

## 6.1 Die Systeme und ihre Paarpotentiale

### a) Gase, Flüssigkeiten



$$v(r) = \begin{cases} \infty, & r < 2a \\ 0, & r > 2a \end{cases} \quad \text{Kugel durch massive} \quad (6.2)$$

Bem.: (i) gut, falls  $v(r)$  von „harten Kern“ („hard core“) dominiert  
 → erzeugt kurzreichweitige Ordnung, charakteristisch für Flüssigkeiten

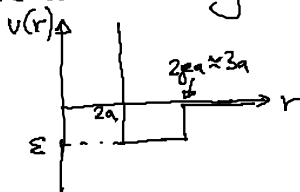
(ii) fest-flüssig Phasenübergang

kein gas-flüssig "

(iii) vielfach untersucht in Comp. Simulationen

(iv) Phasendiagramm: s. Folie

• „Square-well“ Flüssigkeit: harte Kugel & rechteckigem Potential typf

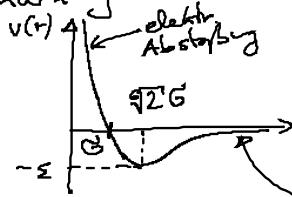


$$v(r) = \begin{cases} \infty, & r < 2a \\ -\epsilon, & 2a < r < 2\lambda a \\ 0, & r > 2\lambda a \end{cases} \quad (6.3)$$

Bem.: (i) Anziehung → gas-flüssig Phasenübergang

(ii) Comp. Simulationen

• Lennard-Jones Potential:



$$v(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (6.4)$$

van-der-Waals-Anziehung:  $v(r) \sim \frac{1}{r^6}$

Bsp: Argon

$G = 0.34 \text{ nm}$   
 $\epsilon = 2,5 \frac{k_B T}{r}$

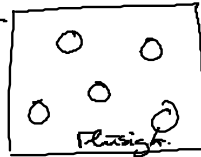
Randsp.

Kenn: (i) gut für Edelgase (Ar, Kr, Xe), kugelförmige Moleküle  $\text{CH}_4$   
(ii) das Potential für Cap. Sim.

b) Kolloidale Suspensionen

- System: kolloidale Teilchen (Radius:  $a = 10 \text{ nm} - 10 \mu\text{m}$ ) in Flüssigkeit

Bsp: Kunststoff/Polymer-Kügelchen  
Glas - "  
globuläre Proteine



- Anwendg: Farbe, Tinte, Milch (Fett in Wasser), ...

- Modell system für stat. Mechanik  
atmäre Systeme  
(im therm. GG)

z.B. - interessantes Phasen-  
verhalten  
- Phasenumgänge  
- Packungsstrukturen etc.

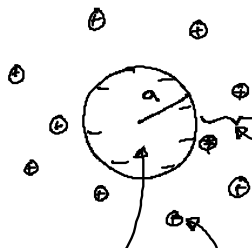
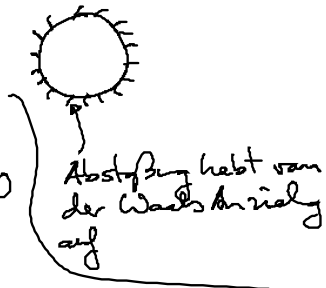
Grds. einstellbares Paarpotentiale

• Realisierung der Harte-Kugel-Flüssigkeit:

PMMA (Polymethylmethacrylat)-Teilchen + Polymere Bürsten  
(= Flexiglas)  
in organische (unpolare) Lösungsmittel

• Ladungsstabilisierte Kolloide:

Bsp: Polystyrol-Kügelchen in  $\text{H}_2\text{O}$   
bekannter Kunststoff (PS)



elektrische Doppelschicht, Dicke  $\kappa^{-1}$ , Entropie  $\uparrow$

\ Macroion
  \ Gegen-/Microion

(i) abgeschirmte elektrost. / Coulomb-WW = Yukawa-Potential

$$V_{el}(r) = \frac{(ze)^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left( \frac{e^{-\kappa a}}{1+\kappa a} \right)^2 \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (6.5)$$

mit  $\kappa^2 = \frac{\sum_i \rho_{oi} (z_i e)^2}{\epsilon_0 \epsilon_r k_B T}$

mit  $ze$  ... effektive Ladg der Kolloide  
 $\epsilon_r$  ... dielekt. Konstante der Flüssigkeit  
 Bsp:  $\epsilon_r = 81$  für  $H_2O$

$\kappa^{-1}$  ... Debye-Hückel Abschirmlänge  
 $z_i e$  ... Ladg von Microion sorte  $i$   
 $\rho_{oi}$  ... Teilchendichte " [weit weg von Macroion]

Umschreibung:

führe ein:  $\lambda_B = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r k_B T}$  ... Bjerrum-Länge [Abstand, wo Coulomb-WW Energie =  $k_B T$ ]

$$(6.5) \rightarrow \beta V_{el}(r) = z^2 \lambda_B \left( \frac{e^{-\kappa a}}{1+\kappa a} \right)^2 \frac{e^{-\kappa r}}{r} \quad (6.6)$$

(ii) anziehende van der Waals-WW:

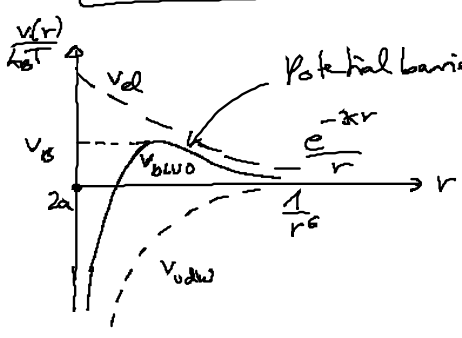
$$V_{vdw}(r) \approx -\frac{A_{eff}}{6} \left[ \frac{2a^2}{r^2 - 4a^2} + \frac{2a^2}{r^2} + \ln\left(1 - \frac{4a^2}{r^2}\right) \right]$$

$$= \begin{cases} v - \frac{1}{r^6}, & r \gg 2a \text{ ... Punktteilchen} \\ v - \frac{1}{r-2a}, & r \rightarrow 2a \text{ ... "zwei Platte"} \end{cases} \quad (6.7)$$

$A_{eff}$  ... Hamaker-Konstante (Materialkonstante)  
 einige  $k_B T$

(i) und (ii)  $\rightarrow$  DLVO-Theorie: (Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek)

$$V_{DLVO} = V_{el} + V_{vdw} \quad (6.8)$$



- Potential barriere:
- stabilisiert Suspensionen
  - verhindert Koagulation der Teilchen falls  $V_B \gg k_B T$
  - Kontrolle von  $V_B$  durch Materialparameter