0 / m_0 = \eta R / (6\pi R\eta) = 1/(6\pi) \quad (3.2)$$

$$\gamma' = 6\pi\eta'R' = 1, \gamma_\phi = 4/3 \quad (3.3)$$

Die letzte Bedingung an die Bezugsgrößen wird so gewählt, dass Energien bezüglich einer Ausgangstemperatur  $T_0$  angegeben werden können:  $m_0 r_0^2 / t_0^2 = k_B T_0$ . Für die Bewegungsgleichung ergibt sich nach der Transformation:

$$\gamma' \frac{dx'}{dt'} = -\vec{\nabla}_{\vec{r}'} U'(\vec{r}') + \xi' + \alpha' \vec{n} \quad (3.4)$$

Um der Übersichtlichkeit willen werden im Folgenden die Apostrophe in der Notation weggelassen.

## 3.2 Umsetzung der Simulation

Die zu simulierenden Differentialgleichungen 2.9 und 2.33 enthalten die unsteten Kräfte  $\xi$  und  $\xi_\phi$ , so dass ein Simulationsverfahren höherer Ordnung keine größere Genauigkeit hervorbringt als ein Verfahren erster Ordnung. Nach dem hier verwendete Euler-Verfahren ergibt sich  $\phi(t + \Delta t)$ , bzw.  $\vec{r}(t + \Delta t)$  aus  $\phi(t)$ , bzw.  $\vec{r}(t)$  zu:

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) + \frac{\xi_\phi(t)}{\gamma_\phi} \Delta t \quad (3.5)$$

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + (\alpha \vec{n}(t) + \vec{\xi}(t) - \vec{\nabla} U(\vec{r}(t))) \frac{\Delta t}{\gamma} \quad (3.6)$$

Der Fehler nach einem Schritt des Euler-Verfahrens wächst mit  $\Delta t^2$  und sollte so klein bleiben, dass er das physikalische Verhalten des simulierten Systems nicht beeinflusst. Diese Bedingung wird im folgenden als erfüllt angenommen, sobald eine Verkleinerung von  $\Delta t$  die Ergebnisse nicht ändert. Im Laufe der Arbeit hat sich herausgestellt, dass für den untersuchten Parameterraum  $\Delta t = 0.01$  ausreichend klein ist. Ein weiterer konstanter Parameter ist  $\sigma = 2$ , da dieser den Ort des Potentialminimums ( $\sqrt[6]{2}\sigma$ ) festlegt und das Verhalten des Systems  $\sigma$ -unabhängig ist, solange alle anderen Kräfte ortsunabhängig sind. Außerdem ist diese Annahme insofern sinnvoll, da das Lennard-Jones-Potential harte Teilchen mit schwacher Anziehung simuliert. Wählt man  $\sigma = 2$  so bedeutet dies, dass sich zwei wechselwirkende Teilchen maximal auf  $2R$  annähern.

### 3.2.1 Berechnung von Observablen

Observablen des Systems werden errechnet, indem über  $N$  verschiedene Trajektorien gemittelt wird:

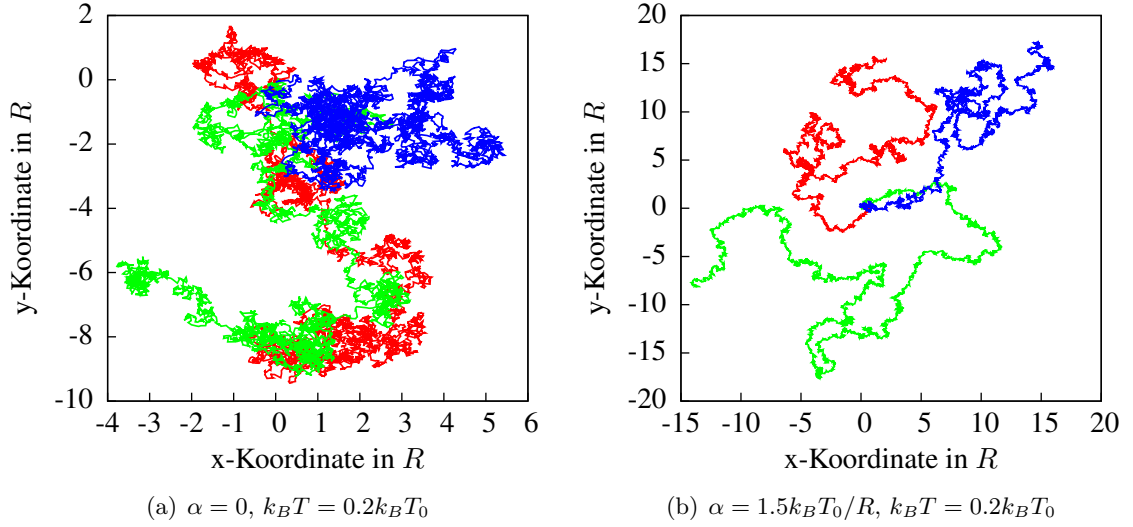
$$\langle O(\vec{r}(t), \vec{p}(t)) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(\vec{r}(t), \vec{p}(t)) \quad (3.7)$$

Bei zeitunabhängigen Größen kann zusätzlich über die Zeit gemittelt werden. Außerdem kann dem System in diesem Fall eine Kalibrierungszeit zugestanden werden, in der nicht gemittelt wird, so dass das Ergebnis unabhängig von den Anfangsbedingungen ist. Soll ein Gleichgewichtszustand untersucht werden, so muss diese Kalibrierungsphase sogar berücksichtigt werden, damit sich das System in einen Gleichgewichtszustand begeben kann, bevor mit der Aufnahme von Observablen begonnen wird.

