

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Chemie

Fachgebiet: Chemie

Betreuer: Prof. Joachim Wagner
Daniel Weidig
(e-mail: daniel.weidig@uni-rostock.de)

Struktur-Dynamik-Beziehungen in binären Mischungen hochgeladener Kolloide

Englische Zusammenfassung

In this work, structure-dynamics relations in binary mixtures of highly charged colloids are investigated. In systems with identical interactions between all species, however, different short-time mobilities, dynamic coupling effects are observed in the long-time limit: The long-time dynamics of a larger species is enhanced in presence of a smaller, more mobile species and vice versa. These dynamic coupling effects as observed in simulation trajectories, are qualitatively predicted by mode-coupling theory. Mode-coupling theories' tendency to overestimate memory effects, however, is observed as well in the here studied charged systems. Using a rescaled mode-coupling scheme, a nearly quantitative agreement between simulation and theory can be obtained.

Deutsche Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Struktur-Dynamik-Beziehungen in binären Mischungen hochgeladener Kolloide untersucht. In Systemen mit identischen Wechselwirkungen zwischen Spezies mit unterschiedlichen Kurzzeit-Mobilitäten wurden dynamische Kopplungseffekte in der Langzeit-Dynamik beobachtet: Die Langzeit-Dynamik großer Partikel wird in Gegenwart von kleineren Partikeln mit höherer Kurzzeit-Mobilität beschleunigt und umgekehrt. Diese in den Trajektorien von Simulationen beobachteten Kopplungseffekte wurden durch die Vorhersagen der Modenkopplungstheorie qualitativ bestätigt, wobei auch im Falle geladener Systeme die Tendenz der Modenkopplungstheorie zur Überschätzung von Memory-Effekten sichtbar wurde. Mit einer reskalierten Variante der Modenkopplungstheorie kann eine nahezu quantitative Übereinstimmung von Simulation und Theorie erreicht werden.