

UNIVERSITÄT BAYREUTH

BACHELORARBEIT

**Positions- und Längenkontrolle kolloidaler  
Kugeln und Bipeds auf einem  
Metamorphosenmuster**

*Jonas Elschner*

betreut von  
Prof. Dr. Thomas M. Fischer  
Experimentalphysik X, Physikalisches Institut, Universität Bayreuth

01.07.2022

## Abstract

Bei der Arbeit mit mikroskopischen Objekten ist in vielen Fällen eine Kontrolle ihrer Eigenschaften erforderlich, beispielsweise ihrer Position oder ihrer Größe. In der vorliegenden Arbeit werden zwei Möglichkeiten zur Längen- und Positionskontrolle paramagnetischer Kolloide realisiert, die simultan auf viele Partikel anwendbar sind und keinen Abgleich zwischen Soll- und Istzustand von außerhalb erfordern. Dies geschieht mittels des topologischen Transports über einen Film mit einem Muster aus abwechselnd nach oben und unten magnetisierten Regionen. Bei dem Muster handelt es sich um eine Metamorphose, deren lokale Symmetrieeigenschaften vom Ort abhängen. Bei beiden verfolgten Ansätzen werden paramagnetische Kugeln zunächst in bestimmte Bereiche der Metamorphose transportiert, wo sich mehrere von ihnen mit der Zeit zu Stäben, sogenannten Bipeds, zusammenschließen. Die aus drei Kugeln bestehenden Bipeds werden dann gezielt von den kürzeren separiert: In ersten Fall durch eine höhere Laufgeschwindigkeit, im zweiten Fall durch eine andere Laufrichtung als bei den kürzeren Bipeds. Letzere Variante scheint zuverlässiger zu funktionieren, was aber noch genauer untersucht werden muss. Die beiden Verfahren werden sowohl theoretisch beschrieben als auch in Experiment und Computersimulation erprobt. Die Ergebnisse stimmen weitgehend überein, aber in einigen Fällen sind noch weitere Untersuchungen erforderlich. Im Prinzip erscheint es möglich, mit Abwandlungen der beschriebenen Methoden auch Bipeds anderer Längen gezielt herzustellen.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>4</b>
2.1	Versuchsaufbau und -durchführung . . . . .	4
2.2	Theoretischer Hintergrund . . . . .	6
2.2.1	Action Space und Control Space . . . . .	6
2.2.2	Transcription Space . . . . .	7
2.2.3	Gates und topologischer Transport . . . . .	8
2.2.4	Fence und Ratschensprünge . . . . .	9
2.3	Computersimulation . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Einfluss verschiedener Parameter auf Fence und Gates</b>	<b>12</b>
3.1	Phase des Patterns . . . . .	12
3.1.1	Symmetrieeigenschaften des Action Spaces bezüglich der Phase . .	12
3.1.2	Übertragung der Symmetrieeigenschaften auf den Control Space .	15
3.1.3	Metamorphose . . . . .	16
3.2	Länge der Bipeds . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Design und Test eines Loops zur Herstellung von Bipeds bestimmter Länge</b>	<b>24</b>
4.1	Grundprinzip . . . . .	24
4.2	Variante 1: Trennung von Bipeds nach Länge anhand der Laufgeschwindigkeit . . . . .	25
4.2.1	Ring-Loop: Herstellung der Anfangsverteilung der Kolloide . . . . .	25
4.2.2	Ketten-Loop: Positionskontrolle einzelner Kugeln . . . . .	25
4.2.3	Darstellung des Ketten-Loops im polydirektionalen Transcription Space . . . . .	28
4.2.4	Symmetrieüberlegungen zur Folgerung der Bewegungsrichtung von Bipeds . . . . .	30
4.2.5	Ketten-Loop: Längenkontrolle von Bipeds . . . . .	31
4.3	Variante 2: Trennung von Bipeds nach Länge anhand der Laufrichtung . .	33
4.3.1	Brillen-Loop: Herstellung der Anfangsverteilung der Kolloide . . .	33
4.3.2	Brezel-Loop: Positionskontrolle einzelner Kugeln . . . . .	33
4.3.3	Brezel-Loop: Längenkontrolle von Bipeds . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>39</b>
<b>6</b>	<b>Literatur</b>	<b>41</b>

# 1 Einleitung

In vielen Bereichen von Naturwissenschaft und Technik werden Versuche mit mikroskopischen Objekten durchgeführt. Für deren Handhabung sind dabei oftmals gänzlich andere Methoden notwendig als bei makroskopischen Gegenständen, da die Objekte auf viel kleineren Längenskalen kontrolliert werden müssen.

In einigen Fällen müssen Objekte beispielsweise unter dem Mikroskop an bestimmten Orten platziert werden. Eines der hierfür geeigneten Werkzeuge ist die optische Pinzette. Diese wird unter anderem in der Biophysik seit mehreren Jahrzehnten eingesetzt, um einzelne Zellen wie z. B. Bakterien einzufangen und zu positionieren [1].

In anderen Anwendungen werden Objekte verwendet, die aus mehreren identischen Einheiten aufgebaut sind und somit in verschiedenen Größen hergestellt werden können. Ein Beispiel hierfür sind Kohlenstoff-Nanoröhrchen; diese gibt es mit unterschiedlicher Länge, welche wiederum einen Einfluss auf die elektronischen Eigenschaften hat. Aus diesem Grund werden manchmal Experimente mit Nanoröhrchen einer bestimmten Länge durchgeführt. Diese können z. B. hergestellt werden, indem längere Nanoröhrchen mit einem Spannungspuls über die Spitze eines Rastertunnelmikroskops an der gewünschten Stelle durchtrennt werden [8].

In den beiden genannten Beispielen werden die Position bzw. die Länge von *einzelnen* mikroskopischen Objekten kontrolliert. Dabei muss von außen in das verwendete System eingegriffen und die jeweilige Eigenschaft mit einem Sollwert verglichen werden, um anschließend die notwendige Korrektur einzuleiten: Im Fall der optischen Pinzette durch Verschieben der Zelle an die gewünschte Position, beim Rastertunnelmikroskop durch Kürzen des Kohlenstoff-Nanoröhrchens auf die erforderliche Länge. Bei dem in dieser Arbeit untersuchten System ist hingegen eine *simultane* Positions- und Längenkontrolle vieler Objekte möglich; ein Abgleich zwischen Soll- und Istwert von außerhalb des Systems ist nicht notwendig.

Das Verfahren beruht auf dem topologischen Transport paramagnetischer Mikropartikel über eine Oberfläche. Diese besteht aus nach oben und nach unten magnetisierten Bereichen, die in einem bestimmten Muster angeordnet sind. Die Richtung des Transports wird von einem externen Magnetfeld vorgegeben, hängt aber neben diesem auch von bestimmten, hier ortsabhängigen Eigenschaften des Musters ab. Dies ermöglicht das Sammeln vieler gleichartiger Partikel an einer bestimmten Position, wo anschließend mehrere von ihnen zu Stäben zusammengebaut werden. Deren Länge beeinflusst wiederum die Reaktion auf das externe Feld, was dazu genutzt wird, Stäbe einer bestimmten Länge abzutransportieren und so von den restlichen Partikeln zu separieren. Die theoretischen Hintergründe sowie die experimentelle Umsetzung des Verfahrens werden im Folgenden genauer dargestellt.

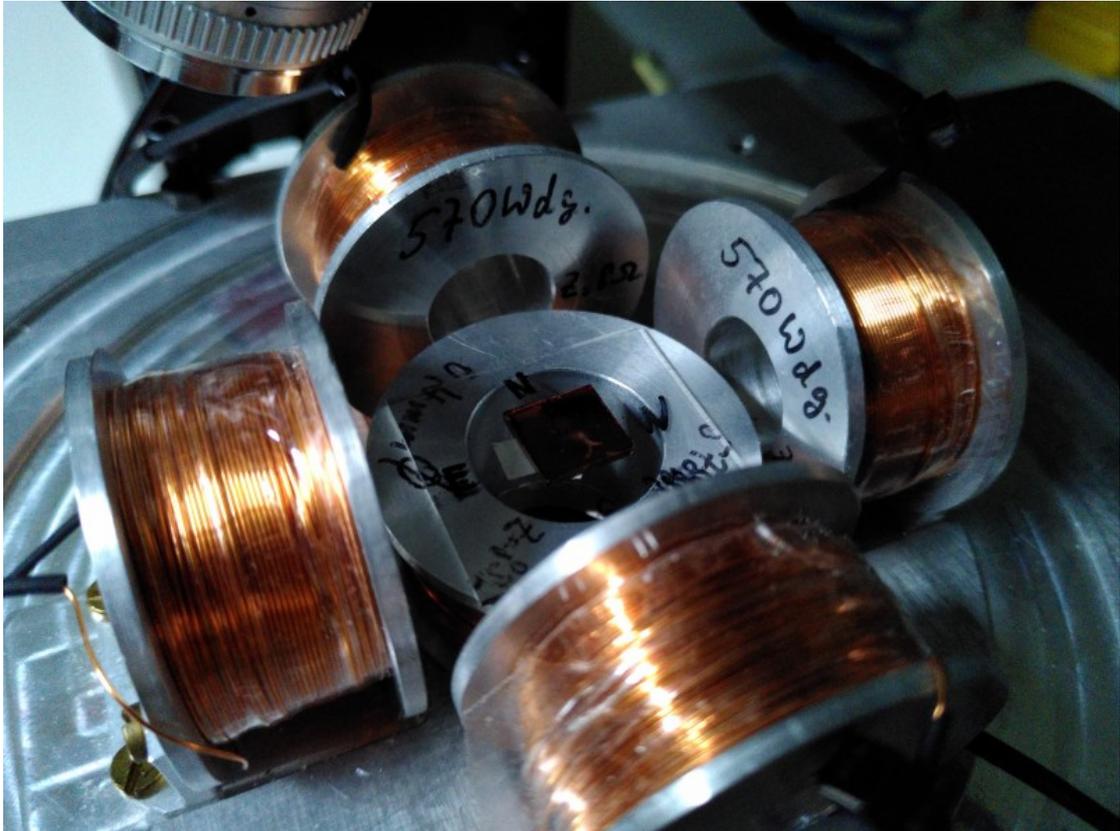
## 2 Grundlagen

### 2.1 Versuchsaufbau und -durchführung

Im Versuch bewegen sich Mikropartikel über einen Film, der im Folgenden als *Pattern* bezeichnet wird. Das Pattern ist in mehrere Rechtecke unterteilt; jedes davon besteht aus verschiedenen Bereichen, die senkrecht zur Oberfläche nach oben oder nach unten magnetisiert und in einem bestimmten periodischen Muster angeordnet sind. Die Gitterkonstante des Musters beträgt  $a = 7\ \mu\text{m}$ . Darüber befindet sich eine nichtleitende und nicht magnetisierbare Polymerschicht der mittleren Dicke  $2\ \mu\text{m}$  [4, S. 5073]. In Abbildung 2.1 ist das auf einen Objektträger aus Glas aufgeklebte Pattern zu sehen.

Bei den verwendeten Mikropartikeln mit dem Produktnamen *Dynabeads M-270* handelt es sich um paramagnetische Kugeln mit einem Durchmesser von  $d = 2,8\ \mu\text{m}$  und einer magnetischen Suszeptibilität  $\chi_{\text{eff}} = 0,6$  [5, S. 1664]. Die Partikel liegen in Form einer Suspension in Reinstwasser vor. Eine Suspension mit Partikeln, deren Größe wie hier im nm- bis  $\mu\text{m}$ -Bereich liegt, wird auch als *kolloidale Suspension* bezeichnet [2, S. 295], die Partikel selbst als *kolloidale Partikel* oder *Kolloide* [4, S. 5044]. Die Suspension wird vor Verwendung mithilfe eines sogenannten Kleinschüttlers geschüttelt, um die abgesunkenen Partikel gleichmäßig in der Flüssigkeit zu verteilen. Mit einer Pipette werden anschließend  $10\ \mu\text{l}$  der Suspension an der gewünschten Stelle auf die Oberfläche des Patterns aufgebracht. Danach können die Kolloide unter Verwendung eines Immersionsobjektivs mittels Auflichtmikroskopie beobachtet werden.

Nach dem Aufbringen der Kolloide wird ein nahezu homogenes externes Magnetfeld  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  des konstanten Betrages  $H_{\text{ext}} = 4\ \text{kA m}^{-1}$  an das Pattern angelegt. Dieses wird von fünf Spulen bereitgestellt, die auch in Abbildung 2.1 sichtbar sind: Während zwei Spulenpaare die parallel zur Oberfläche des Patterns gerichtete  $x$ - und die  $y$ -Komponente des Magnetfelds erzeugen, geht die  $z$ -Komponente von einer einzelnen Spule aus, auf die der Objektträger aufliegt. Die beiden Spulenpaare und die einzelne Spule sind an je einen Verstärker und einen Signalgenerator angeschlossen. Auf diese Weise kann bei der nun folgenden eigentlichen Versuchsdurchführung die Richtung von  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  nahezu beliebig mit der Zeit geändert werden. Wie genau  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  gewählt wird, wird in den folgenden Abschnitten erläutert. Nach Abschluss der Experimente werden das Pattern und das Objektiv mit Reinstwasser und einem fusselfarmen Wischtuch gereinigt, bis sich keine Überreste der Suspension mehr darauf befinden.



**Abbildung 2.1:** Versuchsaufbau. Das Pattern ist auf einen Objektträger aus Glas aufgeklebt. Dieser liegt auf einer Spule und ist von zwei Spulenpaaren in  $x$ - und  $y$ -Richtung umgeben. Die beiden Spulenpaare und die einzelne Spule sind an je einen Verstärker und einen Signalgenerator angeschlossen. Auf diese Weise wird ein nahezu homogenes externes Magnetfeld konstanten Betrages, aber zeitlich veränderlicher Richtung erzeugt. Die Kolloide werden in Form einer Suspension mit einer Pipette auf das Pattern aufgebracht und unter Verwendung eines Immersionsobjektivs (links oben im Bild) mittels Auflichtmikroskopie beobachtet.

## 2.2 Theoretischer Hintergrund

### 2.2.1 Action Space und Control Space

Das vom Pattern erzeugte Magnetfeld  $\mathbf{H}_p$  kann aufgrund der Abwesenheit von Strömen über der Polymerschicht als Gradient eines skalaren magnetostatischen Potentials  $\psi$  beschrieben werden. Dieses Potential ist wie die Magnetisierung periodisch und lässt sich somit in eine zweidimensionale Fourierreihe

$$\psi = \sum_{\mathbf{Q}} c_{\mathbf{Q}}(z) e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{x}_{\mathcal{A}}} = \sum_{\mathbf{Q}} \psi_{\mathbf{Q}} e^{-Qz} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{x}_{\mathcal{A}}} \quad (2.1)$$

nach Gittervektoren  $\mathbf{Q}$  parallel zur Ebene  $z = 0$  entwickeln.<sup>1</sup> Hierbei beschreibt  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}} = (x, y)^T$  die Position im sogenannten *Action Space*  $\mathcal{A}$ , also der Oberfläche der Polymerschicht, auf der sich die Kolloide bewegen; die  $z$ -Achse steht senkrecht auf dem Pattern [4, S. 5046].

Aus (2.1) geht hervor, dass für hinreichend große  $z$  nur die Beiträge der primitiven reziproken Gittervektoren das Potential dominieren, da die Beträge der Fourier-Koeffizienten in  $z$ -Richtung exponentiell mit dem Betrag des zugehörigen reziproken Gittervektors abfallen. Somit hängt das vom Pattern erzeugte Magnetfeld in diesem Bereich bis auf einen konstanten Vorfaktor mit Betrag und Phase nur von der Translations- und Rotations-symmetrie des Patterns ab [4, S. 5046].

Zusätzlich wird an das Pattern ein homogenes Magnetfeld  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  angelegt. Wie erwähnt wird die Richtung von  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  zeitlich verändert, während der Betrag konstant bleibt. Somit liegen die Spitzen der möglichen Magnetfeldvektoren auf einer Kugeloberfläche mit Radius  $H_{\text{ext}}$ , die im Folgenden als *Control Space*  $\mathcal{C}$  bezeichnet wird. Wird der Vektor  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  vom Kugelmittelpunkt abgetragen, lässt sich die gesamte Zeitentwicklung des externen Feldes als Bahnkurve in  $\mathcal{C}$  beschreiben. Eine solche Bahnkurve  $\mathcal{L}_{\mathcal{C}}$  nennen wir *Loop*, da sie bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Versuchen immer geschlossen ist [4, S. 5047].