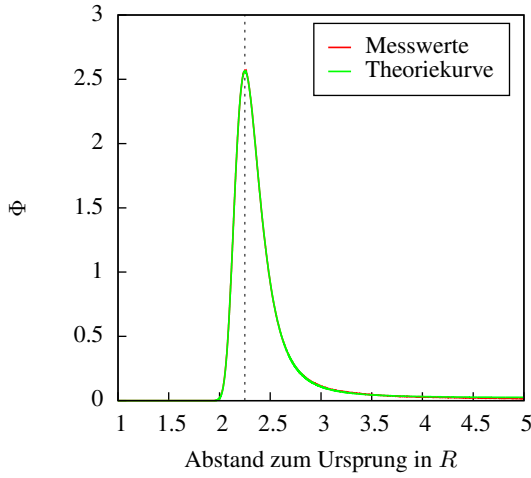
## 3.3 Charakteristische Größen diffusiver Bewegungen

In diesem Kapitel werden die in Kapitel 2 berechneten Zusammenhänge überprüft, bzw. über diese Zusammenhänge wird die Korrektheit des Algorithmuses verifiziert.

In den Abbildungen 3.1(a) und 3.1(b) sind einige Beispieltrajektorien für passive und aktive Teilchen ohne Wechselwirkung und Potential abgebildet.



**Abbildung 3.1:** Beispiel-Trajektorien für verschiedene, freie Kolloide



**Abbildung 3.2:** Ortsverteilung eines passiven Teilchens im Lennard-Jones-Potential

ratur von  $0.2k_B T_0$  und eine Potentialstärke von  $1.0k_B T_0$  angesetzt. Die senkrechte, gestrichelte Linie markiert in allen Abbildungen den Ort des Potentialminimums.

Zunächst werden die Simulationsergebnisse eines freien aktiven Teilchens mit den analytischen Ergebnissen verglichen. Dazu wurden für ein Teilchen mit einer Antriebsstärke von  $\alpha = 1.5k_B T_0/x_0$  in einem Wärmebad mit  $k_B T = k_B T_\phi = 1k_B T_0$  simuliert und die Größen  $\langle(\phi(t + \Delta t) - \phi(t))^2\rangle$ ,  $\langle(\vec{n}(t + \Delta t)\vec{n}(t))\rangle$  und  $\langle(\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t))^2\rangle$  aufgenommen. In den Abbildungen 3.3(a) bis 3.3(d) ist sehr schön die exakte Übereinstimmung zwischen den Simulationsergebnissen und den Theoriekurven gemäß 2.11, 2.12 und 2.14 zu sehen.

In der Abbildung 3.2 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines passiven Teilchens dargestellt, wieder in Theorie und Simulation. Hier wurde eine Tempe-

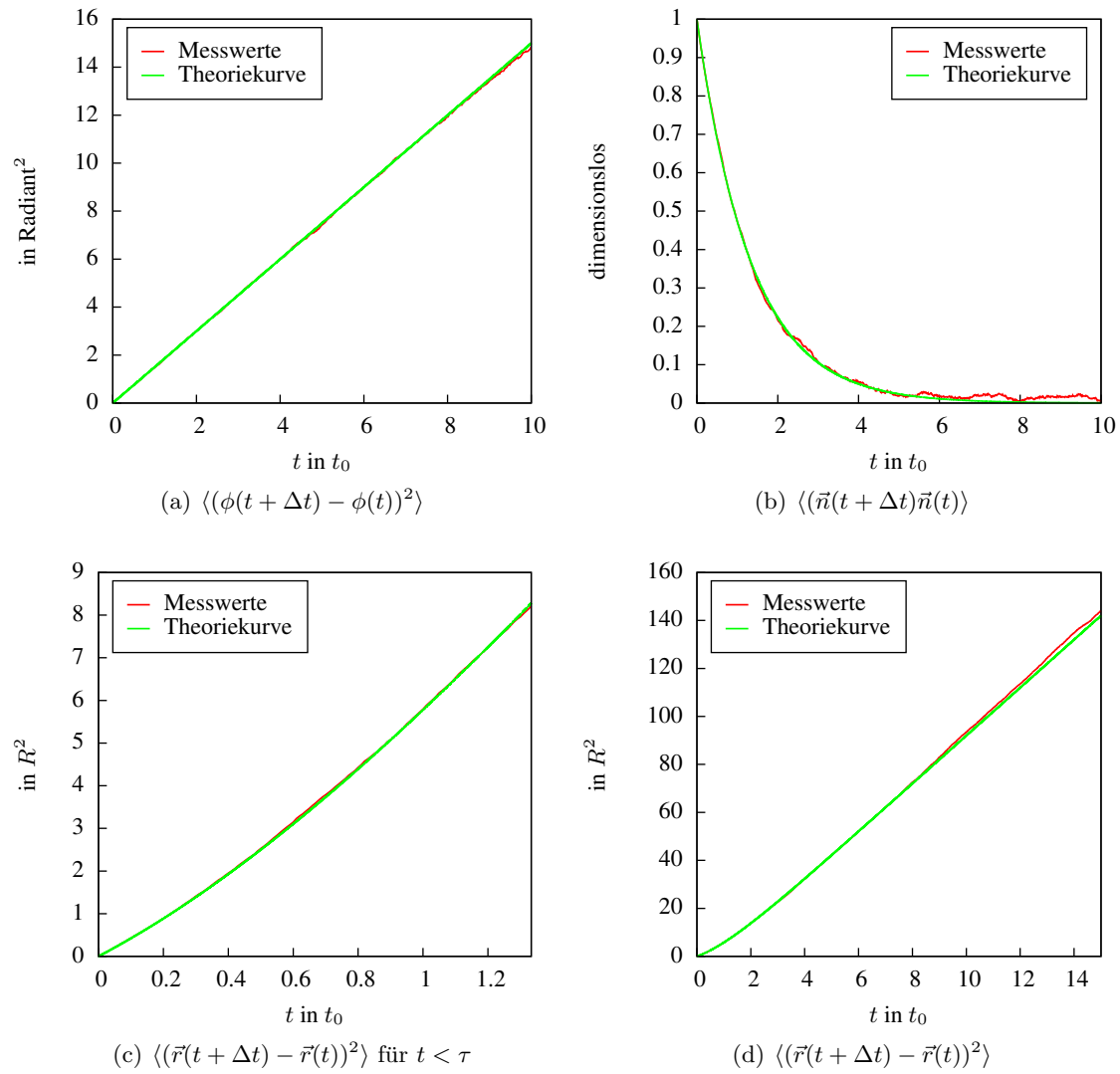
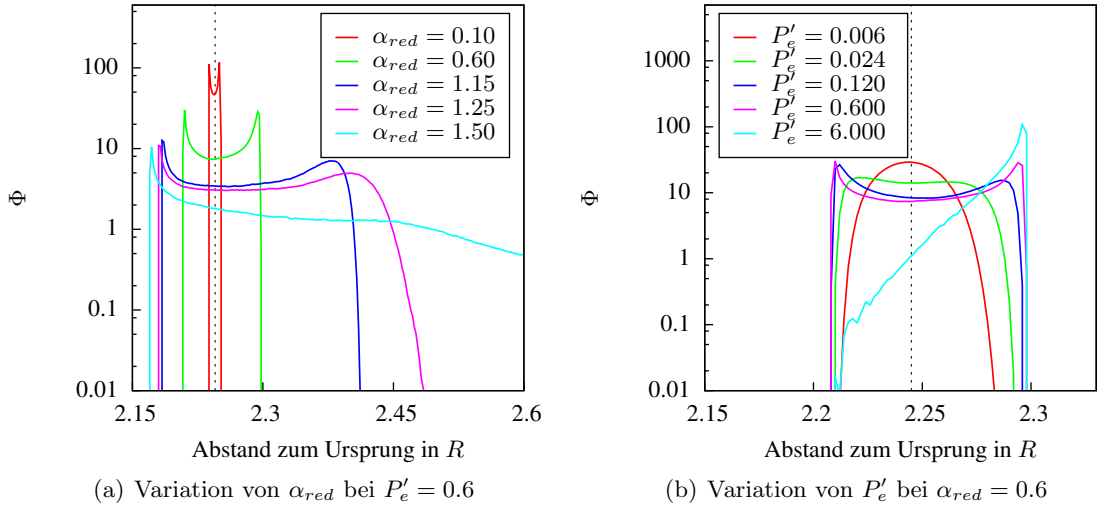


