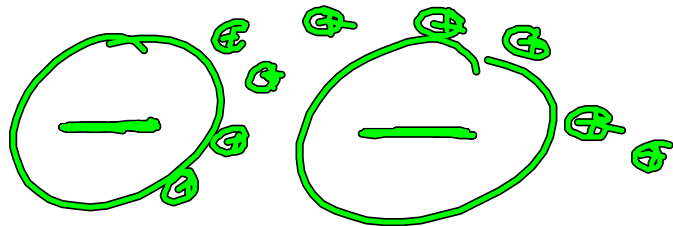


Zu Kartesien: $v^{\text{eff}}(R_i - R_j)$

van der Waals, abgeleitet aus Coulomb-LW



Lineare Poisson-Gleichung:

$$\Delta \psi(r) = \chi^2 \psi(r)$$

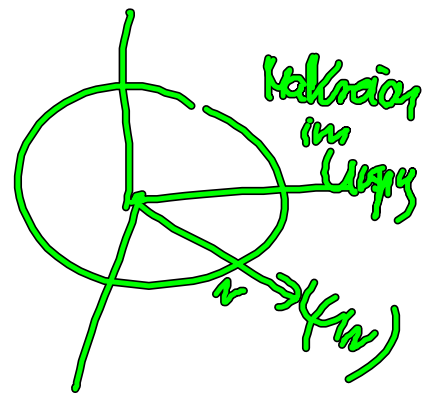
effekt. Potential um ein geladenes Kation

mit $\chi^2 = \frac{\sum_i \tilde{z}_i q_i e^2}{\epsilon_0 \epsilon_f k_B T}$

χ : inverse Debye-Länge

$$\chi = \sqrt{\frac{\sum_i \tilde{z}_i q_i e^2}{\epsilon_0 \epsilon_f k_B T}}$$

Lösung: $\Rightarrow \psi(r) = \psi(r)$
 mit $\psi(r) = Z e_0 \frac{e^{-\chi r}}{4\pi \epsilon_f r}$



$$4\pi \epsilon_f r$$

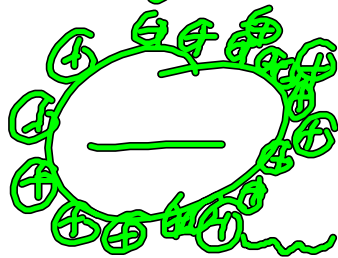
⇒ Wechselwirkung zweier Kolloidene. → χ

$$U_{\text{Ladung}}(r) = Z e_0 \cdot f(r) \sim \frac{e}{4\pi \epsilon_0 r} \quad \text{abgestimmtes Coulomb-potential}$$

$\left. \begin{array}{l} |R_1 - R_2| \\ \text{Abstand der Kolloide!} \end{array} \right\}$

χ^{-1} ist die sogenannte
Debye-Länge

Interpretation: χ^{-1} ist ein Maß für die
Dicke der Gegen-Ionenwolke
um ein geladenes Kolloid



Beach:
 χ hängt ab von $\tilde{\rho}$ (Ionenkonzentration), ρ (Ionenkonzentration), ϵ , $k_B T$...

→ Die Eigenschaften des
"hervausinkommende"

Lösungsmittel Säure da
 Einfluss thermischer Fluktuationen
 gehen in $U_{\text{Ladung}}(r)$ ein!

Resultierende totale Wechselwirkung in einem
 Kolloidsystem aus Makroionen und Gegenionen
 („Ladungsstabilisierte“ Suspension)

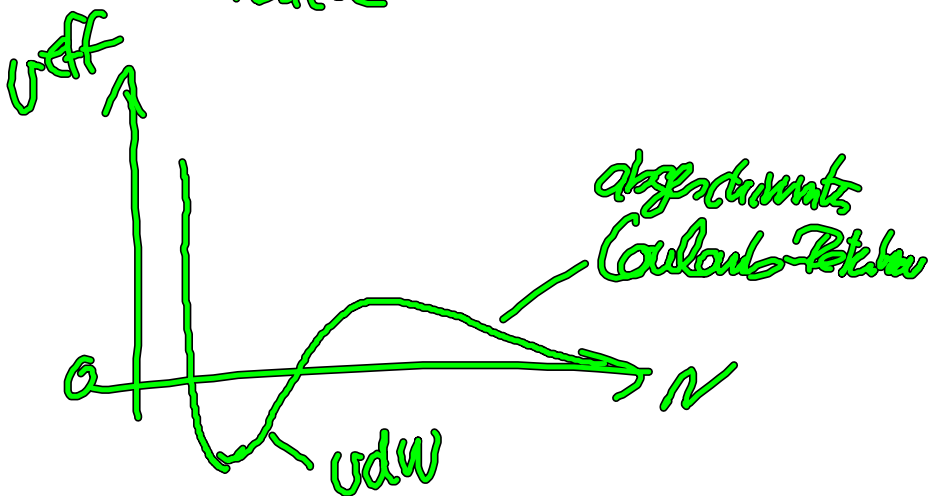
$$U^{\text{eff}}(r) = U^{\text{rep}}(r) + U_{\text{vdW}}(r) + \frac{\tilde{z}e_0 e^{-\kappa r}}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r}$$

Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek
 (DLVO) - Wechselwirkung

Equilibrium bei
 Überlappung der
 Kerne

$$\tilde{z} = \frac{ze}{4\pi R}$$

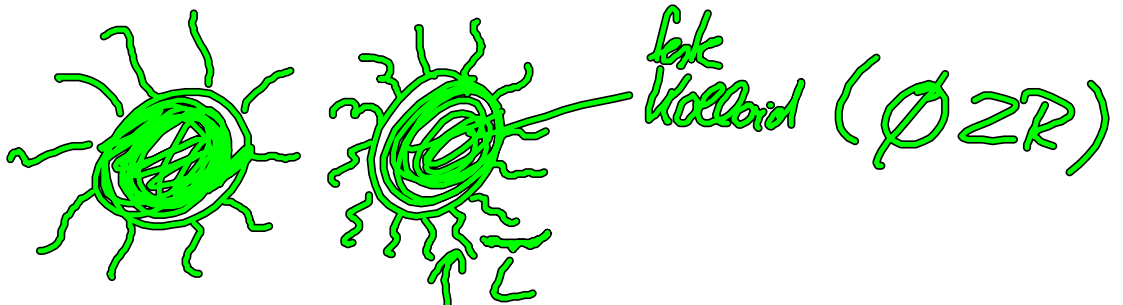
mit $R \hat{=}$ Radius der
 Kolloide



c) Stetische Stahllösung

→ weitere Möglichkeit, die abgeleiteten
vdlw - Wechselwirkungen ~~zu berücksichtigen~~
abzuschätzen

Prinzip



Abstand der Kolloid



$n > Z(R+L)$: keine
Wechselwirkung

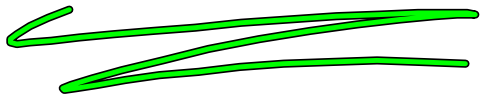
$ZR \leq n \leq Z(R+L)$:

Polymerhüllen um die Teilchen
überlappen

→ Fluktuationen (Konformationen) der
Polymerketten werden eingeschränkt
(Der Grad dieser Einschränkung hängt
von der Anzahl der Ketten sowie
der Temperatur ab!)

→ ein tropisches (oder "strisches")

Abstoßung!!



- Grad dieser Abstoßung ist beeinflussbar durch die Platten dichte der Polymeren auf der Oberfläche, durch T , und auch durch die Löslichkeit
- Reichweite der Abstoßung ist beeinflussbar durch die Kettenlänge L !!

• Modell:

Hart-Kugel-Potential

$$V_{\text{Hart-Kugel}}(r) = \begin{cases} 0, & r < Z(R_{\text{H}}) \\ \infty, & r > Z(R_{\text{H}}) \end{cases}$$

II.2. Mikroskopische Herleitung effektiver Hamiltonians

Ziel: "Illustration" des Konzepts

Betrachte Z -Körperartige System aus großer Kollide (Seite 1)
und kleiner Gittermittelteil (Seite 2)

Voller Hamiltonian.

$$H = H_{11} + H_{22} + H_{12}$$

$$\text{mit } H_{11} = \sum_{i=1}^{N_1} \frac{p_i^2}{2M} + V_{11}(dR_1) \quad \text{--- Wechselwirkungsparameter}$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} (R_i - R_j)$$

$$H_{22} = H_{22}^{\text{kin}} + V_{22}(dL_2)$$

$$H_{12} = V_{12}(dR_1, dL_2)$$

betrachte volle Zustandsraum (Vervollständigen)

$$T, N_1, V_1, N_2, V_2$$

$$V_1 = V_2 = V$$

$$Z(N_1, N_2, V_1, V_2, T)$$

$$= \frac{1}{h^{3N_1} N_1!} \frac{1}{h^{3N_2} N_2!} \int d^3R_1 \int d^3p_1 \int d^3R_2 \int d^3L_2 \int d^3R_3 \int d^3R_4$$

$$\times e^{-\beta(H_{11} + H_{22} + H_{12})}$$

"mal"

Schematisch

$$Z = \prod_{\text{Spur}} \prod_{\text{Spur}} T_k e^{-\beta(H_{k1} + H_{k2} + H_{k3})}$$

Ausführung der Impulsintegration

$$Z(N_1, N_2, V, T)$$

$$= \frac{V^{N_1} V^{N_2}}{N_1! N_2!} \frac{1}{\lambda_1^{3N_1}} \frac{1}{\lambda_2^{3N_2}} Q(N_1, N_2, V, T)$$

Konfigurationsintegral

$$Q = \frac{1}{V^{N_1}} \frac{1}{V^{N_2}} \int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{N_1} \int d\mathbf{r}_{N_1+1} \dots d\mathbf{r}_{N_1+N_2} e^{-\beta(H_{k1} + H_{k2} + H_{k3})}$$

Vorzeichen: definiere

~~$$Z_2(\mathbf{r}_3) = T_k e^{-\beta(H_{k1} + H_{k2})}$$~~