Das gesamte Magnetfeld  $\mathbf{H} = \mathbf{H}_p + \mathbf{H}_{\text{ext}}$  induziert in den paramagnetischen Kolloiden der Suszeptibilität  $\chi_{\text{eff}} > 0$  und des Volumens  $V$  ein magnetisches Moment  $\mathbf{m} = \chi_{\text{eff}} V \mathbf{H}$ , sodass die potentielle Energie eines Partikels

$$E_{\text{pot}} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{H} = -\chi_{\text{eff}} V H^2 = -\chi_{\text{eff}} V U \quad (2.2)$$

beträgt. Hierbei wird mit  $U = H^2$  das sogenannte *kolloidale Potential* bezeichnet [4, S. 5046]. Im nächsten Abschnitt wird erläutert, dass für die Beschreibung des topologischen Transports nur die Position der Extrema und Sattelpunkte von  $U$  in  $\mathcal{A}$  relevant ist. Aus diesem Grund können von  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$  unabhängige Beiträge zum kolloidalen Potential vernachlässigt sowie das gesamte Potential mit einem von  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$  unabhängigen Faktor skaliert

<sup>1</sup>Der zweite Umformungsschritt in (2.1) folgt daraus, dass  $\psi$  aufgrund der Abwesenheit von Strömen oberhalb des Patterns die Laplace-Gleichung erfüllt: Die Anwendung des Laplace-Operators auf die Fourierreihe und anschließender Koeffizientenvergleich führt auf die Differentialgleichung  $c_{\mathbf{Q}}''(z) - Q^2 c_{\mathbf{Q}}(z) = 0$ . Ausschluss der exponentiell ansteigenden Lösung führt sofort auf den angegebenen Zusammenhang.

werden. Somit genügt es, statt  $U$  das *universelle kolloidale Potential*

$$U^* = e^{Qz} \mathbf{H}_{\text{ext}} \cdot \mathbf{H}_p(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}) \quad (2.3)$$

zu betrachten [4, S. 5046]. Da nur Bewegungen in  $\mathcal{A}$  untersucht werden, ist ausschließlich die Kraft in  $x$ - und  $y$ -Richtung relevant, gegeben durch

$$-\nabla_{\mathcal{A}} E_{\text{pot}} = \chi_{\text{eff}} V \nabla_{\mathcal{A}} U^* = \chi_{\text{eff}} V \begin{pmatrix} \partial_x U^* \\ \partial_y U^* \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

An den Punkten mit  $\nabla_{\mathcal{A}} U^* = 0$  übt das Magnetfeld keine Kraft auf die Kolloide aus, aber nur in den Maxima von  $U^*$  ist die potentielle Energie gemäß Gleichung (2.2) minimal und das Gleichgewicht stabil [4, S. 5046].

## 2.2.2 Transcription Space

Nähern sich mehrere der kugelförmigen Kolloide bei eingeschaltetem externen Magnetfeld einander an, schließen sie sich im Experiment aufgrund magnetischer Dipolwechselwirkungen zu Stäben zusammen. Diese richten sich stets parallel zu  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  aus, sodass bei nichtverschwindender  $z$ -Komponente des externen Feldes jeweils nur ein Ende jedes Stabes die Oberfläche des Patterns berührt. Da es sich dabei, abhängig von der Polarität von  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ , um das eine oder das andere Ende handeln kann, werden die Stäbe *Bipeds* (deutsch: Zweibeiner) genannt [5, S. 1664].

Die Bipeds können als magnetische Dipole der Länge  $b$  betrachtet werden; mit  $\mathbf{b}$  bezeichnen wir den Vektor, der vom Nord- zum Südpol des Dipols zeigt. Den Raum aller Vektoren  $\mathbf{b}$  heißt *polydirektionaler Transcription Space*  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$ . Für einen aus  $n$  Kugeln bestehenden Biped sind die möglichen Zustände in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  eingeschränkt auf eine Kugel mit der festen Länge  $b_n$  des Bipeds als Radius, dem sogenannten *unidirektionalen Transcription Space*  $\mathcal{T}_n$  [6, S. 3]. In diesem Fall sind die Vektoren  $\mathbf{b}_n$  und  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  eindeutig verknüpft über den Zusammenhang

$$\mathbf{b}_n = b_n \frac{\mathbf{H}_{\text{ext}}}{H_{\text{ext}}}. \quad (2.5)$$

Punkte in  $\mathcal{T}_n$  und Punkte in  $\mathcal{C}$  können also ineinander transkribiert werden, was den Namen Transcription Space erklärt.<sup>2</sup> Jeder Punkt in  $\mathcal{C}$  wird dabei einem Strahl in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  zugeordnet und ein Loop in  $\mathcal{C}$  einem Kegel in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$ , jedoch nicht notwendigerweise mit kreisförmigem Querschnitt [6, S. 4].

Die potentielle Energie kann genähert werden als Energie eines durch  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  magnetisierten Bipeds im magnetostatischen Potential des Patterns. Befindet sich der Mittelpunkt

---

<sup>2</sup>Die Zusätze *poly*- und *unidirektional* beziehen sich darauf, dass derselbe Loop Bipeds verschiedener Längen in verschiedene Richtungen, Bipeds derselben Länge aber nur in dieselbe Richtung bewegen kann. Beispiele dafür werden in den Abschnitten 4.2.5 und 4.3.3 gegeben.

des Bipedes am Ort  $\mathbf{r}$ , so beträgt sie

$$E_{\text{pot}} = \frac{m}{b} \left( -\psi \left( \mathbf{r} + \frac{\mathbf{b}}{2} \right) + \psi \left( \mathbf{r} - \frac{\mathbf{b}}{2} \right) \right) \quad (2.6)$$

$$= -V \chi_{\text{eff}} \frac{H_{\text{ext}}}{b} \left( \psi \left( \mathbf{r} + \frac{\mathbf{b}}{2} \right) - \psi \left( \mathbf{r} - \frac{\mathbf{b}}{2} \right) \right). \quad (2.7)$$

Für  $b \rightarrow 0$  gilt

$$E_{\text{pot}} \rightarrow -V \chi_{\text{eff}} \frac{H_{\text{ext}}}{b} \nabla \psi \cdot \mathbf{b} = -V \chi_{\text{eff}} \mathbf{H}_{\text{p}} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}}; \quad (2.8)$$

wir finden also ein zu (2.2) und (2.3) analoges Ergebnis. Aus diesem Grund kann ein *Biped-Potential*  $V_{\text{biped}} \propto (\psi(\mathbf{r} + \frac{\mathbf{b}}{2}) - \psi(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{b}}{2}))$  definiert werden, das sowohl Bipedes als auch (im Grenzfall  $b \rightarrow 0$ ) einzelne Kugeln beschreibt [5, S. 1666]. Daher wird in allen folgenden Gleichungen  $V_{\text{biped}}$  statt  $U^*$  geschrieben.

### 2.2.3 Gates und topologischer Transport

Grundsätzlich wird die Bewegung der Kolloide von der Kraft im Magnetfeld (als Gradient von  $V_{\text{biped}}$ ), der Reibung und thermischen Fluktuationen bestimmt. Dies wird als *innere Dynamik* des Systems bezeichnet. Gleichzeitig ändert sich das Biped-Potential aufgrund der Modulation von  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  zeitlich. Da letzteres in der vorliegenden Anwendung jedoch *adiabatisch*, d. h. langsam im Vergleich zur inneren Dynamik des Systems geschieht, folgen die Partikel praktisch instantan den Maxima von  $V_{\text{biped}}$  [4, S. 5048–5059]. Letztere werden wiederum allein von den geometrischen Eigenschaften des Patterns und der Richtung des externen Magnetfeldes vorgegeben, was zur Folge hat, dass die innere Dynamik beim adiabatischen Transport keine wesentliche Rolle spielt. Vielmehr genügt es, die sogenannte *stationäre Mannigfaltigkeit*

$$\mathcal{M} = \{(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, \mathbf{b}) | \nabla_{\mathcal{A}} V_{\text{biped}} = 0\} \quad (2.9)$$

zu betrachten, also die Menge aller Punkte in  $\mathcal{A} \otimes \mathcal{T}_{\text{poly}}$ , für die das Potential stationär ist [4, S. 5074]. Die Teilmenge von  $\mathcal{M}$ , für die sich bei  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$  ein Maximum (Minimum) von  $V_{\text{biped}}$  befindet, heißt  $\mathcal{M}_-$  ( $\mathcal{M}_+$ ). Jeder adiabatische Transport paramagnetischer Kugeln oder Bipedes kann demnach als Bewegung von  $(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, \mathbf{b})$  auf  $\mathcal{M}_-$  beschrieben werden.

Dabei gibt es jedoch einen Unterschied zwischen einzelnen Kugeln und Bipedes. Erstere können sich im stabilen Gleichgewicht nur in bestimmten Bereichen von  $\mathcal{A}$ , den sogenannten *erlaubten Regionen* befinden. Dabei handelt es sich dabei um die Projektion von  $\mathcal{M}_-$  auf  $\mathcal{A}$  [4, S. 5054–5056]. Benachbarte erlaubte Regionen grenzen an bestimmten Punkten aneinander, deren Urbilder auf  $\mathcal{M}$  *Gates* heißen. Die Projektionen<sup>3</sup> von Gates in  $\mathcal{C}$  (oder kurz: Gates in  $\mathcal{C}$ ) sind Linien [4, S. 5073]. Wird ein Gate in  $\mathcal{C}$  überschritten, so bewegt sich ein Maximum von einer erlaubten Region in eine benachbarte. Wenn sich ein Partikel in diesem Maximum befindet und die Bewegung in  $\mathcal{C}$  langsam im Vergleich zur inneren Dynamik stattfindet, so wird der Partikel adiabatisch transportiert. Überquert

<sup>3</sup>Die Gates und der Fence können von  $\mathcal{M}$  in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  projiziert und anschließend mit der Kugel  $\mathcal{T}_n$  geschnitten werden, die sich wiederum bijektiv auf  $\mathcal{C}$  abbilden lässt.

ein geschlossener Loop in  $\mathcal{C}$  ein bestimmtes Gate in die eine Richtung, in die Rückrichtung aber ein anderes Gate, so führt dieser Loop für bestimmte Wahlen der Gates zu einem effektiven Transport von Partikeln in  $\mathcal{A}$ . Der Transport von Bipedes lässt sich zwar auf ähnliche Weise beschreiben, allerdings gibt es hier keine Gates. Stattdessen kann die Transportrichtung mithilfe des Fences (siehe nächster Abschnitt) beschrieben werden. Auch für einzelne Kugeln ist das möglich.

Da sich das Pattern zeitlich nicht ändert und  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  nach einem vollständigen Durchlauf des Loops wieder den Anfangswert erreicht hat, ist auch  $V_{\text{biped}}$  vor und nach Ausführung des Loops gleich. Sofern es pro Elementarzelle nur ein Maximum des Potentials gibt, kann der Transport von einzelnen Kugeln oder Bipedes deswegen nur um einen Gittervektor erfolgen. Dieser Vorgang wird als *topologischer Transport* bezeichnet; die zugehörige Bahnkurve in  $\mathcal{A}$  wird mit  $\mathcal{L}_{\mathcal{A}}$  abgekürzt [4, S. 5048].

## 2.2.4 Fence und Ratschensprünge

Der *Fence* ist die Menge [5, S. 1668]

$$\mathcal{F} = \{(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, \mathbf{b}) | \nabla_{\mathcal{A}} V_{\text{biped}} = 0 \text{ und } \det(\nabla_{\mathcal{A}} \nabla_{\mathcal{A}} V_{\text{biped}}) = 0\}, \quad (2.10)$$

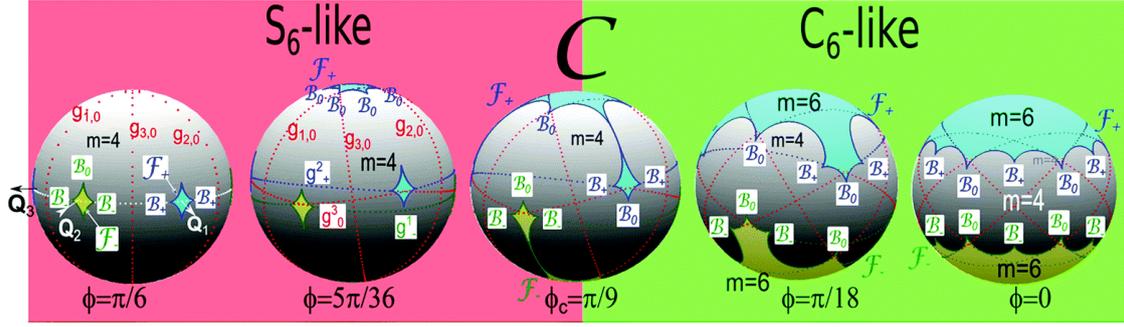
also die Menge aller Punkte in  $\mathcal{M}$ , für die  $V_{\text{biped}}$  in  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$  weder ein Extremum noch einen Sattelpunkt hat. Wie die Gates kann der Fence in  $\mathcal{A}$  und  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  sowie in die  $\mathcal{T}_n$  und in  $\mathcal{C}$  projiziert werden [6, S. 4]. Für die paramagnetischen Kolloide muss nur der Fence  $\mathcal{F}_-$  betrachtet werden, der auf  $\mathcal{M}$  die Regionen der Maxima von denen der Sattelpunkte des Potentials trennt [4, S. 5056].

Für diese Arbeit sind fast ausschließlich Pattern mit dreizähliger Symmetrie relevant. Dort besteht die Projektion des Fences in  $\mathcal{C}$  aus geschlossenen Linien [4, S. 5056]. Im Abschnitt 2.2.1 wurde erwähnt, dass das Potential von der Phase der Fourierkoeffizienten abhängen kann. Wie im Abschnitt 3.1 erläutert wird, ist dies bei Pattern mit dreizähliger Symmetrie tatsächlich der Fall. Im Folgenden betrachten wir den Fence für diese Pattern und für einzelne Kugeln genauer.

In Abbildung 2.2 ist der Fence  $\mathcal{F}_-$  (grüne Linie) sowie  $\mathcal{F}_+$  (blaue Linie) in  $\mathcal{C}$  für fünf verschiedene Phasen  $\phi$  zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  graphisch dargestellt. Wir betrachten im Folgenden nur  $\mathcal{F}_-$ ; zur Beschreibung parametrisieren wir  $\mathcal{C}$  mit den Winkeln  $\theta$  und  $\varphi$  in Kugelkoordinaten.<sup>4</sup> Den Punkt mit  $\theta = 0^\circ$  ( $\theta = 180^\circ$ ) nennen wir *Nordpol* (*Südpol*) und den Breitengrad  $\theta = 90^\circ$  bezeichnen wir als *Äquator*.

Für  $\phi = \frac{\pi}{6}$  umschließt  $\mathcal{F}_-$  drei unzusammenhängende Regionen auf dem Äquator, die sogenannten *Satelliten* [4, S. 5058]. Bei kleiner werdendem  $\phi$  wandern die Satelliten Richtung Südpol. Die Region um den Südpol wird von einer weiteren Fence-Linie umschlossen, die sich gleichzeitig Richtung Äquator verschiebt. Bei  $\phi = \frac{\pi}{9}$  verbindet sie sich mit den Satelliten. Die so entstehenden Anhängsel ziehen sich weiter Richtung Südpol zurück, bis sie bei  $\phi = 0$  nicht mehr zu sehen sind. Wie im Abschnitt 3.1 gezeigt wird, hat das Muster  $C_6$ -Symmetrie für  $\phi = 0^\circ$  und  $S_6$ -Symmetrie für  $\phi = 30^\circ$ . Dabei bedeutet  $C_6$ -Symmetrie, dass das Muster bei einer Drehung um  $60^\circ$  gleich bleibt;  $S_6$ -Symmetrie heißt,

<sup>4</sup>Um bei der Konvention aus der Literatur zu bleiben, verwenden wir in der gesamten Arbeit das Zeichen  $\phi$  ( $\backslash\text{phi}$ ) für die Phase und das Zeichen  $\varphi$  ( $\backslash\text{varphi}$ ) für die Winkelkoordinate.



**Abbildung 2.2:** Fence in  $\mathcal{C}$  für einzelne Kugeln und verschiedene Phasen  $\phi$  zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  (Abbildung bearbeitet von [4, S. 5057]). Der Bereich  $\frac{\pi}{9} < \phi \leq \frac{\pi}{6}$  wird  $S_6$ -artig (englisch:  $S_6$ -like) genannt, der Bereich  $0 \leq \phi < \frac{\pi}{9}$   $C_6$ -artig (englisch:  $C_6$ -like). Der Fence  $\mathcal{F}_-$  ist als durchgezogene grüne Linie dargestellt und schließt die gelb eingefärbten Regionen von  $\mathcal{C}$  ein. Die für diese Arbeit relevanten Gates  $g_{-}^{1,2,3}$  sind als gepunktete grüne Linien eingezeichnet (bzw. weiße für  $\phi = \frac{\pi}{6}$ ). Alle anderen dargestellten und beschrifteten Objekte werden in dieser Arbeit nicht weiter diskutiert und können ignoriert werden. Für  $\phi = \frac{\pi}{6}$  umschließt  $\mathcal{F}_-$  die drei Satelliten um den Äquator, die bei kleiner werdendem  $\phi$  Richtung Südpol wandern. Bei  $\phi = \frac{\pi}{9}$  verbinden sie sich mit der Region um den Südpol. Dorthin ziehen sich die so entstehenden Anhängsel dann weiter zurück, bis sie bei  $\phi = 0$  nicht mehr zu sehen sind.

dass zusätzlich die Richtung der Magnetisierung umgekehrt werden muss. Der Bereich  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  wird  $C_6$ -artig genannt, der Bereich  $20^\circ < \phi \leq 30^\circ$   $S_6$ -artig [4, S. 5056].