Abbildung 3.3: Charakteristische Größen der Simulation

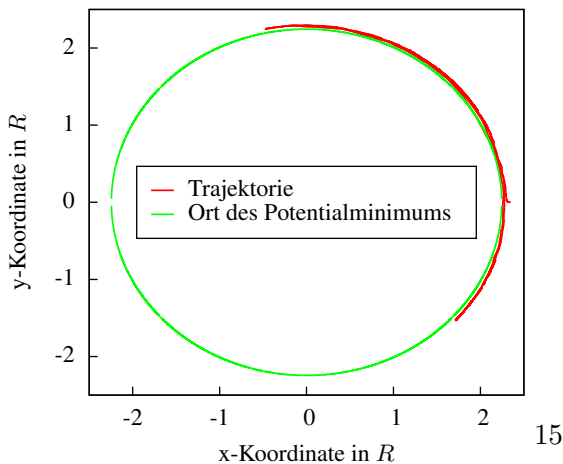
### 3.4 Ein aktives Teilchen im Lennard-Jones-Potential

Um die Interpretation zu erleichtern wird zunächst ein System mit  $k_B T = 0$  untersucht. In diesem Fall verschwindet in der Bewegungsgleichung die Kraft  $\xi$  und die einzigen relevanten Parameter sind  $\alpha_{red} = \alpha/\epsilon$  und  $P'_e$ , wobei letzteres analog zu  $P_e$  definiert ist, lediglich wird  $k_B T$  durch  $k_B T_\phi$  ersetzt.



