Brownian dynamics of active and passive anisotropic colloidal particles

Inaugural-Dissertation

zur Erlangung des Doktorgrades der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Raphael Wittkowski
aus Düsseldorf

Düsseldorf, Dezember 2011

Aus dem Institut für Theoretische Physik II (Weiche Materie)
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Gedruckt mit der Genehmigung der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der
Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Referent: Prof. Dr. rer. nat. Hartmut Löwen
1. Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. Helmut Brand
2. Korreferent: Prof. Dr. rer. nat. Holger Stark

Tag der mündlichen Prüfung: 27. März 2012

Berichte aus der Physik

Raphael Wittkowski

Brownian dynamics of active and passive anisotropic colloidal particles

D 61 (Diss. Universität Düsseldorf)

Shaker Verlag
Aachen 2012

Bibliographic information published by
the Deutsche Nationalbibliothek
The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at http://dnb.d-nb.de.

Zugl.: Düsseldorf, Univ., Diss., 2012

Copyright Shaker Verlag 2012
All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-1368-9
ISSN 0945-0963

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen
Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9
Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand im Zeitraum von Herbst 2010 bis Ende 2011 am Institut für Theoretische Physik II (Weiche Materie) der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf. Ein Teil der in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse wurde bereits in den Artikeln [WLB10, AWL11, HWL11, WL11, WLB11a, WLB11b, WL12] veröffentlicht. Im Einzelnen basieren die Kapitel in dieser Arbeit wie folgt auf bereits veröffentlichten oder zur Veröffentlichung bestimmten Artikeln:

Kapitel 2:

- Raphael Wittkowski und Hartmut Löwen:
  Dynamical density functional theory for colloidal particles with arbitrary shape.
  Molecular Physics **109**, 2935-2943 (2011)

Kapitel 3:

- Borge ten Hagen, Raphael Wittkowski und Hartmut Löwen:
  Brownian dynamics of a self-propelled particle in shear flow.
  Physical Review E **84**, 031105 (2011)

- Raphael Wittkowski und Hartmut Löwen:
  Self-propelled Brownian spinning top: dynamics of a biaxial swimmer at low Reynolds numbers.
  Physical Review E **85**, 021406 (2012)

Kapitel 4:

- Raphael Wittkowski und Hartmut Löwen:
  Dynamical density functional theory for colloidal particles with arbitrary shape.
  Molecular Physics **109**, 2935-2943 (2011)

Kapitel 5:

- Cristian Vasile Achim, Raphael Wittkowski und Hartmut Löwen:
  Stability of liquid crystalline phases in the phase-field-crystal model.
  Physical Review E **83**, 061712 (2011)

- Raphael Wittkowski, Hartmut Löwen und Helmut Rainer Brand:
  Polar liquid crystals in two spatial dimensions: the bridge from microscopic to macroscopic modeling.
  Physical Review E **83**, 061706 (2011)

- Raphael Wittkowski, Hartmut Löwen und Helmut Rainer Brand:
  Microscopic and macroscopic theories for the dynamics of polar liquid crystals.
  Physical Review E **84**, 041708 (2011)

- Heike Emmerich, Hartmut Löwen, Raphael Wittkowski, Thomas Gruhn, Gyula I. Tóth, György Tegze und László Gránásy:
  Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales: an overview.
  Advances in Physics (in Vorbereitung)

Auf Grundlage dieser Arbeit sind zurzeit noch weitere Projekte in Arbeit. Diese betreffen flüssigkristalline Phasen auf gekrümmten zweidimensionalen Riemannschen Mannigfaltigkeiten, Phasenfeldkristall-Modelle in beschränkter Geometrie und das in Unterkapitel 4.3 angegebene Dissipationsfunktional der dynamischen Dichtefunktionaltheorie.

Danksagung

An dieser Stelle danke ich allen, die mich im Zusammenhang mit dieser Arbeit über das übliche Maß hinaus unterstützt haben. Als erstes und mit besonderem Ausdruck danke ich deshalb meinem Betreuer Herrn Prof. Dr. Hartmut Löwen, der mir die Möglichkeit gegeben hat, an seinem Lehrstuhl an einigen interessanten Projekten zu arbeiten, und der mich in der gesamten Zeit hervorragend betreut hat.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. Helmut Brand für die lange und überaus produktive Zusammenarbeit. Aus seinen sehr ausführlichen Antworten auf diverse Fragen meinerseits habe ich viel gelernt. Zusammen mit meinem Betreuer hat er entscheidend zum schnellen Erfolg meiner Promotion beigetragen.

Abschließend danke ich den Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Physik II der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf für hilfreiche Diskussionen. Dies sind insbesondere Borge ten Hagen, Andreas Härtel, Dr. Andreas Menzel, Tim Neuhaus, Dr. Michael Schmiedeberg, Joachim Wenk und Dr. Henricus Wensink.

Kurzfassung

Die Beschreibung der statischen Eigenschaften und des dynamischen Verhaltens von Vielteilchensystemen gehört zu den ältesten Problemen der theoretischen Physik. Dieses sehr allgemeine Problem tritt in unterschiedlicher Gestalt in fast allen Bereichen der Physik auf. In der vorliegenden Arbeit werden einzelne Spezialfälle dieses Problems aus dem Bereich der Physik der weichen kondensierten Materie untersucht. Diese Spezialfälle betreffen die Brownsche Dynamik wechselwirkender anisotroper kolloidaler Teilchen und schließen sowohl passive Teilchen (kolloidale Flüssigkristalle) als auch aktive Teilchen (selbstangetriebene Mikroschwimmer) ein.