Die vom Fence eingeschlossenen Regionen in  $\mathcal{C}$  sind in der Abbildung gelb gefärbt. Wandert der Loop über einen Fence in eine gelbe Region hinein, trennt sich in jeder Elementarzelle des Patterns ein Sattelpunkt zu einem Maximum und einem Minimum auf. Umgekehrt vereinigen sich beim Überschreiten des Fences von aus einer gelben Region hinaus ein Maximum und ein Minimum zu einem Sattelpunkt. Wenn sich in diesem Maximum ein Partikel befindet, so befindet er sich nach Überschreiten des Fences nicht länger im stabilen Gleichgewicht und bewegt sich aufgrund der inneren Dynamik des Systems in ein nahe gelegenes, anderes Maximum des Potentials. Dieser Vorgang wird *Ratschensprung* genannt. Befindet sich ein Partikel aber in einem Maximum, das beim Überqueren des Fences in  $\mathcal{C}$  erhalten bleibt, so wird der Partikel dennoch adiabatisch transportiert; das zugehörige Urbild in  $\mathcal{M}$  ist ein sogenannter *Pseudo-Fence* [4, S. 5058].

Wie in Abbildung 2.2 sichtbar, besteht der Fence in  $\mathcal{C}$  aus mehreren glatten Linien, die an bestimmten Punkten zusammengefügt sind. Jede dieser einzelnen Linien ist ein *Fence-Segment*; die Punkte, an denen mehrere Fence-Segmente zusammengefügt sind, heißen *Bifurkationspunkte* [4, S. 5058]. Loehr et al. [4, S. 5060] fassen in zwei sogenannten *Phasendiagrammen* die Bewegungsrichtungen kugelförmiger Partikel für Loops zusammen, die jeweils ein Gate und/oder ein Fence-Segment in  $\mathcal{C}$  von Nord nach Süd und eines von Süd nach Nord überqueren. Dabei hängt die Bewegungsrichtung nur davon ab, welche Gates und/oder Fence-Segmente in welche Richtung überquert werden, nicht jedoch, an welcher Stelle in  $\mathcal{C}$  dies genau geschieht. Auch bei Ratschensprüngen ist die Bewegungsrichtung immer gleich, obwohl die Bewegung von der inneren Dynamik und nicht nur von

den geometrischen Eigenschaften des Systems vorgegeben wird; die Ratschensprünge sind *topologisch geschützt*.

Jeder der in den Phasendiagrammen betrachteten Loops besteht aus einem südwärts und einem nordwärts gerichteten *Weg*, von denen jeder ein Fence-Segment oder Gate überquert. Nach diesem wird der Weg benannt; bei südwärts (nordwärts) gerichteten Wegen wird das Symbol  $\downarrow$  ( $\uparrow$ ) vorangestellt. Der Loop wird benannt durch die hintereinander geschriebenen Bezeichnungen der beiden Wege, aus denen er besteht. Loops der Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow g_{-}^1$  überqueren beispielsweise das Fence-Segment  $\mathcal{F}_{-r}^3$  von Nord nach Süd und das Gate  $g_{-}^1$  von Süd nach Nord. Diese Nomenklatur wird auch in der vorliegenden Arbeit verwendet.

Im Phasendiagramm für den  $C_6$ -artigen Fall sind keine Wege der Klassen  $\downarrow g_{-}^i$  und  $\uparrow g_{-}^i$  aufgeführt. Grund dafür ist, dass die Bewegung in  $\mathcal{A}$  bereits eindeutig dadurch festgelegt wird, welche Fence-Segmente überquert werden, da die Gates nahe bei diesen liegen [4, S. 5060]. Genauer gesagt wird der Transport sowohl im  $S_6$ - als auch im  $C_6$ -artigen Fall sogar schon dadurch bestimmt, welche Bifurkationspunkte der Loop umläuft [4, S. 5058]. Für einzelne Partikel werden wir zwar wie in der Literatur die Beschreibung mittels Gates und Fence-Segmenten verwenden. Für Bipedes werden wir hingegen später nur die Bifurkationspunkte berücksichtigen.

## 2.3 Computersimulation

Einige der Versuche mit Bipedes wurden im Rahmen dieser Arbeit in einer Computersimulation wiederholt, um zu überprüfen, ob sich die experimentellen Beobachtungen dadurch reproduzieren lassen. Dies lässt Rückschlüsse darauf zu, ob beobachtete Bewegungen der Bipedes auf den adiabatischen Transport oder auf die innere Dynamik zurückzuführen sind. Im ersten Fall ist in Experiment und Simulation dasselbe Verhalten zu erwarten, während sich die innere Dynamik zwischen beiden unterscheiden kann.

Für die Simulationen wurde dasselbe Programm wie in [5] eingesetzt. Dort werden die einzelnen Kugeln als paramagnetische Punktteilchen modelliert, die der inneren Dynamik des Systems folgen. Jedes dieser Punktteilchen ist dem kolloidalen Potential  $U^*$  unterworfen, wobei Form und Ausrichtung des Bipedes durch Zwangsbedingungen festgelegt sind. Die Bewegungsgleichungen werden mit dem Euler-Verfahren integriert [5, S. 1673].

Bei der Berechnung von  $U^*$  wurden die ersten Fourier-Komponenten des magnetostatischen Potentials aus Gleichung (2.1) zugrundegelegt. Der reziproke Gittervektor  $\mathbf{Q}$  und die ortsabhängige Phase  $\phi$  der Metamorphose wurden dabei wie beim im Experiment verwendeten Pattern gewählt (siehe Abschnitt 3.1.3). Der Abstand der einzelnen Punktteilchen wurde gleich dem Durchmesser  $d$  der verwendeten Kugeln gesetzt.

## 3 Einfluss verschiedener Parameter auf Fence und Gates

Die Bewegung eines Partikels (einzelne Kugel oder Biped) auf einem Pattern dreizähliger Symmetrie wird durch drei Faktoren vorgegeben, nämlich durch das externe Magnetfeld  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ , die Länge  $b_n$  des Bipeds sowie die Phase des Patterns. Wenn letztere an verschiedenen Stellen in  $\mathcal{A}$  unterschiedlich ist, hängt die Bewegung des Partikels somit auch implizit von seiner aktuellen Position  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$  ab. Während das externe Magnetfeld homogen und somit für alle Partikel gleich ist, sind Länge und Position Eigenschaften eines einzelnen Partikels. Die Kenntnis der Abhängigkeit des Fences und der Gates in  $\mathcal{C}$  von diesen Eigenschaften ermöglicht somit das Design von Loops, auf die die Partikel abhängig von Position und Länge unterschiedlich reagieren. Um dies vorzubereiten, werden diese Abhängigkeiten im Folgenden untersucht.

### 3.1 Phase des Patterns

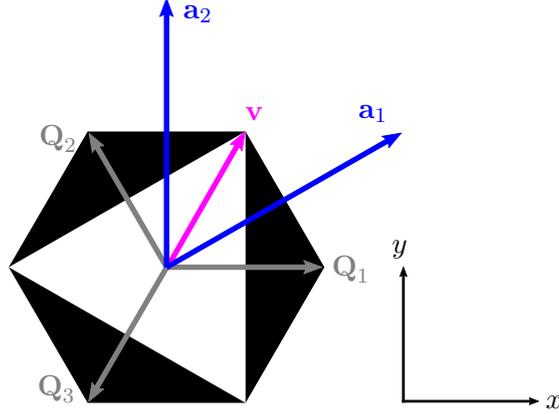
#### 3.1.1 Symmetrieeigenschaften des Action Spaces bezüglich der Phase

Wir betrachten zunächst Pattern mit konstanter Phase. Deren Magnetisierung beträgt [4, S. 5046]

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, \phi) = M_s \mathbf{e}_z \text{sign} \left( t(\phi) + \sum_{n=0}^{N-1} \cos((\mathcal{R}_N^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot \mathbf{x}_{\mathcal{A}} - \phi) \right), \quad (3.1)$$

wobei  $\mathbf{M}(\mathbf{x}_{\mathcal{A}})$  die Magnetisierung des Patterns an der Stelle  $\mathbf{x}_{\mathcal{A}}$  ist,  $\mathbf{Q}_1$  einer der reziproken primitiven Gittervektoren und  $\mathcal{R}_N$  die zweidimensionale Rotationsmatrix um den Winkel  $\frac{2\pi}{N}$ . Die Phase  $\phi$  kann willkürlich variiert werden; der Korrekturterm  $t(\phi)$  sorgt dafür, dass die nach oben magnetisierte Fläche in einer Einheitszelle genauso groß ist wie die nach unten magnetisierte [4, S. 5046]. Bei den in der vorliegenden Arbeit fast ausschließlich verwendeten Pattern dreizähliger Symmetrie gilt  $N = 3$ . Die Definition des in dieser Arbeit verwendeten Koordinatensystems und der Gittervektoren ist in Abbildung 3.1 am Beispiel der Wigner-Seitz-Zelle eines  $S_6$ -Musters dargestellt.

Da die Richtungen  $\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1$  symmetrisch in Gleichung (3.1) auftreten, hat das Pattern im Fall  $N = 3$  für jede Phase  $C_3$ -Symmetrie, ist also invariant bezüglich Drehungen um  $\frac{2\pi}{3}$  um den Ursprung. Für  $\phi = 0$  ist die Funktion zusätzlich symmetrisch bezüglich einer Rauminversion,  $\mathbf{M}(-\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, 0) = \mathbf{M}(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, 0)$ , was in einer  $C_6$ -Symmetrie resultiert. Für  $\phi = \frac{\pi}{2}$  ist die Funktion antisymmetrisch bezüglich Rauminversion,  $\mathbf{M}(-\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, \frac{\pi}{2}) = -\mathbf{M}(\mathbf{x}_{\mathcal{A}}, \frac{\pi}{2})$ , was zur  $S_6$ -Symmetrie führt. Zudem ist zu beachten, dass die primitiven



**Abbildung 3.1:** Definition des verwendeten Koordinatensystems und der Gittervektoren am Beispiel der Wigner-Seitz-Zelle eines  $S_6$ -Musters. Die primitiven Gittervektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  im Realraum sind mit der korrekten Länge eingezeichnet, wohingegen die Länge der primitiven reziproken Gittervektoren  $\mathbf{Q}_i$  in Wellenzahlen gemessen wird und ihre Länge in der Abbildung somit willkürlich ist. Die  $z$ -Achse zeigt senkrecht aus der Zeichenebene heraus.

reziproken Gittervektoren  $\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1$  symmetrisch bezüglich der  $x$ -Achse liegen<sup>1</sup>, weshalb das Pattern für jede Phase ebenfalls symmetrisch bezüglich dieser Achse ist.

Die von Loehr et al. untersuchte Phasenabhängigkeit des Fences und der Gates im Bereich  $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{6}$  wurde bereits im vorherigen Kapitel zusammengefasst; ausgehend davon wird sie im Folgenden mittels Symmetrieüberlegungen auf alle anderen Werte von  $\phi$  erweitert. Aus der Periodizität des Cosinus in Gleichung (3.1) folgt unmittelbar, dass eine Änderung von  $\phi$  um  $2\pi$  das Muster nicht verändert. Eine genauere Betrachtung zeigt zudem, dass Ähnliches für eine Änderung um  $\frac{2\pi}{3}$  gilt:

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi) = \mathbf{M}\left(\mathbf{x}_A - \mathbf{v}, \phi - \frac{2\pi}{3}\right) \text{ mit } \mathbf{v} = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{3}. \quad (3.2)$$

Dies lässt sich wie folgt einsehen: Der Vektor  $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{3}$  zeigt vom Mittelpunkt zur rechten oberen Ecke der Wigner-Seitz-Zelle (vgl. Abbildung 3.1). Nach jeder Rotation um  $\frac{2\pi}{3}$  zeigt die Spitze von  $\mathbf{v}$  auf die übernächste Ecke, die durch Verschiebung um einen Gittervektor auf die erste abgebildet werden kann. Daher existiert für jedes  $n \in \mathbb{Z}$  ein Gittervektor  $\mathbf{G}$  mit  $\mathcal{R}_3^n \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{G}) = \mathbf{v}$ . Unter Verwendung der Zusammenhänge  $\mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{G} = 2\pi k$  mit  $k \in \mathbb{Z}$  und  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{Q}_j = 2\pi \delta_{ij}$  folgt für die Argumente der Cosinus-Terme in Gleichung (3.1):

<sup>1</sup>Wir betrachten  $\mathbf{M}$  als Funktion von  $\mathbf{x}_A$ . Daher bedeutet eine Spiegelung an der  $x$ -Achse *keine* Umkehrung der Magnetisierung in  $z$ -Richtung.

$$\begin{aligned}
& (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot (\mathbf{x}_A - \mathbf{v}) - \left( \phi - \frac{2\pi}{3} \right) \\
&= (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot (\mathbf{x}_A - \mathcal{R}_3^n \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{G})) - \left( \phi - \frac{2\pi}{3} \right) \\
&= (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot \mathbf{x}_A - \phi - \left( (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot (\mathcal{R}_3^n \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{G})) - \frac{2\pi}{3} \right) \\
&= (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot \mathbf{x}_A - \phi - \left( \mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{v} + \mathbf{Q}_1 \cdot \mathbf{G} - \frac{2\pi}{3} \right) \\
&= (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot \mathbf{x}_A - \phi - \left( \mathbf{Q}_1 \cdot \frac{\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{3} - \frac{2\pi}{3} \right) + 2\pi k \\
&= (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot \mathbf{x}_A - \phi - \left( \frac{2\pi + 0}{3} - \frac{2\pi}{3} \right) + 2\pi k \\
&= (\mathcal{R}_3^n \cdot \mathbf{Q}_1) \cdot \mathbf{x}_A - \phi + 2\pi k.
\end{aligned}$$

Einsetzen in (3.1) führt direkt auf die zu beweisende Gleichung (3.2). Da das externe Magnetfeld homogen ist, hat die Translation um  $\mathbf{v}$  keinen Einfluss auf den Fence und die Gates in  $\mathcal{C}$ . Folglich genügt ihre Kenntnis im Intervall  $0 \leq \phi < \frac{2\pi}{3}$ , um die Kolloide auf einem Pattern beliebiger Phase kontrollieren zu können. Dieser Bereich lässt sich noch weiter reduzieren: Zunächst geht aus (3.1) hervor, dass die Funktion  $\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi)$  antisymmetrisch bezüglich Spiegelung an  $\phi = \frac{\pi}{2}$  und gleichzeitiger Rauminversion ist, also

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi) = -\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi + \pi) = -\mathbf{M}(-\mathbf{x}_A, \pi - \phi) \quad (3.3)$$

gilt.<sup>2</sup> Aus (3.2) und (3.3) folgt

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi) = -\mathbf{M}\left(-(\mathbf{x}_A + \mathbf{v}), \pi - \left(\phi + \frac{2\pi}{3}\right)\right) = -\mathbf{M}\left(-\mathbf{x}_A - \mathbf{v}, \frac{\pi}{3} - \phi\right) \quad (3.4)$$

sowie weiterhin

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi) = -\mathbf{M}\left(-(\mathbf{x}_A - \mathbf{v}), \left(\phi - \frac{2\pi}{3}\right) + \pi\right) = -\mathbf{M}\left(-\mathbf{x}_A + \mathbf{v}, \phi + \frac{\pi}{3}\right). \quad (3.5)$$

Eine Rauminversion ist aufgrund der Symmetrie des Patterns bezüglich der  $x$ -Achse gleichbedeutend mit einer Spiegelung an der  $y$ -Achse. Da sich die Ergebnisse von Spiegelungen an zueinander parallelen Achsen nur um eine Translation unterscheiden, gilt die

**Folgerung.** *Bis auf eine Translation in  $\mathcal{A}$  ist die Funktion  $\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi)$  antisymmetrisch bezüglich Phasenverschiebung um  $\Delta\phi = \frac{\pi}{3}$ . Die Funktion  $\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi)$  ist ebenfalls bis auf eine Translation in  $\mathcal{A}$  antisymmetrisch bezüglich gleichzeitiger Spiegelung an der  $y$ -Achse und Spiegelung an  $\phi = \frac{\pi}{6}$ .*

<sup>2</sup>Es gilt  $\cos(x + \pi) = \cos(\pi - x) = -\cos(x)$ ,  $t(\phi + \pi) = -t(\phi)$  und  $\text{sign}(-x) = -\text{sign}(x)$ .