**Abbildung 3.4:** Ortsverteilungen eines aktiven Kolloids bei  $k_B T = 0$

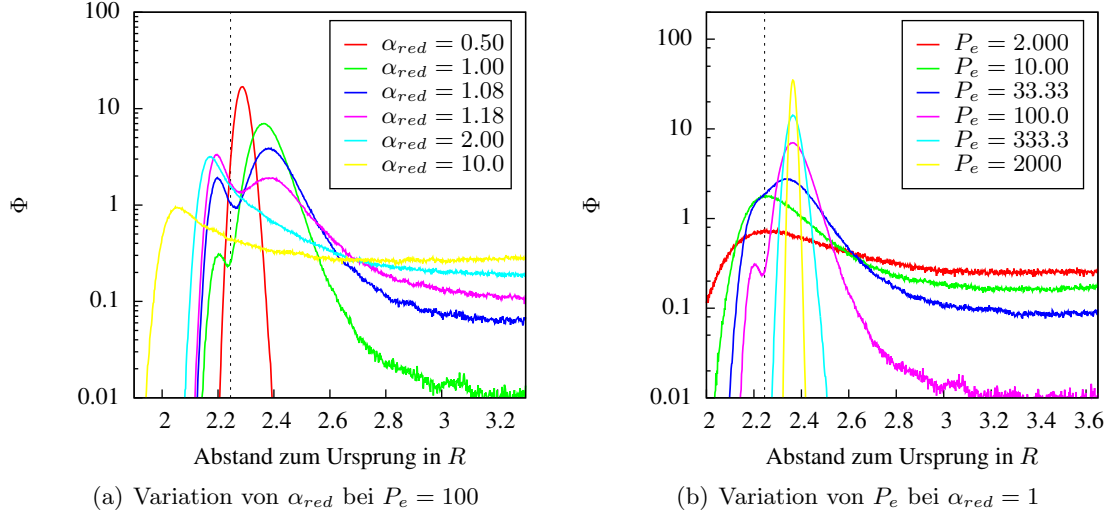
In Abbildung 3.4 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für verschiedene  $\alpha_{red}$  und  $k_B T_\phi = 1k_B T_0$  dargestellt. Die zwei um das Minimum kreisende Zustände sind deutlich zu erkennen, ebenso dass diese sich mit steigendem  $\alpha_{red}$  weiter voneinander entfernen. Sobald der Antrieb größer als die Maximalkraft des Lennard-Jones-Potentials am äußeren Rand ( $\approx 1.2\epsilon$ ) wird, verschwindet der äußere Zustand, da das Teilchen das Potential überwinden kann. Wird die Bedingung nach  $\alpha_{red}$  umgestellt, erhält man  $\alpha_{red} > 1.2$ . Die Simulation zeigt, dass ab  $\alpha_{red} = 1.5$  der äußere Zustand nicht mehr existiert.



**Abbildung 3.5:** Trajektorie eines aktiven Kolloids bei kleinem  $k_B T_\phi$

Die Abhängigkeit von  $P_e$  (bei  $\epsilon = \text{const} = 1k_B T_0$ ) ist in 3.4 abgebildet. Hier ist gut zu erkennen, wie die zwei Zustände im Grenzfall  $\tau \ll 1$  zu einer Verteilung sehr ähnlich der des passiven Teilchens verschmelzen. Interessant ist, dass der äußere Zustand etwas schneller verschwindet als der innere. Im entgegengesetzten Grenzfall,  $\tau \gg 1$ , verschwindet hingegen der innere Zustand. Dies ist so zu erklären, dass das Teilchen an der äußeren Potentialwand entlangläuft und

nicht schnell genug die Richtung ändert, um sich von der Wand zu lösen und gegen die innere Potentialwand zu laufen. Dies ist sehr schön an der Trajektorie in 3.4 zu sehen.



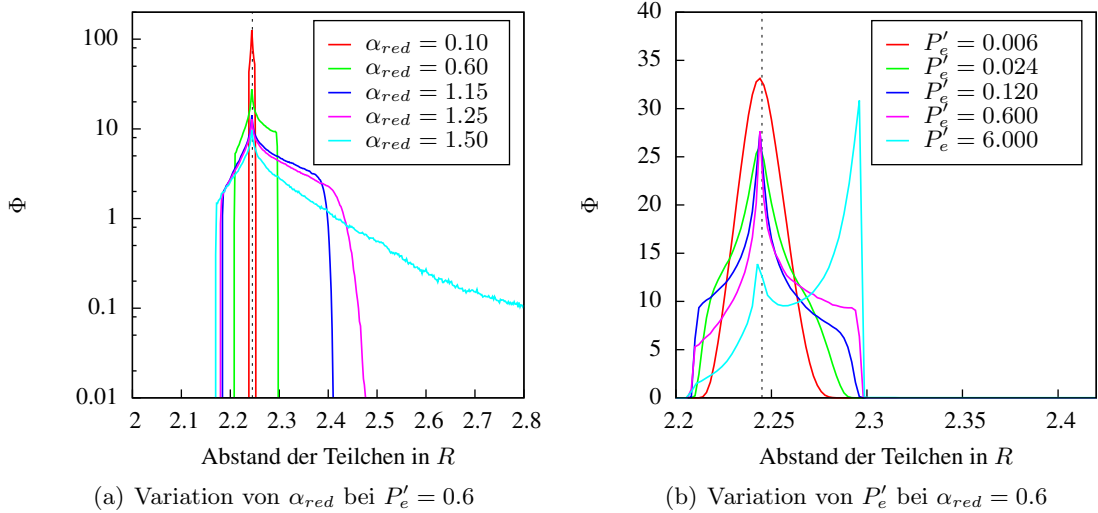
**Abbildung 3.6:** Ortsverteilungen eines aktiven Kolloids mit  $k_B T = k_B T_\phi$

In den letzten beiden Abbildungen 3.4 und 3.4 dieses Abschnitts ist nun  $k_B T = k_B T_\phi$ . In erster Abbildung wurde  $\alpha_{red}$  geändert, in zweiter  $P_e$ . Die Veränderungen erklären sich nun aus den bisherigen Erkenntnissen. Bei kleinem  $P_e$  existiert wie zuvor nur der äußere Zustand. Während  $P_e$  größer wird, kommt zunächst der innere stabile Zustand hinzu, bevor beide Maxima zu einem verschmelzen und erneut ein Verhalten ähnlich dem eines passiven Teilchens auftritt.

Der Unterschied bei der Abhängigkeit von  $\alpha_{red}$  ist nun im Vergleich zu vorher, dass bei kleinem  $\alpha_{red}$  der innere Zustand nicht existiert. Dieser existiert erst ab  $\alpha_{red} \approx 1$ . Bei steigendem  $\alpha_{red}$  erhöht sich die Ausprägung des inneren Maximums, während die des äußeren abnimmt und schließlich verschwindet, wenn das Teilchen das Potential überwinden kann. Parallelen zum Fall  $k_B T = 0$  sind zum einen das auseinanderdriften der zwei Zustände bei steigendem  $\alpha_{red}$  und das Verschwinden des inneren Zustands für große  $P_e$ .