Der Hauptteil dieser Arbeit besteht aus drei Kapiteln. Im ersten Kapitel wird die Brownsche Dynamik eines einzelnen aktiven kolloidalen Teilchens mit beliebiger Form untersucht. Zunächst wird die dazugehörige Langevin-Gleichung aufgestellt. Anschließend werden für einige interessante Spezialfälle dieser Gleichung analytische Lösungen hergeleitet. Für allgemeinere und nicht analytisch lösbare Fälle werden numerische Lösungen präsentiert. Der Einfluss einer Scherströmung auf die Bewegung des aktiven Teilchens wird anhand des analytisch lösbaren Spezialfalls eines aktiven kugelförmigen Teilchens in einer ebenen Couette-Strömung diskutiert.

Das zweite Kapitel geht auf die kollektive Dynamik eines Systems wechselwirkender kolloidaler Teilchen mit beliebiger Form ein. Ausgehend von der entsprechenden Smoluchowski-Gleichung wird die klassische dynamische Dichtefunktionaltheorie auf den Fall beliebig geformter aktiver oder passiver kolloidaler Teilchen verallgemeinert. Es wird gezeigt, dass diese neue verallgemeinerte dynamische Dichtefunktionaltheorie auch als Variationsproblem für ein Dissipationsfunktional formuliert werden kann. Diese alternative Formulierung der dynamischen Dichtefunktionaltheorie ermöglicht es, die dynamischen Gleichungen von Phasenfeldkristall-Modellen mit mehreren Ordnungsparameterfeldern einfacher und sehr viel schneller herzuleiten, als dies mit der bisherigen Formulierung der dynamischen Dichtefunktionaltheorie möglich ist. Die neue Darstellung mithilfe eines Dissipationsfunktionals schafft darüber hinaus eine Grundlage für die Interpretation der dynamischen Dichtefunktionaltheorie im Rahmen der linear irreversiblen Thermodynamik.

Im dritten Kapitel werden schließlich die Statik und die Dynamik kolloidaler Flüssigkristalle mit Hilfe mikroskopischer, mesoskopischer und makroskopischer klassischer Molekularfeldtheorien beschrieben. Aus der statischen und dynamischen Dichtefunktionaltheorie (mikroskopisch) werden Phasenfeldkristall-Modelle (mesoskopisch) für apolare und polare kolloidale Flüssigkristalle im zwei- und dreidimensionalen Raum hergeleitet. Diese werden anschließend mit statischen und dynamischen symmetriebasierten Modellen (makroskopisch) auf Grundlage der klassischen Ginzburg-Landau-Theorie und der verallgemeinerten Hydrodynamik verglichen.

Die in dieser Arbeit erzielten Resultate können unter anderem auf kolloidale Flüssigkristalle angewendet werden, um deren Gleichgewichtsphasendiagramm zu untersuchen. Sie können aber auch zur Beschreibung der dissipativen Dynamik von Flüssigkristall-Phasenübergängen und topologischen Defekten in flüssigkristallinen Phasen sowie zur Untersuchung des Schwarmverhaltens künstlicher Mikroschwimmer und lebender Mikroorganismen verwendet werden. Die Ergebnisse dieser Arbeit sind auch von grundlegender Bedeutung und helfen zum Beispiel beim Verständnis der Zusammenhänge zwischen klassischer Dichtefunktionaltheorie, Phasenfeldkristall-Modellen und symmetriebasierten makroskopischen Modellen.

Abstract

The proper description of the static equilibrium properties and the dynamic behavior of many-particle systems is one of the oldest problems in theoretical physics. This very general problem is highly relevant for most fields of physics. In the present work, several aspects in the context of this problem are investigated. These aspects concern the Brownian dynamics of interacting anisotropic colloidal particles that can be passive (colloidal liquid crystals) or active (self-propelled microswimmers).

The main part of this work is subdivided into three chapters. In the first chapter, the Brownian dynamics of an individual active colloidal particle with arbitrary shape is investigated. After the formulation of the corresponding Langevin equation, analytical solutions for some special cases are derived and numerical solutions for more general situations are presented. Taking the example of a spherical colloidal particle, the effect of an imposed shear flow is discussed also. The second chapter considers the collective dynamics of a large set of interacting active colloidal particles with arbitrary shape. Starting from the appropriate many-particle Smoluchowski equation, classical dynamical density functional theory is generalized to arbitrarily shaped active or passive colloidal particles. It is proved that this new and generalized dynamical density functional theory can be reformulated in terms of the variational optimization of a dissipation functional. This alternative representation of dynamical density functional theory allows an easier and much faster derivation of the dynamic equations of phase field crystal models with various order-parameter fields than the traditional formulation of dynamical density functional theory. The reformulation with a dissipation functional additionally establishes a basis for the interpretation of dynamical density functional theory out of linear irreversible thermodynamics. The third chapter finally treats the statics and dynamics of colloidal liquid crystals by means of microscopic, mesoscopic, and macroscopic classical mean-field theories. Using static and dynamical density functional theory (microscopic), phase field crystal models (mesoscopic) for apolar and polar colloidal liquid crystals in two and three spatial dimensions are derived and compared with static and dynamic symmetry-based approaches (macroscopic) on the basis of classical Ginzburg-Landau theory and generalized hydrodynamics.

The results obtained in this work can, for example, be applied to colloidal liquid crystals in order to explore their equilibrium phase diagram and phase transition dynamics as well as to the dissipative dynamics of topological defects in liquid crystalline phases and to artificial microswimmers or living microorganisms in order to describe their non-equilibrium swarming behavior. The results are also of more fundamental interest, since they help to clarify the relationship between classical density functional theory, phase field crystal models, and symmetry-based macroscopic approaches.

Contents