Damit lassen sich die Funktionswerte von  $\mathbf{M}(\mathbf{x}_A, \phi)$  für beliebige  $\phi$  aus denen im Intervall  $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{6}$  ableiten. Außerdem ist nun ersichtlich, dass das Pattern für  $\phi = \frac{\pi}{6}$   $S_6$ -Symmetrie aufweist. Im Folgenden ist zusammengefasst, wie das Pattern im gesamten Bereich  $0 \leq \phi < \frac{2\pi}{3}$  aus dem in  $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{6}$  hervorgeht:

1.  $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{6}$ : Urbild, aus dem die Pattern in allen anderen Bereichen durch Transformation entstehen.
2.  $\frac{\pi}{6} \leq \phi \leq \frac{2\pi}{6}$ : Entsteht aus Urbild durch Umkehrung der Magnetisierung und anschließende Spiegelungen an  $x = 0$  und  $\phi = \frac{\pi}{6}$ .
3.  $\frac{2\pi}{6} \leq \phi \leq \frac{3\pi}{6}$ : Entsteht aus Urbild durch Umkehrung der Magnetisierung.
4.  $\frac{3\pi}{6} \leq \phi \leq \frac{4\pi}{6}$ : Entsteht aus Urbild durch Umkehrung der Magnetisierung, Spiegelungen an  $x = 0$  und  $\phi = \frac{\pi}{6}$  und nochmalige Umkehrung der Magnetisierung, also insgesamt nur Spiegelungen an  $x = 0$  und  $\phi = \frac{\pi}{6}$ .

### 3.1.2 Übertragung der Symmetrieeigenschaften auf den Control Space

Eine Umkehrung der Magnetisierung des Patterns entspricht einer Spiegelung an der Ebene  $z = 0$ . Allein aus dem Bereich  $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{6}$  der Metamorphose gehen also alle anderen Bereiche durch Spiegelung an der Ebene  $z = 0$  (abgekürzt  $\sigma_z$ ) und Spiegelung an einer Ebene senkrecht zur  $x$ -Achse (abgekürzt  $\sigma_x$ ) hervor. Ist die Wirkung dieser beiden Transformationen auf  $\mathcal{C}$  bekannt, lassen sich somit Fence und Gates für beliebige  $\phi$  aus jenen für  $0 \leq \phi \leq \frac{\pi}{6}$  ableiten.

Da die Festlegung der Magnetfeldrichtung lediglich eine Konvention darstellt, von der zudem die Definition des Dia- und Paramagnetismus unabhängig ist, müssen die Beobachtungen im Versuch invariant sein unter Umkehrung aller Magnetfelder, d. h. gleichzeitiger Ersetzung  $\mathbf{M} \rightarrow -\mathbf{M}$  und  $\mathbf{H}_{\text{ext}} \rightarrow -\mathbf{H}_{\text{ext}}$  (aber bei gleichzeitiger Beibehaltung der Bezeichnungen *Nord* und *Süd*). Ersteres kann wie erwähnt als Spiegelung des Patterns an der Ebene  $z = 0$  gesehen werden, was wir als  $\mathcal{A} \rightarrow \sigma_z \mathcal{A}$  schreiben; letzteres entspricht einer Rauminversion von Fence und Gates in  $\mathcal{C}$  sowie von  $\mathcal{L}_C$ , kurz  $\mathcal{C} \rightarrow i\mathcal{C}$  und  $\mathcal{L}_C \rightarrow i\mathcal{L}_C$ . Zwar durchläuft der Loop danach dieselben Fence-Segmente und Gates wie vorher, aber eine zuvor südwärts gerichtete Bewegung ist dann nordwärts und umgekehrt. Deshalb müssen bei der Verwendung der Phasendiagramme von Loehr et al. [4, S. 5060] dann  $\downarrow$  und  $\uparrow$  vertauscht werden.

Eine Spiegelung des Patterns sowie von  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  an einer Ebene senkrecht zur  $x$ -Achse führt zu einer Spiegelung der Bewegungsrichtung der Kolloide an dieser Ebene. Dies wird beschrieben durch gleichzeitige Anwendung der Transformationen  $\mathcal{C} \rightarrow \sigma_x \mathcal{C}$ ,  $\mathcal{L}_C \rightarrow \sigma_x \mathcal{L}_C$ ,  $\mathcal{A} \rightarrow \sigma_x \mathcal{A}$  und  $\mathcal{L}_A \rightarrow \sigma_x \mathcal{L}_A$ . Um der letzten dieser Transformation Rechnung zu tragen, aber weiterhin das Phasendiagramm verwenden zu können, müssen die Wege gemäß den Tabellen 3.1 und 3.2 ersetzt werden. Dort ist jeder Klasse von Wegen, die zu einer Bewegung  $\mathcal{L}_A$  in  $\mathcal{A}$  führt, eine andere Klasse zugeordnet, die die Bewegung  $\sigma_x \mathcal{L}_A$  bewirkt. Praktisch lässt sich dies umsetzen, indem in Darstellungen von  $\mathcal{C}$  die Beschriftungen der Gates und Fence-Segmente gemäß den Tabellen ersetzt und gleichzeitig bei der Verwendungen der Phasendiagramme wieder  $\downarrow$  und  $\uparrow$  vertauscht werden.

**Tabelle 3.1:** Ersetzung der beim Loop durchlaufenen Fence-Segmente, die zur Spiegelung der Bewegung in  $x$ -Richtung führt

Weg für $\mathcal{L}_{\mathcal{A}}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-l}^1$	$\downarrow \mathcal{F}_{-r}^1$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^{1r}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^{2l}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^2$	$\downarrow \mathcal{F}_{-r}^2$
Weg für $\sigma_x \mathcal{L}_{\mathcal{A}}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-r}^1$	$\uparrow \mathcal{F}_{-l}^1$	$\uparrow \mathcal{F}_{-}^{1l}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-}^{3r}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-r}^3$	$\uparrow \mathcal{F}_{-l}^3$
Weg für $\mathcal{L}_{\mathcal{A}}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^{2r}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^{3l}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-l}^3$	$\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^{3r}$	$\downarrow \mathcal{F}_{-}^{1l}$
Weg für $\sigma_x \mathcal{L}_{\mathcal{A}}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-}^{3l}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-}^{2r}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-r}^2$	$\uparrow \mathcal{F}_{-l}^2$	$\uparrow \mathcal{F}_{-}^{2l}$	$\uparrow \mathcal{F}_{-}^{1r}$

**Tabelle 3.2:** Ersetzung der beim Loop durchlaufenen Gates, die zur Spiegelung der Bewegung in  $x$ -Richtung führt

Weg für $\mathcal{L}_{\mathcal{A}}$	$\downarrow g_{-}^1$	$\downarrow g_{-}^2$	$\downarrow g_{-}^3$
Weg für $\sigma_x \mathcal{L}_{\mathcal{A}}$	$\uparrow g_{-}^1$	$\uparrow g_{-}^3$	$\uparrow g_{-}^2$

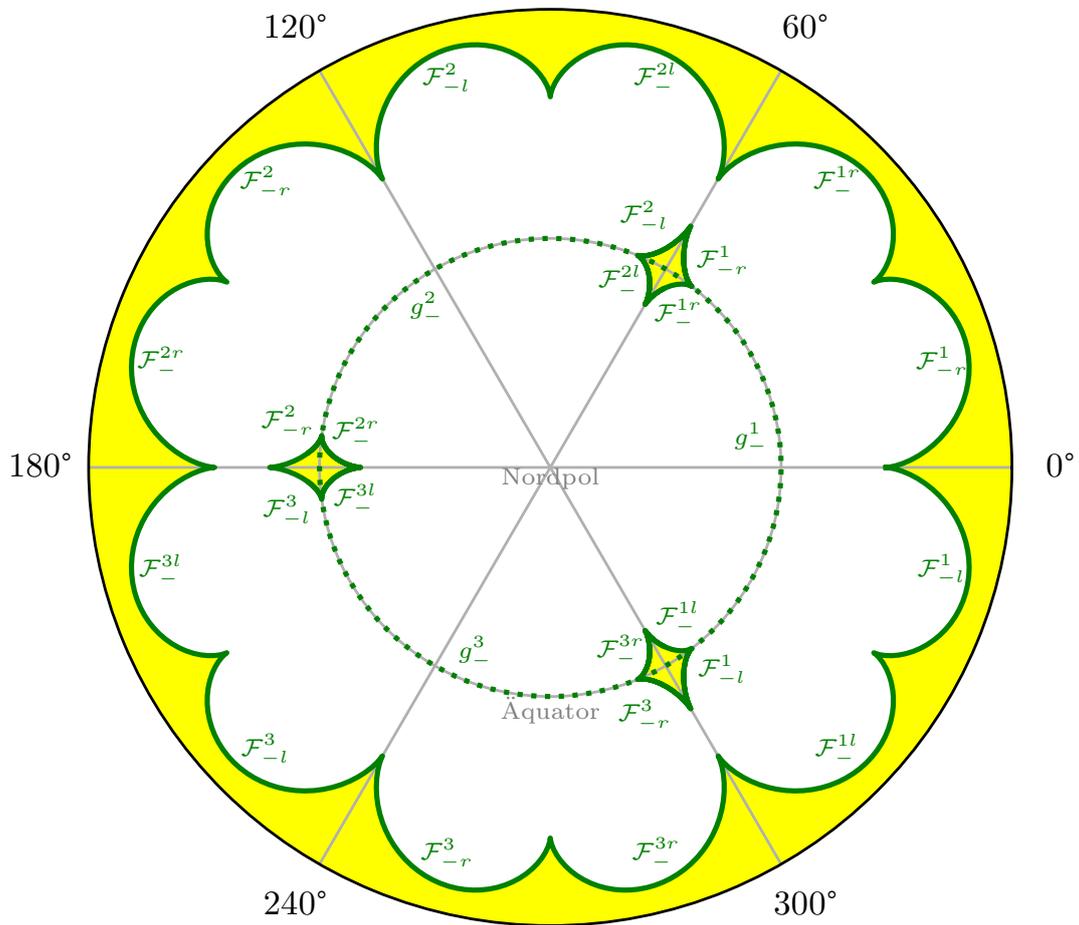
Mit diesen Überlegungen können die Symmetrieeigenschaften von  $\mathcal{A}$  auf  $\mathcal{C}$  übertragen werden. Das Ergebnis für diejenigen Phasen mit  $C_6$ - oder  $S_6$ -Symmetrie ist in den Abbildungen 3.2–3.5 dargestellt.

### 3.1.3 Metamorphose

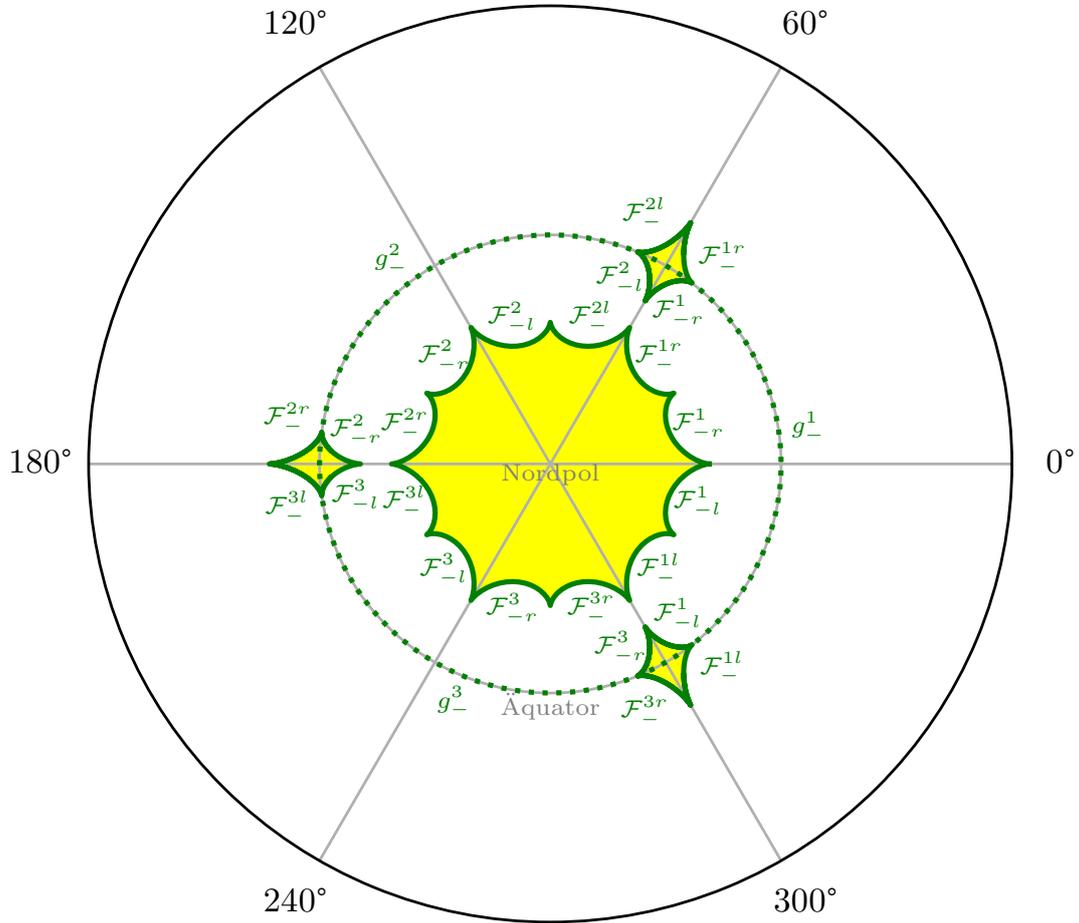
Als *Metamorphose* wird im Folgenden ein Pattern mit ortsabhängiger Phase  $\phi(\mathbf{x}_{\mathcal{A}})$  bezeichnet; für diese Arbeit wurde ein Pattern mit linearem Gradienten  $\phi = \phi(x) = -\frac{2\pi}{\lambda}x$  mit  $\lambda = 228a$  verwendet. Da die Funktion  $\phi(x)$  bijektiv ist, kann die Metamorphose statt durch  $x$  auch durch  $\phi$  parametrisiert werden. Dies wurde in Abbildung 3.6 auf S. 21 umgesetzt, wo schematisch das im Experiment verwendete Pattern abgebildet ist. Die Phasenabhängigkeit von Fence und Gates wird damit auf der Metamorphose in eine Abhängigkeit von der  $x$ -Koordinate übersetzt.

## 3.2 Länge der Biped

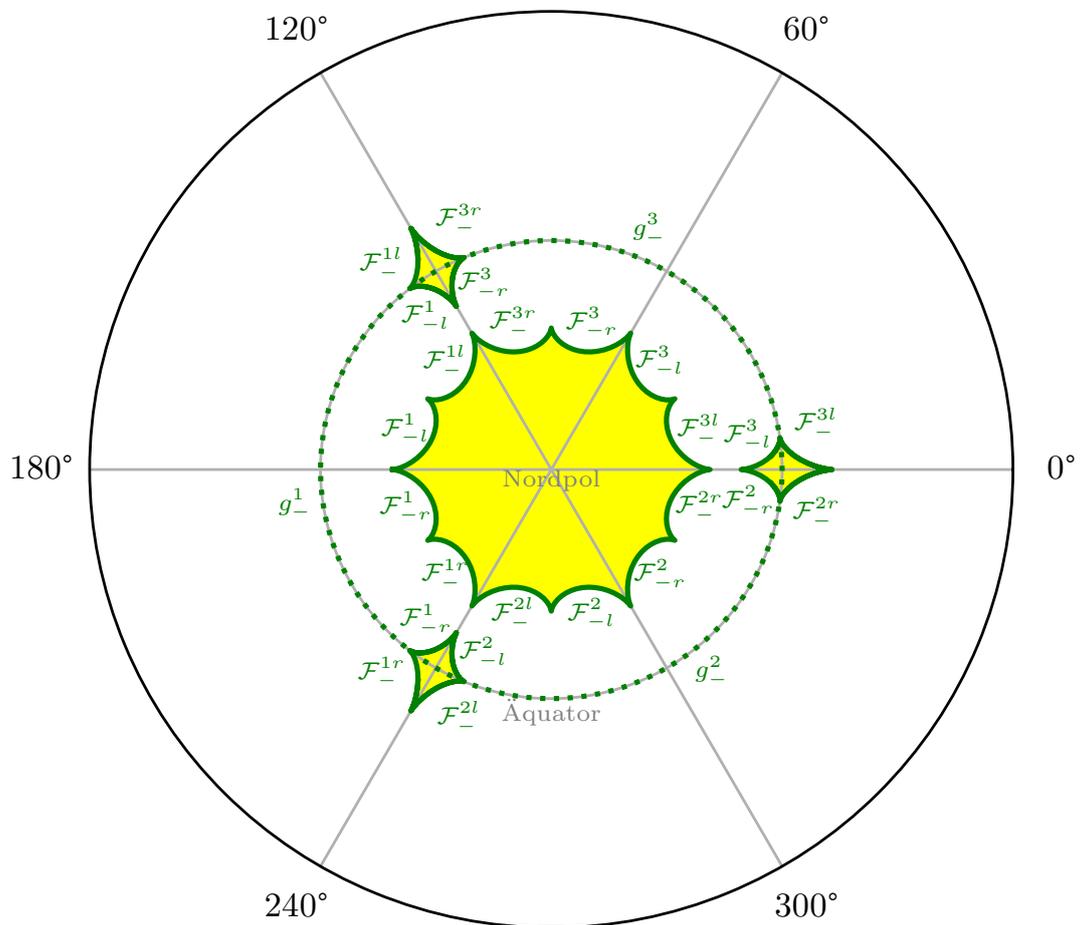
In Abschnitt 2.2.2 wurde erwähnt, dass der Fence in den polydirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  projiziert werden kann. Der Fence für einen Biped der Länge  $b_n$  ergibt sich dann als Schnitt des Fences in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  mit dem unidirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_n$ . Ganz allgemein weist der Fence in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  dieselbe Translationsymmetrie wie das Pattern auf, da das in Abschnitt 2.2.2 eingeführte Biped-Potential  $V_{\text{biped}}$  invariant unter gleichzeitiger Anwendung der Transformationen  $\mathbf{b}_n \rightarrow \mathbf{b}_n + \mathbf{a}_i$  und  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \frac{\mathbf{a}_i}{2}$  ist, wobei  $\mathbf{a}_i$  ein beliebiger Gittervektor des Patterns ist [6, S. 4]. Daher kann der Fence im gesamten polydirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  aus dem im Bereich einer Elementarzelle gefolgert werden, wobei die Elementarzellen dieselbe Form und Größe haben wie die des Patterns in  $\mathcal{A}$ .