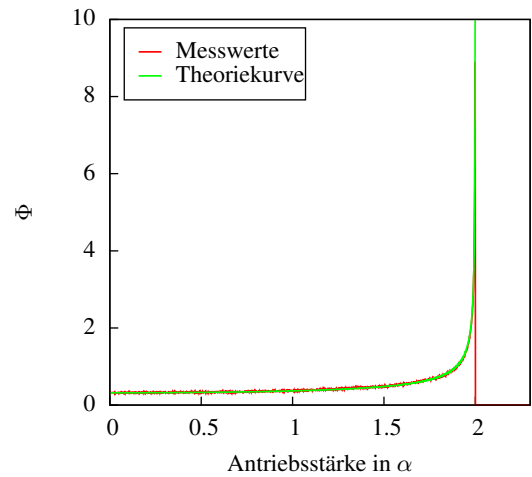
### 3.5 Aktive Zwei-Teilchen-Systeme

Das Zwei-Teilchen-System analog zum betrachteten Ein-Teilchen-System, also zwei Teilchen, die über ein Lennard-Jones-Potential wechselwirken, besitzt die selben Parameter. Insofern wird das selbe Vorgehen gewählt, um die Abhängigkeit von diesen Parametern zu untersuchen.



**Abbildung 3.7:** Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit  $k_B T = 0$

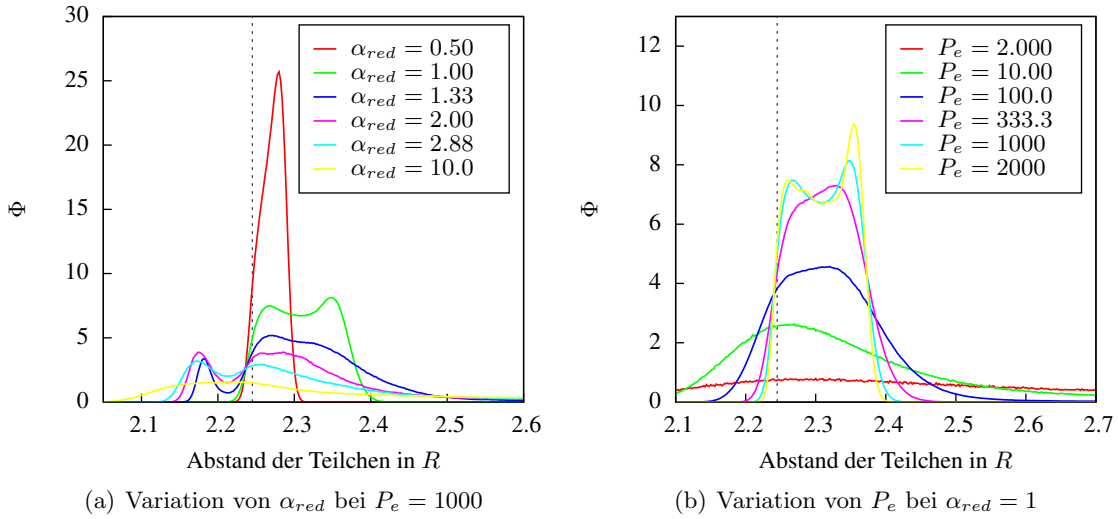
Wie in 2.2.4 vorhergesagt, ergibt sich jedoch ein anderes Verhalten. Dies beruht auf der Verteilung der relativen Antriebsstärke, die nicht länger konstant ist wie im Ein-Teilchen-System. In Abbildung 3.5 ist die Verteilung aus Theorie und Simulation geplottet. Über eine Integration der Verteilung erfährt man, dass in der Hälfte der Fälle der Antrieb kleiner als  $1.4\alpha$  ist. Der aus dieser Verteilung resultierende Unterschied zum Ein-Teilchen-System besteht darin, dass bei jeder Antriebsstärke  $\alpha_{red}$  und jedem  $P_e$  ein ausgeprägtes Maximum beim Potentialminimum existiert. Wird die reduzierte Antriebsstärke bei  $P'_e = 0.6$  variiert, so fällt von diesem Maximum die Aufenthaltswahrscheinlichkeit leicht ab, bis zu den äußeren, stabilen Zuständen, also bis



**Abbildung 3.8:** Verteilung der Antriebsstärke der Relativbewegung in  $\alpha$

zum größten, bzw. kleinsten Abstand, an dem das Teilchen sich befindet. Diese stimmen in Übereinstimmung mit der Theorie mit dem größten, bzw. kleinsten Abstand des Ein-Teilchen-Systems überein. Ebenso stimmt der Punkt, ab dem das Potential überwunden wird, mit dem des Ein-Teilchen-Systems überein. Zunächst überrascht, dass das einzige Maxima beim Potentialminimum liegt, obwohl gemäß der Verteilung der Antriebsstärke etwa zur Hälfte eine Antriebsstärke von über  $1.4\alpha$  vorliegt. Jedoch müssen sich die Kolloide in diesen Fällen zwischen dem äußeren und inneren Zustand entscheiden, während für kleine Antriebe nur ein Zustand in Frage kommt.

Bei der Variation von  $P_e$  ist der einzige Unterschied zum Ein-Teilchen-System ebenfalls das Maximum im Potentialminimum. Durch das Verschwinden des inneren Zustands für große  $P_e$  gewinnt der äußere Zustand wie erwartet an Ausprägung und es bildet sich ein lokales Minimum zwischen mittlerem und äußerem Zustand.