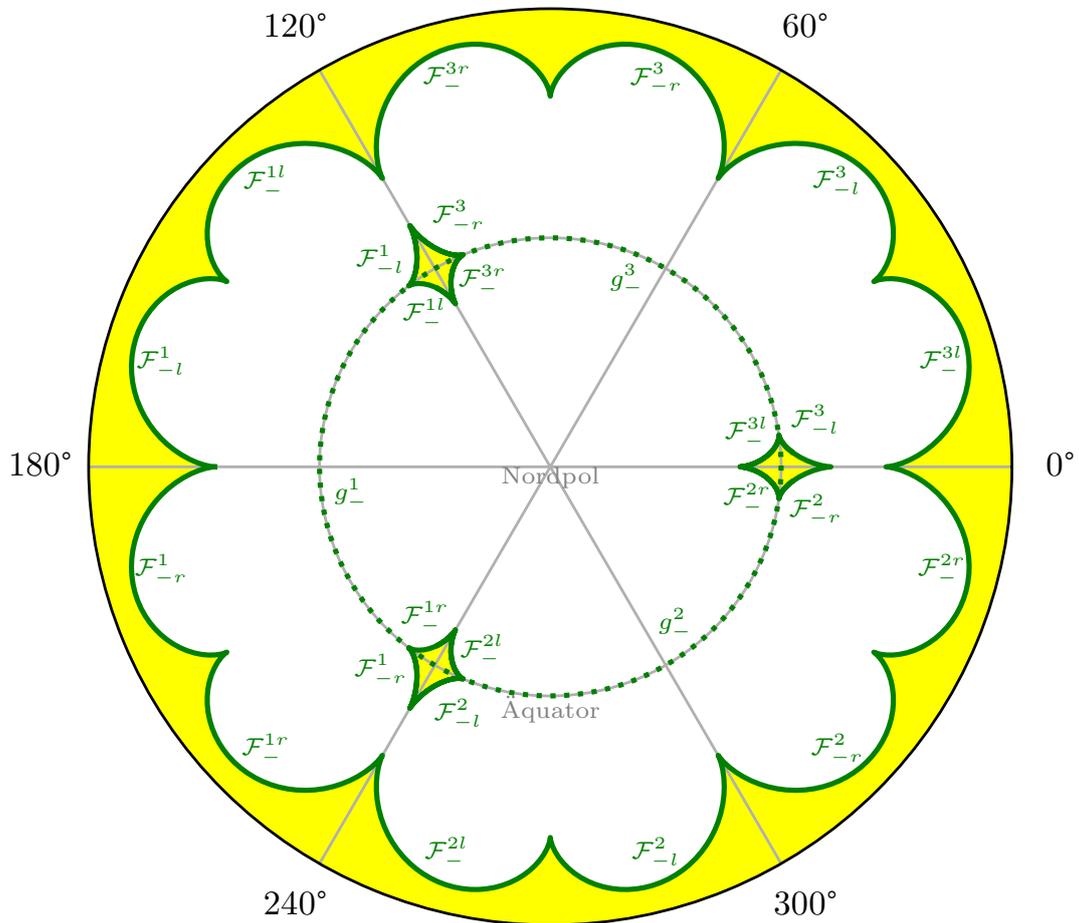
**Abbildung 3.2:** Fence für einzelne Kugeln für  $\phi = 0$  (um den Südpol) sowie Fence und Gates für  $\phi = \frac{\pi}{6}$  (am Äquator). Dargestellt ist eine stereographische Projektion von  $\mathcal{C}$ , bei der die Projektionsebene die Kugel am Südpol berührt. Daher liegt der Nordpol im Zentrum der Abbildung und der Südpol im Unendlichen.



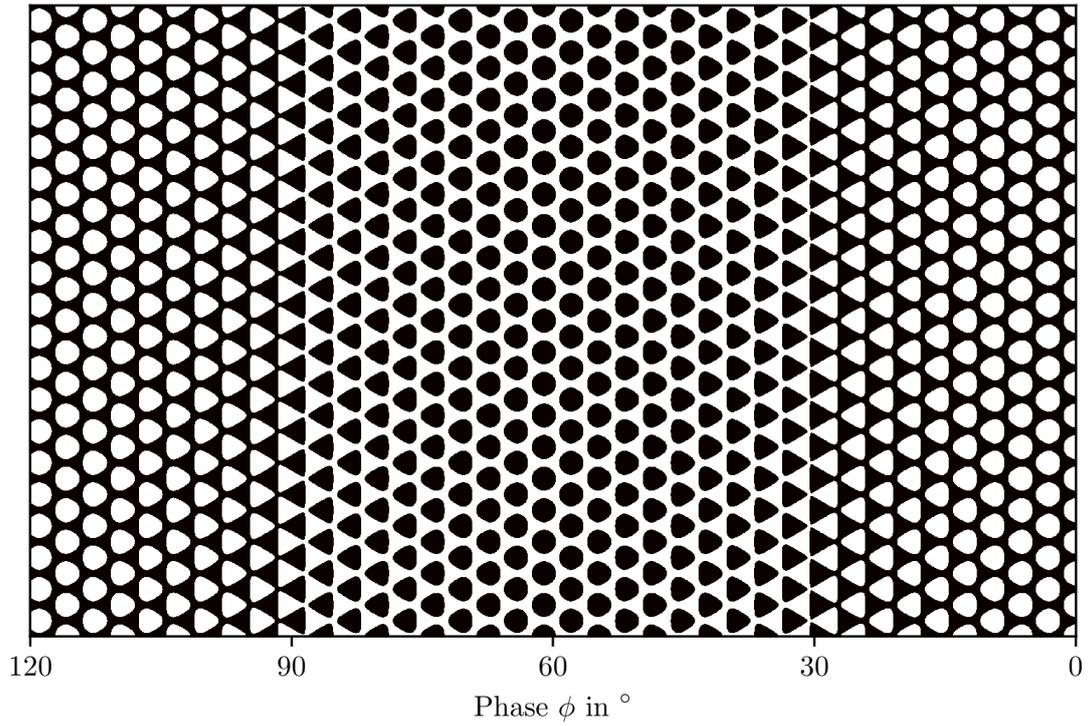
**Abbildung 3.3:** Fence und Gates für einzelne Kugeln für  $\phi = \frac{\pi}{6}$  (am Äquator) und Fence für  $\phi = \frac{2\pi}{6}$  (um den Nordpol). Die Abbildung geht aus Abbildung 3.2 hervor durch Rauminversion, Spiegelung an der Ebene  $x = 0$  sowie anschließende Ersetzung der Fence-Segmente und Gates gemäß den Tabellen 3.1 und 3.2. Da sowohl die Transformationen  $i$  und  $\sigma_x$  auf  $\mathcal{C}$  angewandt werden, können die Phasendiagramme von Loehr et al. [4, S. 5060] zum Ermitteln der Bewegungsrichtung unverändert angewandt werden.



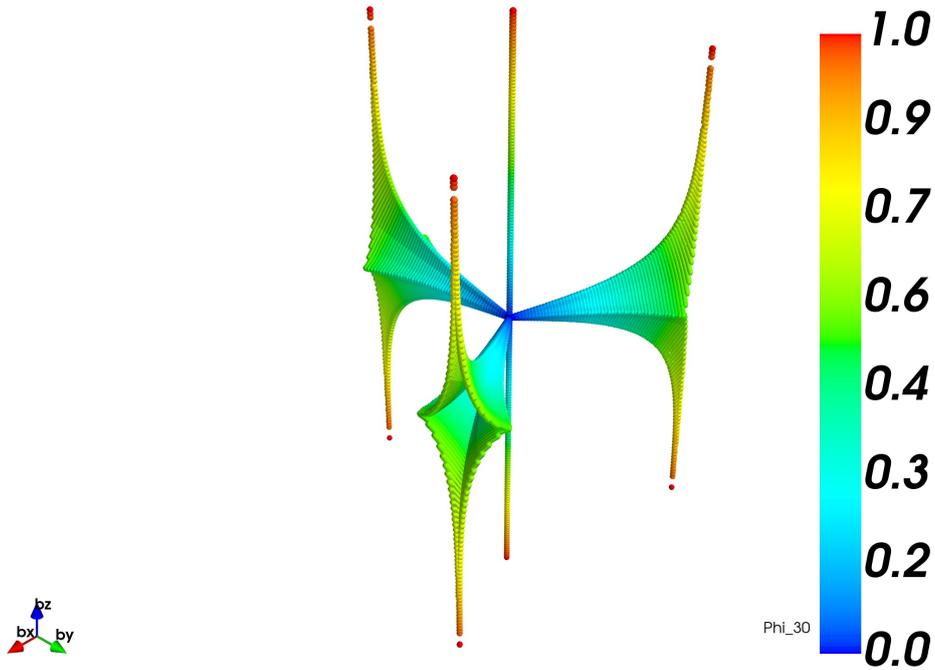
**Abbildung 3.4:** Fence für einzelne Kugeln für  $\phi = \frac{2\pi}{6}$  (um den Nordpol) sowie Fence und Gates für  $\phi = \frac{3\pi}{6}$  (am Äquator). Die Abbildung geht aus Abbildung 3.2 hervor durch Rauminversion. Da die Transformation  $i$  auf  $\mathcal{C}$  angewandt wird, müssen bei Verwendung der Phasendiagramme von Loehr et al. [4, S. 5060] die Richtungen  $\uparrow$  und  $\downarrow$  in  $\mathcal{C}$  vertauscht werden.



**Abbildung 3.5:** Fence und Gates für einzelne Kugeln für  $\phi = \frac{3\pi}{6}$  (am Äquator) und Fence für  $\phi = \frac{4\pi}{6}$  (um den Südpol). Die Abbildung geht aus Abbildung 3.2 hervor durch Spiegelung an der Ebene  $x = 0$  sowie Ersetzung der Fence-Segmente und Gates gemäß den Tabellen 3.1 und 3.2. Da die Transformation  $\sigma_x$  auf  $\mathcal{C}$  angewandt wird, müssen bei Verwendung der Phasendiagramme von Loehr et al. [4, S. 5060] die Richtungen  $\uparrow$  und  $\downarrow$  in  $\mathcal{C}$  vertauscht werden.



**Abbildung 3.6:** Schematische Darstellung der verwendeten Metamorphose. Im Versuch wurde ein Pattern mit linearem Gradienten  $\phi = \phi(x) = -\frac{2\pi}{\lambda}x$  mit  $\lambda = 228a$  verwendet, wobei  $a$  die Gitterkonstante des Patterns ist. In dieser Darstellung wurde ein viermal kleineres  $\lambda$  gewählt, um den gesamten Bereich  $0 \leq \phi \leq \frac{2\pi}{3}$  auf einer Seite abbilden zu können.



**Abbildung 3.7:** Fence  $\mathcal{F}_-$  im polydirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  für das  $S_6$ -Muster, angepasst von [3]. Dargestellt ist der Bereich einer Wigner-Seitz-Zelle von  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$ ; diese hat dieselbe Form und Größe wie die Wigner-Seitz-Zelle von  $\mathcal{A}$  aus Abbildung 3.1. Die Farbskala gibt den Abstand zum Mittelpunkt der Zelle in Einheiten der Gitterkonstante an. Das Koordinatensystem links unten im Bild ist ein anderes als das sonst in dieser Arbeit zugrundegelegte; die Orientierung des Fences bezüglich des Koordinatensystems aus Abbildung 3.1 sowie die Periodizität sind schematisch in den Abbildungen 4.3 und 4.6 eingezeichnet.

Obwohl der Fence auch hier von der Phase abhängt, wird in dieser Arbeit für Bipeds nur der Fall  $\phi = \frac{\pi}{6}$  betrachtet. In Abbildung 3.7 ist  $\mathcal{F}_-$  für diese Phase im Bereich einer Wigner-Seitz-Zelle dargestellt. Die Farbskala gibt den Abstand zum Mittelpunkt der Zelle in Einheiten der Gitterkonstante an. Das Koordinatensystem links unten im Bild ist ein anderes als das sonst in dieser Arbeit zugrundegelegte; die Orientierung des Fences bezüglich des Koordinatensystems aus Abbildung 3.1 sowie die Periodizität sind schematisch in den Abbildungen 4.3 auf S. 29 und 4.6 auf S. 4.6 eingezeichnet. Auf die beiden Abbildungen wird in einem späteren Abschnitt noch ausführlich eingegangen. Der Fence ist symmetrisch bezüglich der Ebene  $b_z = 0$ . Ober- und unterhalb jedes  $S_6$ -Symmetriezentrums hat der Fence die Form eines Zeltes mit einer unendlich hohen Spitze. Die Grundfläche jedes Zeltes ist ein dreizackiger Stern, zu dessen Zacken hin die Zeltwände abfallen. Im Mittelpunkt jeder Elementarzelle berühren sich die Zacken von jeweils drei benachbarten Zelten; dies ist der Mitte von Abbildung 3.7 zu sehen. Zusätzlich geht durch jeden dieser Punkte eine zur  $z$ -Achse parallele Gerade. Ihr Schnitt mit beliebigen  $\mathcal{T}_n$  besteht aus zwei Punkten genau am Nord- und Südpol. Weil diese Punkte von keinem der hier verwendeten Loops geschnitten oder umlaufen werden, wird dieser Teil des Fences im weiteren Verlauf nicht berücksichtigt und ist auch in den Abbildungen 4.3 und 4.6 nicht eingezeichnet. Eine genauere Diskussion des Zusammenhangs zwischen dem Umlaufen der Fences in  $\mathcal{T}_n$  und dem damit einhergehenden Transport in  $\mathcal{A}$  wird in den kommenden Abschnitten diskutiert.

# 4 Design und Test eines Loops zur Herstellung von Bipeds bestimmter Länge

## 4.1 Grundprinzip

Die eben beschriebene Abhängigkeit von Fence und Gates von der  $x$ -Koordinate und der Biped-Länge führt direkt zu einer Abhängigkeit der Reaktion der Partikel auf das externe Magnetfeld von ebendiesen Parametern. Dies kann dazu genutzt werden, beide weitgehend unabhängig vom Anfangszustand zu kontrollieren. Dazu wird der Loop in  $\mathcal{C}$  so gewählt, dass beide relevanten Eigenschaften der Kolloide (Position und Länge) gezielt in die gewünschte Richtung verändert werden, sofern sie vom Sollwert abweichen. Auf diese Weise stellt sich der Sollwert von selbst ein, ohne dass zusätzlich von außen in das System eingegriffen werden muss.

Angewandt auf die Positionskontrolle bedeutet das eben formulierte Grundprinzip, dass sich die  $x$ -Position des Partikels genau dann ändern muss, wenn er noch nicht in der gewünschten Position ist. Als Sollwert wurde eine  $x$ -Position nahe  $\phi = 30^\circ$  gewählt. Da die Phase beim verwendeten Pattern in  $-x$ -Richtung steigt (siehe Abbildung 3.6 auf S. 21), müssen sich die Kolloide im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  nach links bewegen und im Bereich  $30^\circ < \phi \leq 60^\circ$  nach rechts. Wir werden im Rahmen dieser Arbeit ausschließlich diesen Bereich der Phase  $\phi$  betrachten. Wenn die Partikel dann bei  $\phi = 30^\circ$  angelangt sind, befinden sie sich in einer Art stabilem Gleichgewicht: Jede Auslenkung aus der Sollposition führt zu einer Bewegung, die wieder zur Gleichgewichtslage hin gerichtet ist.

Dabei ist zu beachten, dass alle drei primitiven Gittervektoren eine von Null verschiedene  $y$ -Komponente besitzen. Soll der Loop die Partikel pro Durchlauf nur um *einen* primitiven Gittervektor transportieren, so müssen die Partikel in den Bereichen  $0 \leq \phi < 30^\circ$  und  $30^\circ < \phi \leq 60^\circ$  folglich zusätzlich zur Bewegung in  $x$ -Richtung auch eine Bewegung in  $y$ -Richtung ausführen. Diese kann für  $\phi < 30^\circ$  und  $\phi > 30^\circ$  gleich oder entgegengesetzt sein. Beide Möglichkeiten wurden erprobt; die zugehörigen Loops werden in den nächsten Abschnitten vorgestellt.

In beiden Fällen sammeln sich allerdings die vormalig auf dem gesamten Pattern verteilten Partikel im Bereich mit  $\phi = 30^\circ$ , den wir im weiteren Verlauf *Konvergenzzone* nennen. Dort treffen dann mit hoher Wahrscheinlichkeit einzelne Kugeln direkt aufeinander und werden zu Bipeds, die mit der Zeit immer weiter wachsen. Idealerweise sollten Bipeds ausschließlich an diesem Ort entstehen, um die Wachstumsphase auf eine möglichst kurze Zeit zu beschränken. Dies ist notwendig, da die Längenkontrolle grundsätzlich anders funktioniert als die Positionskontrolle: Da die Bipeds nur wachsen, aber nicht schrumpfen

können, kann die Länge im Gegensatz zur Position nur in eine Richtung variiert werden. Wenn ein Biped einmal die gewünschte Länge überschritten hat, lässt sich dies nicht mehr rückgängig machen. Somit kann es bei der Längenkontrolle kein stabiles Gleichgewicht geben, sondern die einzige Möglichkeit besteht darin, dem System die Bipeds mit der gewünschten Länge zu entziehen, sodass sie nicht mehr in Kontakt mit weiteren Partikeln kommen. Dies ist analog zu Stofftrennverfahren bei chemischen Reaktionen möglich. Um mehrere dieser Verfahren zu erproben, wurden bei den beiden erprobten Loops zwei unterschiedliche Trennverfahren implementiert. Die beiden Loops werden im Folgenden genauer dargestellt.

## 4.2 Variante 1: Trennung von Bipeds nach Länge anhand der Laufgeschwindigkeit

In Abbildung 4.2 ist ein möglicher Loop zusammen mit den Fences für  $\phi = 0^\circ$ ,  $\phi = 30^\circ$  und  $\phi = 60^\circ$  dargestellt. Um im Text leichter Bezug auf die verschiedenen Loops nehmen zu können, benennen wir sie nach Objekten, die topologisch äquivalent zu ihnen sind. Den Loop in Abbildung 4.2 bezeichnen wir deshalb als *Ketten-Loop*. Bevor wir ihn weiter diskutieren, gehen wir noch auf den sogenannten *Ring-Loop* aus Abbildung 4.1 ein, der vor Anwendung des Ketten-Loops eine geeignete räumliche Anfangsverteilung der Kolloide herstellt.

### 4.2.1 Ring-Loop: Herstellung der Anfangsverteilung der Kolloide

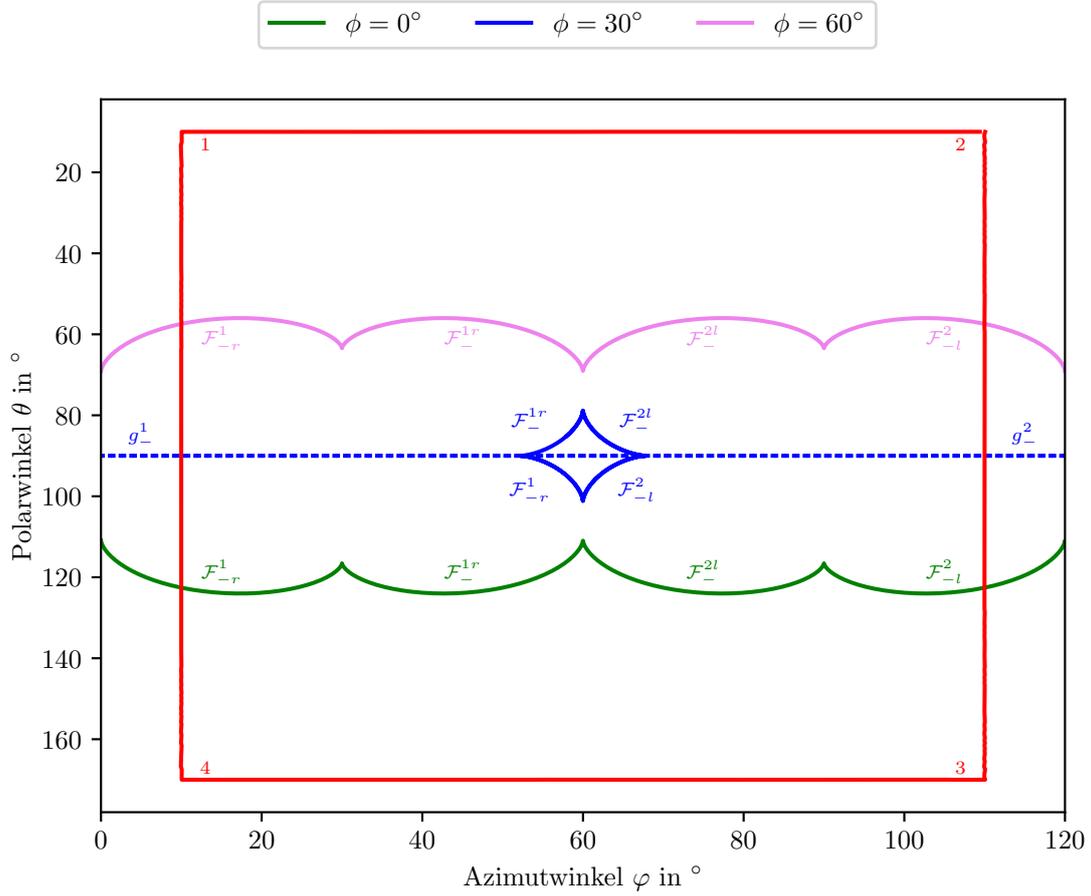
Wie in Kürze erläutert wird, transportiert der Ketten-Loop die bei  $\phi = 30^\circ$  entstehenden Bipeds nach oben.<sup>1</sup> Um dort den Kontakt mit einzelnen Kugeln und damit ein weiteres Anwachsen der Bipeds zu verhindern, wird die Metamorphose vor der Anwendung des Ketten-Loops von Partikeln geleert. Dabei wird die Tatsache genutzt, dass sich unten ein Muster mit  $C_2$ -Symmetrie und Streifen in  $x$ -Richtung an die Metamorphose anschließt. Den von einem Loop auf einem Muster dreizähliger Symmetrie bewirkten Transport einzelner Kugeln in  $\mathcal{A}$  werden wir im Folgenden immer mithilfe der Phasendiagramme aus [4, S. 5060] erschließen. Im Falle des Ring-Loops bewegen sich die Partikel auf der gesamten Metamorphose um  $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$  (oben links), während auf dem  $C_2$ -Muster kein Transport stattfindet [4, S. 5053]. Somit ist die Metamorphose nach hinreichend häufigem Ausführen des Ring-Loops von Partikeln befreit.

### 4.2.2 Ketten-Loop: Positionskontrolle einzelner Kugeln

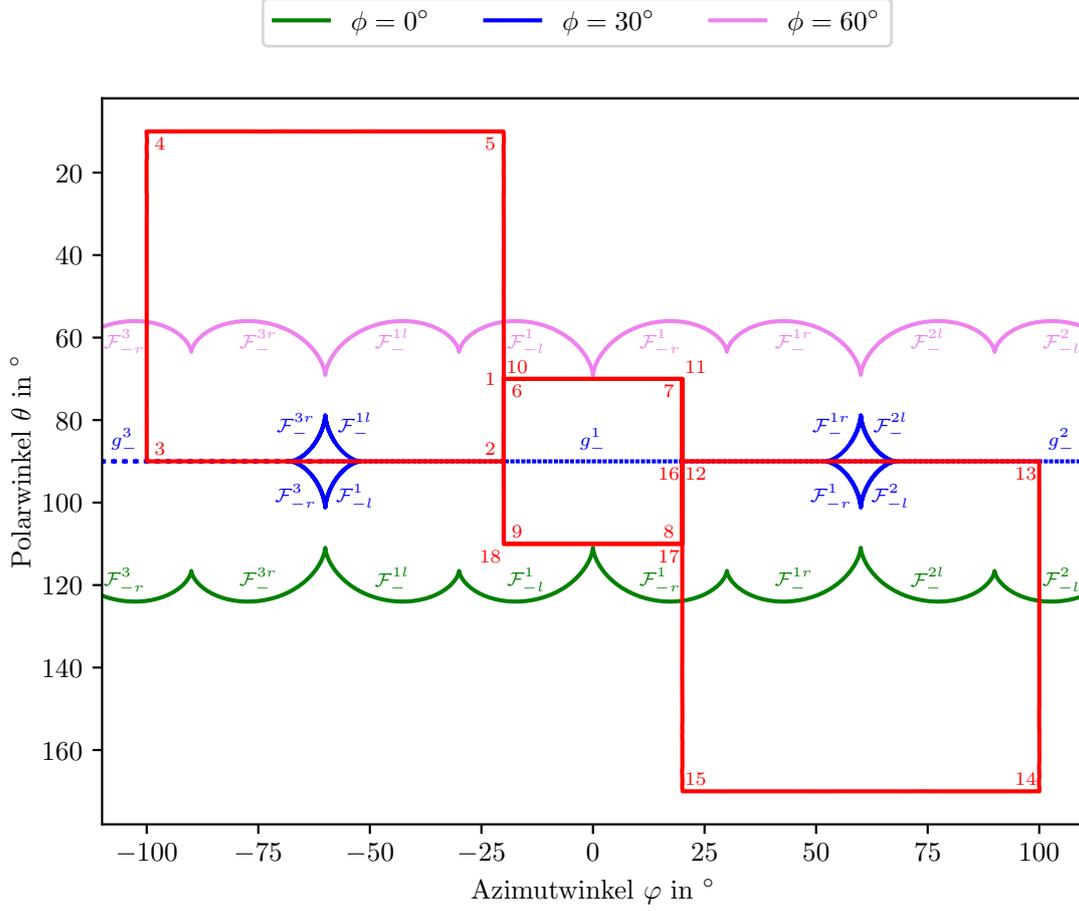
Der anschließend angewandte Ketten-Loop transportiert die Kolloide auf dem  $C_2$ -Muster nach oben, da der Teil-Loop 6–10 den Fence bei  $\varphi = 0^\circ$  im Uhrzeigersinn umrundet [4, S. 5053]. Die beiden anderen Teil-Loops 1–6 und 12–16 schließen den Fence des  $C_2$ -Musters nicht ein und bewegen somit keine Partikel.

---

<sup>1</sup>Mit *oben*, *unten*, *rechts* und *links* bezeichnen wir im Folgenden die  $+y$ -,  $-y$ -,  $+x$ - und  $-x$ -Richtung.



**Abbildung 4.1:** *Ring-Loop*, der als Vorbereitung für den *Ketten-Loop* zur Entleerung der Metamorphose von Partikeln genutzt wird. Die roten Zahlen geben an, in welcher Reihenfolge die Eckpunkte des Loops abgelaufen werden. Für alle  $C_6$ -artigen Muster im Bereich  $0^\circ \leq \phi \leq 60^\circ$  fällt der Loop in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^2 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^3$ , für die  $S_6$ -artigen Muster in die Klasse  $\downarrow g_{-}^2 \uparrow g_{-}^3$ . Beide bewirken adiabatischen Transport um  $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$ . Der Fence für das  $C_2$ -Muster (nicht eingezeichnet) hingegen besteht aus Punkten auf dem Äquator von  $\mathcal{C}$  bei  $\varphi = 0^\circ$  und  $\varphi = 180^\circ$ , liegt also außerhalb des Loops. Daher verursacht der Ring-Loop keinen Transport auf dem  $C_2$ -Muster.



**Abbildung 4.2:** Ketten-Loop, der zum Sammeln der Kugeln auf der vertikalen Linie mit  $\phi = 30^\circ$  genutzt wird. Die roten Zahlen geben an, in welcher Reihenfolge die Eckpunkte des Loops abgelaufen werden. Ausschließlich der Teil-Loop 6–10 umläuft den Fence des  $C_2$ -Musters, wo er Transport nach oben verursacht. Auf der Metamorphose bewirkt der Teil-Loop keinen Transport, da er im  $S_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow g_-^1 \uparrow g_-^1$  fällt und im  $C_6$ -artigen Fall überhaupt kein Fence-Segment schneidet. Der Teil-Loop 12–16 gehört für  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  im  $C_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^2 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^1$  und im  $S_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow g_-^2 \uparrow g_-^1$ , bewirkt also beide Male Transport um  $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$ . Im Bereich  $30^\circ < \phi \leq 60^\circ$  schneidet er kein relevantes Fence-Segment oder Gate und verursacht somit keinen Transport. Analog dazu bewirkt der Teil 1–6 ausschließlich Transport im Bereich  $30^\circ < \phi \leq 60^\circ$ , wo er im  $C_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^1 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^3$  und im  $S_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow g_-^1 \uparrow g_-^3$  fällt. Beide Klassen sorgen für Transport um  $\mathbf{a}_1$ .

Im Gegensatz dazu führt der Teil-Loop 6–10 auf der Metamorphose zu keinem Transport, denn im  $S_6$ -artigen Fall fällt er in die Klasse  $\downarrow g_-^1 \uparrow g_-^1$  und schneidet im  $C_6$ -artigen Fall überhaupt keinen Fence. Dafür gehört der Teil-Loop 12–16 im  $C_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^2 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^1$  und im  $S_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow g_-^2 \uparrow g_-^1$ , bewirkt also im gesamten Bereich  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  eine Bewegung um  $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$  (oben links). Für  $\phi > 30^\circ$  schneidet der Teil kein relevantes Fence-Segment<sup>2</sup> oder Gate und bewirkt somit keinen Transport. Analog dazu bewirkt der Teil 1–6 ausschließlich Transport im Bereich  $30^\circ < \phi \leq 60^\circ$ , wo er im  $C_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^1 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^3$  und im  $S_6$ -artigen Fall in die Klasse  $\downarrow g_-^1 \uparrow g_-^3$  fällt. Beide Klassen sorgen für Transport um  $\mathbf{a}_1$ .