**Abbildung 3.9:** Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit  $k_B T = k_B T_\phi$

Unter der Bedingung  $k_B T = k_B T_\phi$  ergeben sich die Verteilungen in 3.9. Ein deutlicher Unterschied zum Ein-Teilchen-System ist, dass bei  $\alpha_{red} = 1$  der innere Zustand für kein  $P_e$  mehr gefunden wird. Für steigende  $P_e$  beobachtet man wie zuvor, dass zunächst die zwei Maxima zu einem breiten verschmelzen, welches fast vom Potentialminimum bis zum äußeren Zustand reicht, und dieses sich dann zum Potentialminimum hin verschiebt und schamler wird. Der Übergang ähnelt dem des Ein-Teilchen-Systems sehr stark, die Verteilungen sind nur etwas nach außen verschoben.

Für größere  $\alpha_{red}$  existiert auch hier der innerste Zustand. Die steigende Ausprägung dieses Zustands ist erneut zu beobachten, wie auch das Verschwinden des äußeren. Ein aufeinanderdriften der Zustände ist vor dem Verschwinden erkennenbar, nach dem Verschwinden kaum.

Erstaunlich ist, dass durch die Bedingung  $k_B T = k_B T_\phi$ , der mittlere Zustand nicht länger beim Potentialminimum liegt, sondern bei etwas größeren Abständen.

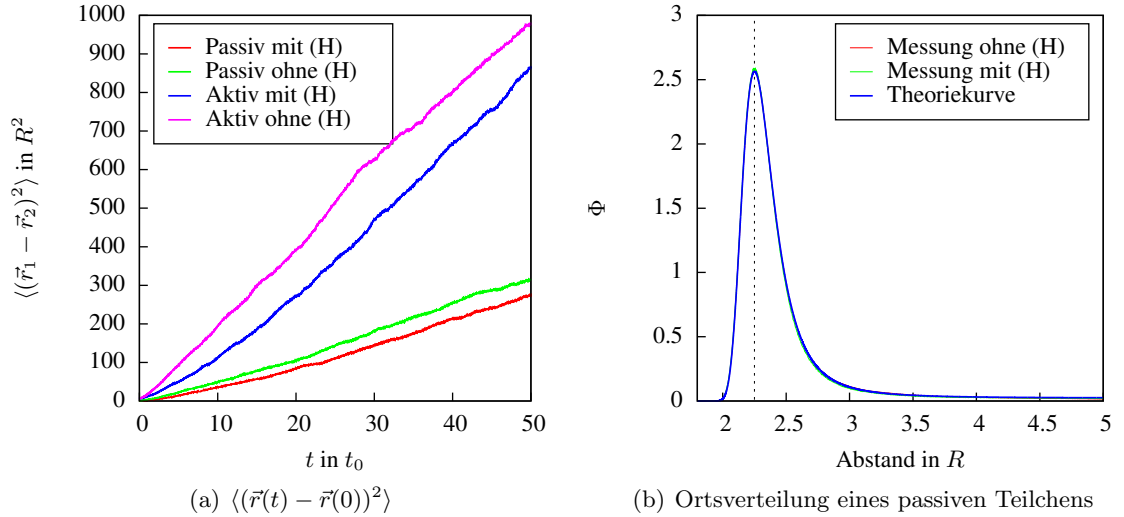


## 3.6 Einfluss der Hydrodynamik

In diesem Kapitel wird der Einfluss hydrodynamischer Wechselwirkung auf die bisher betrachteten Systeme untersucht. (H) bezeichnet hier die Kurven, bzw. Systeme, die unter dem Einfluss der Hydrodynamik entstanden sind.

### 3.6.1 Passive Zwei-Teilchen-Systeme

Für passive Teilchen sollte die Hydrodynamik kein Einfluss auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeit haben. Dies bestätigt auch die Simulation (siehe 3.6.1). Wird  $\langle (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 \rangle$  betrachtet, ist eine deutliche Veränderung erkennbar (3.6.1). Die zwei Kolloide laufen unter dem Einfluss der Hydrodynamik bei kleinen Abständen etwas langsamer aufeinander. Bei größeren Abständen verliert sich der Effekt und die Teilchen laufen genauso schnell aufeinander wie im Fall vernachlässigter Hydrodynamik.



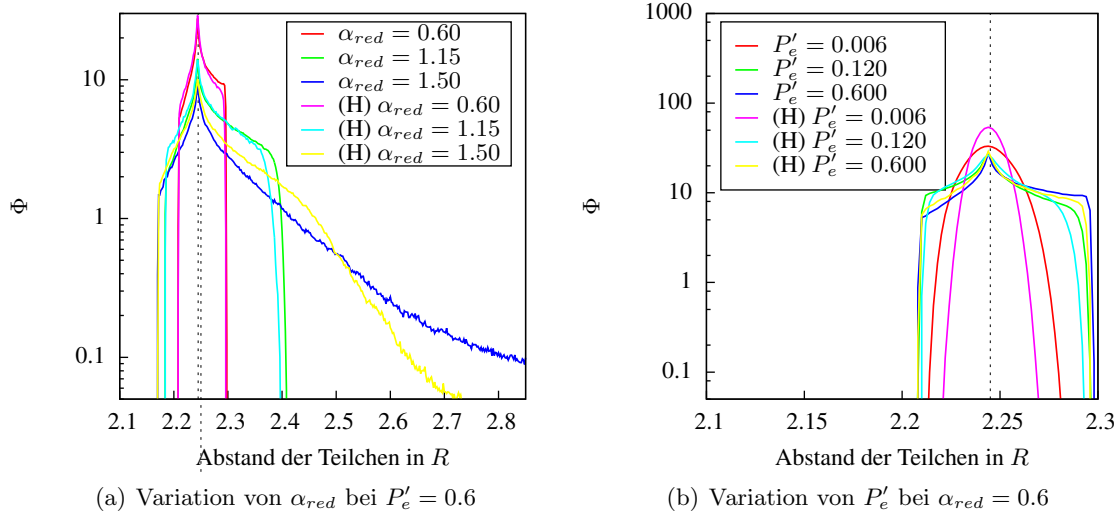
**Abbildung 3.10:** Passive und aktive Teilchen mit und ohne Wechselwirkung unter dem Einfluss der Hydrodynamik

### 3.6.2 Aktive Zwei-Teilchen-Systeme

Die Simulation des Systems aus Kapitel 3.5 unter dem Einfluss der Hydrodynamik ergibt für die selben Parameter im Gegensatz zum passiven Teilchen eine Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten.