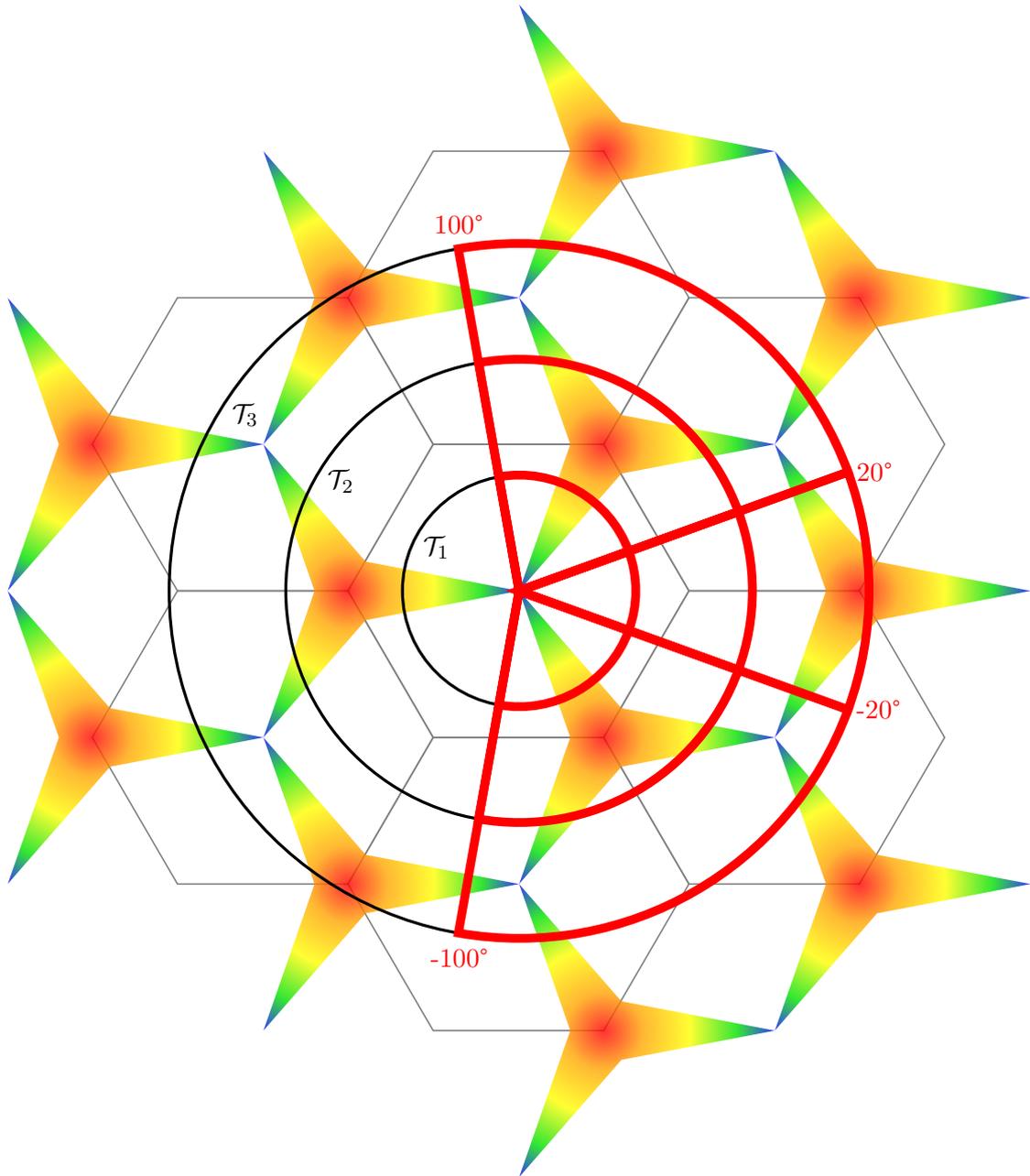
Zusammengefasst passiert also das Folgende: Nachdem beim Ring-Loop die auf dem  $C_2$ -Muster befindlichen Partikel an ihrer Position bleiben, werden sie beim Ketten-Loop nach oben transportiert und gelangen auf die Metamorphose. Dort ändert sich die Bewegungsrichtung und die Kugeln bewegen sich von beiden Seiten schräg auf die parallel zur  $y$ -Achse verlaufende Linie mit  $\phi = 30^\circ$  zu. Eine Aufnahme dieses Vorgangs im Experiment ist in der Datei `Video01_Ketten-Loop_Experiment.avi` zu sehen. Dort ist auch erkennbar, dass sich die Kugeln in der Konvergenzzone im Zickzack in positive  $y$ -Richtung bewegen. Dies lässt darauf schließen, dass sich die Kugeln abwechselnd in den Bereichen  $\phi < 30^\circ$  und  $\phi > 30^\circ$  befinden: In jedem dieser beiden Bereiche bewegen sie sich in Richtung der Linie  $\phi = 30^\circ$ , haben diese aber nach einem Schritt bereits überquert und bewegen sich somit beim nächsten Teil des Loops in die jeweils andere Richtung. Daraus resultiert keine effektive Fortbewegung in  $x$ -Richtung, wohl aber eine in  $y$ -Richtung, da die  $x$ -Komponenten der beiden Bewegungsrichtungen entgegengesetzt, die  $y$ -Komponenten aber gleich sind. So kommt die beobachtete Zickzack-Bewegung zustande.

### 4.2.3 Darstellung des Ketten-Loops im polydirektionalen Transcription Space

Weiterhin ist im Video die bereits erwähnte Entstehung von Bipeds in der Konvergenzzone erkennbar. Weil deren Verhalten nicht mehr mit dem Fence für einzelne Kugeln erklärt werden kann, ist hierfür eine Betrachtung des polydirektionalen Transcription Spaces notwendig. Wie sich in diesem und im nächsten Abschnitt zeigen wird, lässt sich das Verhalten der Bipeds in der Konvergenzzone mit einem  $S_6$ -Pattern erklären, ohne die Ortsabhängigkeit der Phase bei der Metamorphose zu berücksichtigen. Daher wird der Transcription Space im weiteren Verlauf nur für  $\phi = 30^\circ$  betrachtet.

Der polydirektionale Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  ist schematisch in Abbildung 4.3 skizziert. Dargestellt ist eine Draufsicht auf den Fence, d. h. Blickrichtung ist die negative  $z$ -Richtung. Unter dem Fence wurden zur besseren Orientierung die Umrisse der Wigner-Seitz-Zellen eingefügt. Bei dem in Abbildung 3.7 auf S. 22 dreidimensional dargestellten Fence-Segment handelt es sich genau um den Ausschnitt, der sich im Bereich einer Wigner-Seitz-Zelle befindet. Des Weiteren sind die Schnitte der unidirektionalen Trans-

<sup>2</sup>Im  $S_6$ -artigen Fall befinden sich die Satelliten für  $20^\circ < \phi < 30^\circ$  auf der Südhalbkugel und für  $30^\circ < \phi < 40^\circ$  auf der Nordhalbkugel. Für Satelliten auf der Nordhalbkugel sind nur die nördlichen Fence-Segmente für den Transport relevant, für Satelliten auf der Südhalbkugel nur die südlichen.



**Abbildung 4.3:** *Ketten-Loop* im polydirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$ . Dargestellt ist eine Draufsicht auf  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  mit dem Fence für das  $S_6$ -Muster (Regenbogenfarben). Unterhalb des Fences wurden die Ränder der Wigner-Seitz-Zellen von  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  eingefügt (graue Linien), die dieselbe Form und Größe haben wie die von  $\mathcal{A}$ . Zu sehen sind außerdem die Schnitte der unidirektionalen *Transcription Spaces*  $\mathcal{T}_1$ ,  $\mathcal{T}_2$  und  $\mathcal{T}_3$  (schwarze Kreise) mit der Ebene  $\mathbf{b}_z = 0$  sowie die Projektion des Ketten-Loops in diese Ebene entlang der Längengrade der  $\mathcal{T}_n$  (rote Linien). An den Berührungspunkten der einzelnen Teil-Loops ist jeweils der Azimutwinkel  $\varphi$  angegeben. Eine genauere Beschreibung der Wirkungsweise des Loops ist im Text zu finden.

cription Spaces  $\mathcal{T}_1$ ,  $\mathcal{T}_2$  und  $\mathcal{T}_3$  mit der Ebene  $b_z = 0$  als Kreise mit den Radien  $b_1$ ,  $b_2$  und  $b_3$  abgebildet.<sup>3</sup> Wie in Abschnitt 3.2 erläutert wurde, entspricht jeder der Teil-Loops in  $\mathcal{C}$  einem Kegel in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$ . Somit besteht der Ketten-Loop aus drei Kegeln, deren Projektion entlang der Längengrade der  $\mathcal{T}_n$  in die Ebene  $b_z = 0$  ebenfalls abgebildet ist.

#### 4.2.4 Symmetrieüberlegungen zur Folgerung der Bewegungsrichtung von Bipedes

Aus dieser Darstellung und Abbildung 3.7 ist erkennbar, dass der Fence in allen drei  $\mathcal{T}_n$  aus Satelliten besteht, die um den Äquator zentriert sind. Zusammen mit Abbildung 4.2 lässt sich daraus ablesen, welche Fence-Segmente der Loop in welche Richtung umläuft. Mit dieser Information lässt sich die Bewegungsrichtung der Bipedes folgern unter der Voraussetzung, dass der Transport adiabatisch erfolgt, der Loop den Fence also nicht schneidet.

Wir betrachten zunächst einen Loop in einem beliebigen unidirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_n$ , der einen Satelliten genau einmal umläuft. Der Loop ist eine Linie auf der Kugeloberfläche mit Radius  $b_n$ . Wird der Loop deformiert, ohne dabei den Fence zu überqueren, ändert sich die zugehörige Bewegungsrichtung in  $\mathcal{A}$  nicht.<sup>4</sup> Die Deformation darf dabei sowohl entlang der Kugeloberfläche als auch senkrecht dazu erfolgen. Letzteres entspricht anschaulich einer Änderung der Biped-Länge während der Ausführung des Loops, die zwar experimentell bislang nicht umsetzbar, andererseits aber nicht grundsätzlich ausgeschlossen ist.

Jeder der Satelliten entsteht aus der Zacke eines Zeltes, die in Richtung  $\varphi = 0^\circ$ ,  $120^\circ$  oder  $240^\circ$  zeigt. Es gibt genau eine Ebene  $E$ , die den zugehörigen Längengrad in allen  $\mathcal{T}_n$  enthält. Wir deformieren den Loop nun so, dass er – ohne Berücksichtigung der Laufrichtung – spiegelsymmetrisch bezüglich dieser Ebene ist.

Wird nun das gesamte System an  $E$  gespiegelt, so zieht dies einerseits eine Spiegelung der Bewegungsrichtung in  $\mathcal{A}$  an dieser Ebene nach sich. Andererseits ist das Pattern invariant unter der Spiegelung, da in den oben genannten Richtungen die Symmetrieebenen des  $S_6$ -Musters liegen. Auch der Loop wird infolge der Deformation wieder auf sich selbst abgebildet, allerdings mit umgekehrter Laufrichtung. Unter Annahme, dass der Transport adiabatisch (und damit zeitreversibel) ist, bedeutet dies eine Zeitumkehr der Bewegung in  $\mathcal{A}$ , also eine Umkehrung der Bewegungsrichtung.

Diese ist demnach gleichbedeutend mit einer Spiegelung an der Ebene  $E$ . Daraus folgt, dass die Bewegungsrichtung senkrecht auf  $E$  steht, was die Wahl auf zwei mögliche Richtungen einschränkt. Welche davon zutrifft, zeigt eine genauere Betrachtung der Fortbewegung von Bipedes: Diese kann als ein Laufen gesehen werden, bei dem der Biped abwechselnd nur mit dem einen oder dem anderen Ende den Boden berührt [5, S. 1664–

<sup>3</sup>Streng genommen müsste  $\mathcal{T}_1$  als Kreis mit infinitesimalem Radius dargestellt werden, was sich aber nicht zeichnen lässt.

<sup>4</sup>Begründung: Solange kein Fence überquert wird, bleibt die Anzahl der Maxima von  $V_{\text{biped}}$  erhalten. Deren Position hängt gemäß Gleichung (2.3) und (2.5) stetig von  $\mathbf{b}$  ab; gleichzeitig kann sich die Position eines Potentialmaximums in  $\mathcal{A}$  pro Durchlauf des Loops nur um einen Gittervektor ändern. Somit muss die Transportrichtung gleich bleiben.

1665]. Der Wechsel zwischen den beiden Enden wird durch die Kippbewegung des Bipeds verursacht, die durch seine Ausrichtung an  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  zustande kommt. Für  $H_{\text{ext},z} > 0$  befindet sich der Nordpol des Bipeds auf dem Boden und die Kippbewegung des Bipeds folgt genau der des Vektors  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ . Für  $H_{\text{ext},z} < 0$  befindet sich der Südpol des Bipeds auf dem Boden und die Kippbewegung des Bipeds ist der von  $\mathbf{H}_{\text{ext}}$  genau entgegengesetzt. Zusammen mit der Annahme, dass die Umrundung eines einzelnen Satelliten wie bei einzelnen Kugeln den Transport um genau einen Gittervektor bewirkt, führt dies zu der

**Folgerung.** *Die Umrundung eines Satelliten in  $\mathcal{T}_n$  kann als Umrundung der Zacke eines Zeltes in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  betrachtet werden. Sie führt zu einer Bewegung um einen Gittervektor senkrecht zu dieser Zacke. Die Bewegungsrichtung ist dieselbe wie die eines Rades, das sich in die gleiche Richtung dreht wie der Loop.*

Umläuft ein Loop zwei Satelliten auf einmal, kann er zwischen diesen beiden Satelliten zusammengeschnürt und in zwei einzelne Loops aufgetrennt werden, ohne dass der Fence berührt wird. Daher ist die Situation beim gleichzeitigen Umlaufen mehrerer Satelliten äquivalent dazu, dass die Satelliten nacheinander einzeln umlaufen werden. Nach diesem Prinzip wird im Folgenden die Bewegungsrichtung der Bipeds aus Abbildung 4.3 erschlossen und mit den Beobachtungen verglichen.

#### 4.2.5 Ketten-Loop: Längenkontrolle von Bipeds

Die im Experiment beobachteten Zickzack-Bewegung der Kugeln wurde oben mit der Annahme erklärt, dass die Teil-Loops 1–6 und 12–16 immer für Transport sorgen, da sich bei ihrer Ausführung die Partikel niemals exakt bei  $\phi = 30^\circ$  befinden. Stattdessen befinden sie sich abwechselnd links und rechts dieser Linie, sodass die Satelliten in  $\mathcal{C}$  leicht zum Nordpol (Südpol) hin verschoben sind, wenn der Teil-Loop 1–6 (12–16) ausgeführt wird. Der Effekt ist dann derselbe, als wenn sich die Satelliten ganz im Inneren der Teil-Loops befinden. Dasselbe nehmen wir nun für die unidirektionalen Transcription Spaces  $\mathcal{T}_2$  und  $\mathcal{T}_3$  der Bipeds an; der unidirektionale Transcription Space  $\mathcal{T}_1$  entspricht genau dem Fall einzelner in Abbildung 4.3 und muss nicht weiter diskutiert werden.

In  $\mathcal{T}_2$  liegen zwei Satelliten zwischen  $\varphi = -100^\circ$  und  $\varphi = -20^\circ$  sowie zwei zwischen  $\varphi = 20^\circ$  und  $\varphi = 100^\circ$ . Alle werden im Uhrzeigersinn umrundet. Der Teil-Loop 1–6 bewirkt demnach Transport um den Vektor  $(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) + \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_1$  (oben rechts), der Teil-Loop 12–16 um den Vektor  $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$  (oben links). Da der Teil-Loop 6–10 keinen Satelliten umläuft, ergibt sich die Transportrichtung für Bipeds der Länge  $b_2$  zu  $\mathbf{a}_1 + (\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) = \mathbf{a}_2$  (oben), im Einklang mit der Beobachtung im Video `Video01_Ketten-Loop_Experiment.avi`. Auch die Computersimulation kommt zum selben Ergebnis (vgl. `Video02_Ketten-Loop_Simulation_b2.avi`).

In  $\mathcal{T}_3$  umrunden die Teil-Loops 1–6 und 12–16 ebenfalls je zwei Satelliten im Uhrzeigersinn und bewirken Transport um  $2\mathbf{a}_1$  (oben rechts) bzw.  $2(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)$  (oben links). Zusätzlich bewegt nun aber auch der Teil-Loop 6–10 im Bereich des Fences, allerdings nahe an einer Zeltpitze in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  (vgl. Abbildung 4.3). Da die tatsächliche Biped-Länge im Experiment oder der Simulation von der in der Abbildung eingezeichneten abweichen kann, ist nicht ganz klar, ob die Zeltpitze inner- oder außerhalb von  $\mathcal{T}_3$  liegt.

Falls der erste Fall zutrifft, ist die Situation wie in der Abbildung: Der Loop umläuft einen Satelliten und transportiert um  $\mathbf{a}_2$  (oben). Im zweiten Fall umläuft der Loop zwei Satelliten und transportiert um  $(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) + \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$  (oben). In beiden Fällen ergibt sich pro Durchlauf des Ketten-Loops insgesamt ein Transport um den Vektor  $2\mathbf{a}_1 + 2(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) + \mathbf{a}_2 = 3\mathbf{a}_2$  (oben).

Im Experiment ist hingegen nur eine Bewegung um  $2\mathbf{a}_2$  zu erkennen (vgl. `Video01_Ketten-Loop_Experiment.avi`), in der Computersimulation dafür um  $4\mathbf{a}_2$  (vgl. `Video03_Ketten-Loop_Simulation_b3.avi`). Vermutlich kann also nicht davon ausgegangen werden, dass der Teil-Loop 6–10 in  $\mathcal{T}_3$  außen um den Satelliten herum herumläuft. Stattdessen scheint es einen Ratschensprung zu geben. Dass dieser von der inneren Dynamik des Systems bestimmt wird, die sich in Experiment und Simulation vermutlich unterscheidet, könnte eine Erklärung für das beobachtete unterschiedliche Verhalten liefern. Hier wäre es hilfreich, die genaue Lage des Fences in  $\mathcal{T}_3$  zu kennen.

Dennoch erklärt das Modell aus Abbildung 4.3 die Bewegung der Bipeds in der Konvergenzzone nach oben und auch die unterschiedlichen Geschwindigkeiten. Es sagt korrekt vorher, dass sich Kugeln und Bipeds der Länge  $b_2$  pro Durchlauf des Ketten-Loops um eine Gitterkonstante fortbewegen, wohingegen Bipeds der Länge  $b_3$  schneller sind. In der Konvergenzzone bleibt daher der Abstand zwischen je zwei Bipeds derselben Länge erhalten, wohingegen der Abstand zwischen je einem Biped der Länge  $b_3$  und einem kürzeren mit der Zeit linear anwächst. Wenn die Metamorphose in  $y$ -Richtung groß genug ist, führt dies nach hinreichend langer Zeit zu einer räumlichen Trennung der Bipeds mit Länge  $b_3$  von den kürzeren; dies ist das Grundprinzip der *Chromatographie*, eines Stofftrennverfahrens aus der Chemie [7, S. 27–28].