Um auf die Unterschiede eingehen zu können, sind in den Abbildungen 3.6.2 bis 3.6.2 die Ergebnisse mit und ohne Hydrodynamik abgebildet.

In 3.6.2 ist deutlich zu sehen, dass für alle  $\alpha_{red}$  der äußere Zustand für (H) etwas schwächer und der innere etwas stärker ausgeprägt ist. An dem Maximum im Potentialminimum ändert sich kaum etwas. Für große  $\alpha_{red}$  scheint (H) wie eine Verringerung



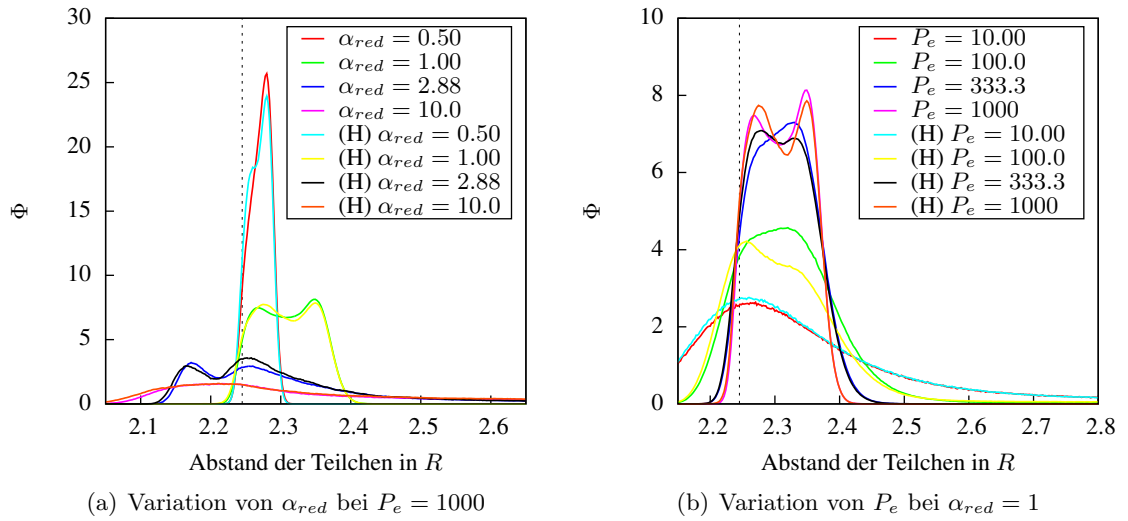
**Abbildung 3.11:** Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit  $k_B T = 0$  mit und ohne Hydrodynamik

der Antriebsstärke zu wirken, bei  $\alpha_{red} = 1.5$  existiert unter (H) der äußere Zustand noch, während er ohne (H) schon verschwunden ist. Dieser Effekt bleibt auch unter Veränderung von  $P_e$  erhalten (3.6.2). Dies ist daran zu erkennen, dass unter (H) die Maximal-, bzw. Minimalabstände etwas näher zusammen liegen. Außerdem nähert sich das System für sinkende  $P_e$  deutlich schneller dem passiv-ähnlichen Zustand.

Auch bei  $k_B T = k_B T_\phi$  ergeben sich einige Unterschiede. In Abbildung 3.6.2 ist über alle  $\alpha_{red}$  hinweg das Maximum bei dem Potentialminimum unter (H) etwas ausgeprägter und die Teilchen bleiben etwas näher beieinander. Somit verhalten sich die Teilchen auch für diese Parameter unter (H) etwas mehr wie bei geringem  $P_e$ , also etwas mehr wie passive Teilchen.

In Abbildung 3.6.2 ist die Verteilung für verschiedene  $P_e$  abgebildet. Auch in diesem Parameterraum sind die bisher beobachteten Effekte durch die Hydrodynamik erkennbar. Zusätzlich verändert sich die Form des Übergangs von großen zu kleinen  $P_e$  durch die Hydrodynamik deutlich. Während die Maxima ohne (H) zu einem breiten verschmelzen und dieses sich zum Potentialminimum verschiebt, verschiebt sich unter (H) der innere Zustand zum Potentialminimum, während der äußere nach und nach an Ausprägung verliert und schließlich verschwindet.

Zusammenfassend ergeben sich also folgende vier Effekte durch die Hydrodynamik: die aktiven Teilchen bleiben insgesamt etwas näher beieinander, verhalten sich etwas mehr wie passive Teilchen und gehen etwas schneller in einen passiv-ähnlichen Zustand über, wobei der Übergang auf eine andere Weise stattfindet.



**Abbildung 3.12:** Verteilungen des Abstands zweier aktiver Kolloide mit  $k_B T = k_B T_\phi$  mit und ohne Hydrodynamik

## Kapitel 4

# Zusammenfassung und Ausblick

Im theoretischen Abschnitt der Arbeit werden die Bewegungsgleichungen zur Beschreibung eines Ein-Teilchen-Systems und eines Zwei-Teilchen-Systems aus aktiven Kolloiden motiviert. Auf deren Grundlage ergeben sich analytische Ausdrücke für einige charakteristische Größen wie die Korrelationszeit der Vorzugsrichtung, die Diffusionskonstante im Fall eines konstanten Potentials und die Verteilung der effektiven Antriebsstärke der Relativbewegung. Der Einfluss der Hydrodynamik wird in erster Näherung über den Oseen-Tensor und die sich daraus ergebenden Kräfte auf die Teilchen beschrieben. Mit der Einführung der hydrodynamisch bedingten Kräfte, ergibt sich die DGL, die im Rahmen der Arbeit simuliert wurde.

Im zweiten Abschnitt der Arbeit werden die Ergebnisse der Simulation präsentiert und diskutiert, zunächst unter Vernachlässigung der Hydrodynamik.

Alle analytisch berechneten Größen zeigen eine exakte Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Simulation, für die auch genau die Parameter der Theoriekurven benutzt wurden.

Die Untersuchung eines aktiven Kolloids im Lennard-Jones-Potential liefert dieselbe Charakteristik wie ein aktives Kolloid im harmonischen Potential. Die Maxima der Ortsverteilung liegen nicht länger beim Potentialminimum  $x_0$ , sondern dort, wo die Kraft des Potentials der Antriebsstärke entspricht, also bei  $x_1 < x_0$  und  $x_2 > x_0$ . Wird nur die Abhängigkeit von  $k_B T_\phi$  betrachtet, ergibt sich im Limes  $k_B T_\phi \gg \alpha$  im Bereich  $x_1$  bis  $x_2$  eine Verteilung, die der eines passiven Teilchens bei geringen Temperaturen ähnlich ist. Ist  $k_B T_\phi = K_B T$  verschmieren die thermischen Fluktuationen die Maxima. Erhöht man die Temperatur, werden die zwei Maxima zu einem breiten, dazwischenliegenden Maxima verschmiert, das sich anschließend zum Potentialminimum schiebt und im Limes ein Verhalten analog zu dem passiver Teilchen erreicht wird.

In einem System aus zwei aktiven Kolloiden ist in der Verteilung des Abstands der Kolloide ein weiterer, stabiler Zustand bei  $x_0$  erkennbar, der sich dadurch erklärt, dass die Antriebsstärke der Relativbewegung nicht wie bei einem Teilchen konstant, sondern gemäß 2.23 verteilt ist. Sonstige Beobachtungen sind größtenteils analog zu denen im Ein-Teilchen-System. Allerdings ist unter der Bedingung  $k_B T_\phi = K_B T$  der stabile Zustand bei  $x_1$  kaum noch ausgeprägt und das System nähert sich deutlich schneller dem

---

Limes  $k_B T \gg \alpha$ . Zusammengefasst heißt das also, dass der Parameterraum, in dem aktives Verhalten ausgeprägt ist, für zwei Teilchen deutlich kleiner ist als für ein Teilchen. Offen bleibt jedoch, ob dieser interessante Parameterraum für größere Teilchenzahlen völlig verschwindet oder stets nur kleiner wird. Ein Ansatz, um den Parameterraum zu vergrößern, könnte die Erkenntnis nutzen, dass für  $T < T_\phi$  die Charakteristika deutlich ausgeprägter sind. In den Differentialgleichungen ist eine Differenz zwischen  $T$  und  $T_\phi$  gleichbedeutend mit einem veränderten Verhältnis von Rotations- zu Translationsreibungskoeffizient. Dies könnte über eine Änderung der Form der Kolloide von Sphären zu Ellipsen, Zylindern oder Stäbchen realisiert werden. Eine weitere Frage ist, ob die Simulationsergebnisse im Experiment bestätigt werden können. Hier könnte die Wahl der Form zur Vergrößerung des interessanten Parameterraums entscheidend sein.

Der Einfluss der Hydrodynamik wurde zunächst an passiven Systemen untersucht.

# Quellenverzeichnis

- [1] Chen C. Ma H. Yin Y. Wu Q. Guan J. Mou, F. Self-propelled micromotors driven by the magnesium-water reaction and their hemolytic properties. *Angewandte Chemie*, 125:7349–7353, 2013.
- [2] Plank M. Benhamou S. Codling, E. Random walk models in biology. *J. R. Soc. Interface*, 5:813–834, 2008.
- [3] Stevens A. Othmer, H. G. Aggregation, blowup and collapse: the abcs of taxis and reinforced random walks. *SIAM J. Appl. Math.*, 57:1044–1081, 1997.
- [4] Wallis I. P. Sleeman, B. D. Tumour-induced angiogenesis as a reinforced random walk: modelling capillary network formation without endothelial cell proliferation. *J. Math. Comp. Modell.*, 36:339–358, 2002.
- [5] Sleeman B. D. Plank, M. J. Lattice and non-lattice models of tumour angiogenesis. *Bull. Math. Biol.*, 66:1785–1819, 2004.
- [6] M. Doi and S.F. Edwards. *The Theory of Polymer Dynamics*. Oxford University Press Inc., 1986.
- [7] Stark H. Pototsky, A. Active brownian particles in two-dimensional traps. *EPL*, 98:50004, 2012.
- [8] M. Reichert and H. Stark. Hydrodynamic coupling of two rotating spheres trapped in harmonic potentials. *Physical Review E*, 69:031407, 2004.

## Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel "Simulation zweier aktiver, wechselwirkender Kolloide unter Berücksichtigung hydrodynamischer Kräfte" selbständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift

### Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG - ).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software "turnitin") zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

---

---

## *QUELLENVERZEICHNIS*

---

Ort, Datum

Unterschrift