Die Wirkung des Ketten-Loops wurde nur im Bereich  $0^\circ \leq \phi \leq 60^\circ$  betrachtet. Da sich das Muster in der Metamorphose aber nach  $\Delta\phi = 120^\circ$  wiederholt, kommen in der Konvergenzzone bei  $\phi = 30^\circ$  ausschließlich Kugeln aus einem in  $x$ -Richtung begrenzten Streifen des Musters an. Da sich im betrachteten Bereich um die Konvergenzzone alle Kugeln unter demselben Winkel auf die Konvergenzzone zubewegen, treffen die fertigen Bipeds deshalb ab einer gewissen  $y$ -Position auf keine neuen Kugeln mehr von außerhalb der Konvergenzzone.

Im Video `Video01_Ketten-Loop_Experiment.avi` entstehen allerdings auch *in* der Konvergenzzone Bipeds der Längen  $b_4$  und  $b_5$ . Dies geschieht, wenn ein kürzerer Biped von einem längeren überholt wird, sich aber dabei mit diesem verbindet. Dieser Effekt ist vermutlich nicht vermeidbar; es ist daher fraglich, welche Ausbeute an Bipeds der Länge  $b_3$  mithilfe des Ketten-Loops realisiert werden kann. Diese hängt möglicherweise von der Konzentration der verwendeten Suspension ab; je höher diese ist, desto mehr Partikel befinden sich auf dem Pattern und desto häufiger kommt es zur Kollision mehrerer Kugeln oder Bipeds. Hier wären weitere Versuche sinnvoll. Ein alternativer Ansatz ist es, die gewünschten Bipeds wieder aus der Konvergenzzone heraus in einen Bereich zu transportieren, in dem sich keine weiteren Partikel befinden. Dafür wird nun ein Beispiel gegeben.

## 4.3 Variante 2: Trennung von Bipeds nach Länge anhand der Laufrichtung

### 4.3.1 Brillen-Loop: Herstellung der Anfangsverteilung der Kolloide

Der in Abbildung 4.5 dargestellte *Brezel-Loop* setzt das in Abschnitt 4.1 vorgestellte Grundprinzip auf eine weitere Art um. Wie wir im weiteren Verlauf dieses Abschnitts sehen werden, verlassen die Bipeds die Konvergenzzone wieder in Richtung  $\phi < 30^\circ$ , sobald sie die gewünschte Länge erreicht haben. Damit sie dort nicht auf weitere Kugeln treffen, muss dieser Bereich vor Anwendung des Brezel-Loops mithilfe des *Brillen-Loops* aus Abbildung 4.4 von Kugeln geleert werden.

Dazu werden die Kugeln im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  parallel zur Linie  $\phi = 30^\circ$  nach oben transportiert. Um zu verhindern, dass dabei Kugeln vom unterhalb der Metamorphose liegenden  $C_2$ -Muster nachkommen, darf der Loop die Fence-Punkte des  $C_2$ -Musters bei  $\varphi = 0^\circ$  und  $\varphi = 180^\circ$  nicht umlaufen. Aus diesem Grund konnte kein einfacher Ring-Loop mit Transportrichtung  $\mathbf{a}_2$  verwendet werden. Stattdessen waren zwei Teil-Loops notwendig, was die Form des Brillen-Loops erklärt.

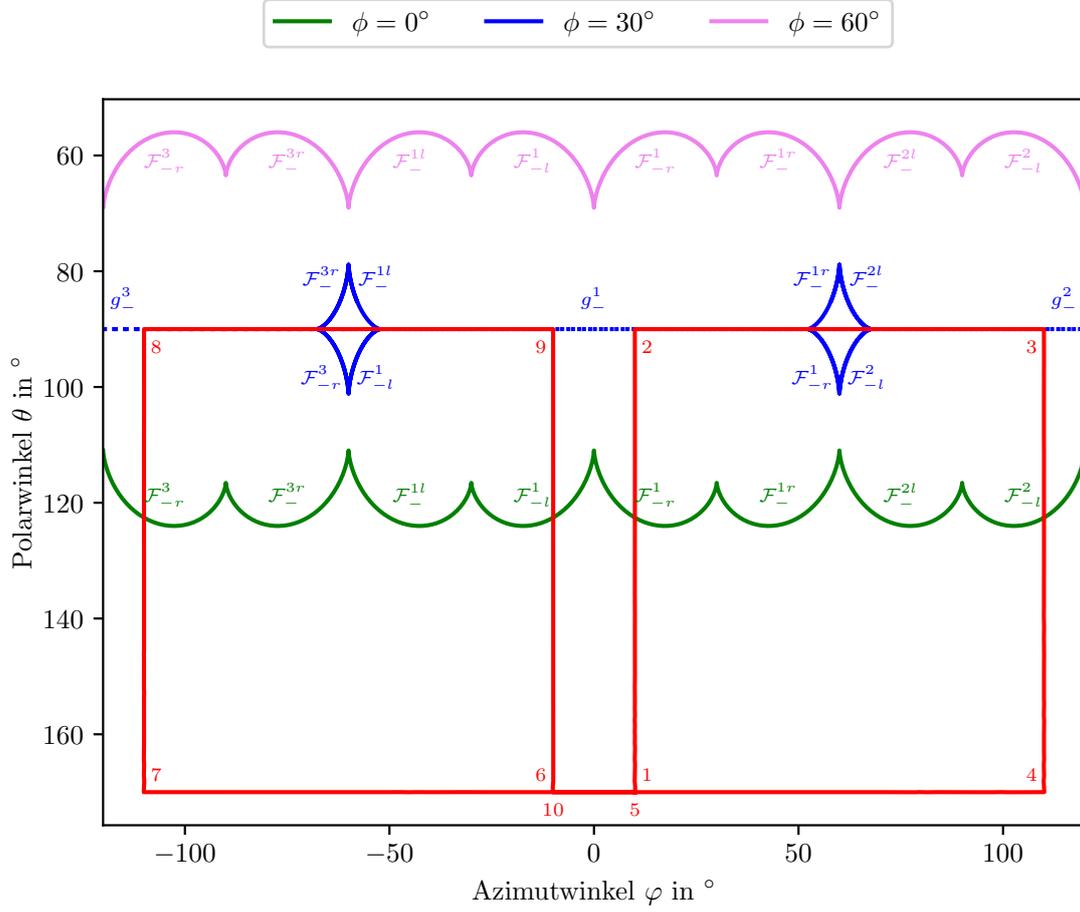
Da der Loop ausschließlich auf der Südhalbkugel von  $\mathcal{C}$  verläuft, führt er nur für  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  zum Transport in  $\mathcal{A}$ . Der Teil-Loop 1–5 fällt für  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^2 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^1$  und für  $20^\circ < \phi < 30^\circ$  in die Klasse  $\downarrow g_-^2 \uparrow g_-^1$ . Beide Male transportiert er adiabatisch um den Vektor  $\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1$  (oben links). Der Teil-Loop 6–10 fällt für  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^1 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^3$ , für  $20^\circ < \phi < 30^\circ$  in die Klasse  $\downarrow g_-^1 \uparrow g_-^3$ . Hier kommt es in beiden Fällen zum adiabatischen Transport um  $\mathbf{a}_1$  (oben rechts). Insgesamt transportiert der Brillen-Loop demnach pro Durchlauf um  $(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) + \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$  (oben), wie gewünscht.

### 4.3.2 Brezel-Loop: Positionskontrolle einzelner Kugeln

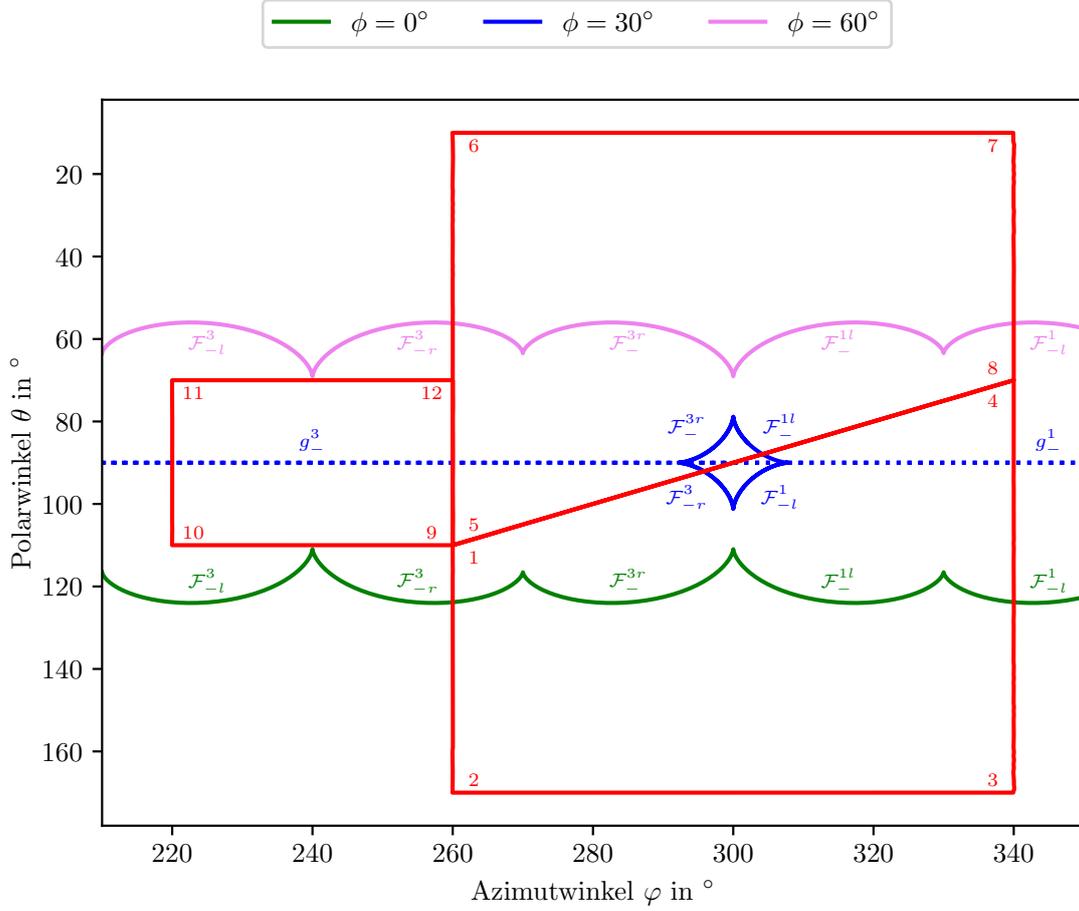
Ist der Bereich  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  von Partikeln geleert, wird der Brezel-Loop angewandt. Da auch er keinen Fence-Punkt des  $C_2$ -Musters umläuft, gibt es weiterhin keinen Transport vom  $C_2$ -Muster auf die Metamorphose. Um die Wirkung des Brezel-Loops auf der Metamorphose zu untersuchen, betrachten wir nun die drei Teil-Loops 1–5, 5–9 und 9–1 in Abbildung 4.5 einzeln.

Der Teil-Loop 9–1 fällt für  $20^\circ < \phi < 40^\circ$  in die Klasse  $\downarrow g_-^3 \uparrow g_-^3$ ; für  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  und  $40^\circ < \phi \leq 60^\circ$  schneidet er den Fence überhaupt nicht. Aus diesem Grund bewirkt er im gesamten betrachteten Bereich der Metamorphose keinen Transport.

Der Teil-Loop 1–5 fällt im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow \mathcal{F}_{-l}^1$  und transportiert adiabatisch um den Vektor  $-\mathbf{a}_1$  (unten links). Im Bereich  $20^\circ < \phi \leq 30^\circ$  schneidet der Teil-Loop für  $\phi$  nahe  $20^\circ$  kein Fence-Segment und fällt in die Klasse  $\downarrow g_-^3 \uparrow g_-^1$ , wo er ebenfalls adiabatisch um den Vektor  $-\mathbf{a}_1$  (unten links) transportiert. Mit wachsendem  $\phi$  wandert der beim Übergang vom  $C_6$ -artigem zum  $S_6$ -artigen Muster entstehende Satellit jedoch nordwärts Richtung Äquator, sodass irgendwann das südliche Fence-Segment  $\mathcal{F}_{-r}^3$  geschnitten wird. Der Teil-Loop fällt dann in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow g_-^1$ , die weiterhin um  $-\mathbf{a}_1$  (unten links) transportiert, allerdings mittels eines Ratschensprungs. Beim Durchlaufen des Bereichs  $30^\circ \leq \phi < 40^\circ$  fällt der Loop anfangs ebenfalls in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow g_-^1$ ; spä-



**Abbildung 4.4:** *Brillen-Loop*, der als Vorbereitung für den *Brezel-Loop* zur Entleerung des Bereichs  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  von Partikeln genutzt wird. Die roten Zahlen geben an, in welcher Reihenfolge die Eckpunkte des Loops abgelaufen werden. Der Teil-Loop 1–5 fällt für  $C_6$ -artige Muster im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^2 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^1$ , für  $S_6$ -artige Muster in die Klasse  $\downarrow g_-^2 \uparrow g_-^1$ . Der Teil-Loop 6–10 fällt für die  $C_6$ -artigen Muster in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-l}^1 \uparrow \mathcal{F}_{-r}^3$ , für die  $S_6$ -artigen Muster in die Klasse  $\downarrow g_-^1 \uparrow g_-^3$ . Insgesamt transportiert der Brillen-Loop im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 30^\circ$  um  $(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) + \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_2$ . Im Bereich  $30^\circ < \phi \leq 60^\circ$  wird kein Fence-Segment oder Gate geschnitten und es kommt zu keinem Transport. Die Fence-Punkte des  $C_2$ -Musters (nicht eingezeichnet) liegen ebenfalls außerhalb des Loops. Daher verursacht der Brillen-Loop auch auf dem  $C_2$ -Muster keinen Transport.



**Abbildung 4.5:** *Brezel-Loop*, der zum Sammeln der Kugeln auf einer vertikalen Linie nahe  $\phi = 30^\circ$  genutzt wird. Die roten Zahlen geben an, in welcher Reihenfolge die Eckpunkte des Loops abgelaufen werden. Der Teil-Loop 9–1 schneidet für  $C_6$ -artige Muster keine Gates oder Fence-Segmente und fällt für  $S_6$ -artige Muster in die Klasse  $\downarrow g_-^3 \uparrow g_-^3$ , bewirkt also im gesamten betrachteten Bereich der Metamorphose keinen Transport. Der Teil-Loop 1–5 fällt im Bereich  $0^\circ \leq \phi \leq 30^\circ$  für  $C_6$ -artige Muster in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow \mathcal{F}_{-l}^1$ , für  $S_6$ -artige Muster zunächst in die Klasse  $\downarrow g_-^3 \uparrow g_-^1$  und dann in  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow g_-^1$ . In allen drei Fällen erfolgt Transport um  $-\mathbf{a}_1$ . Im Bereich  $30^\circ \leq \phi \leq 60^\circ$  fällt der Loop anfangs ebenfalls in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow g_-^1$ , schneidet später aber keine Gates oder Fence-Segmente mehr, bewirkt also keinen Transport. Die Situation für den Teil-Loop 5–9 ist sehr ähnlich, wenn das Intervall  $0^\circ \leq \phi \leq 120^\circ$  von  $120^\circ$  nach  $0^\circ$  durchlaufen wird. Im  $C_6$ -artigen Fall werden dann aber die Fences in die umgekehrte Richtung überquert und im  $S_6$ -artigen Fall wird  $g_-^3$  statt  $g_-^1$  durchlaufen. Der Teil-Loop 5–9 transportiert daher im Bereich  $0^\circ \leq \phi \leq 30^\circ$  überhaupt nicht. Für  $S_6$ -artige Muster im Bereich  $30^\circ \leq \phi \leq 60^\circ$  gilt dies zunächst auch, später transportiert der Loop allerdings um  $\mathbf{a}_1$ . Dies ist dann auch für  $C_6$ -artige Muster der Fall.

ter wandern jedoch die nördlichen Fence-Segmente vollständig aus dem Teil-Loop heraus und es kommt zu keinem Transport mehr. Dies ist dann auch für  $40^\circ < \phi \leq 60^\circ$  der Fall.

Wird das Intervall  $0^\circ \leq \phi \leq 120^\circ$  von  $120^\circ$  nach  $0^\circ$  durchlaufen, ist die Situation für den Teil-Loop 5–9 sehr ähnlich zu derjenigen beim Teil-Loop 1–5 beim Durchlauf der Phase von  $0^\circ$  nach  $120^\circ$ . Die einzigen Unterschiede sind, dass im  $C_6$ -artigen Fall die Fences in die umgekehrte Richtung überquert werden und im  $S_6$ -artigen Fall das Gate  $g_-^3$  statt  $g_-^1$  durchlaufen wird. Das bedeutet, dass der Teil-Loop 5–9 im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  adiabatisch um  $\mathbf{a}_1$  (oben rechts) transportiert und im Bereich  $40^\circ < \phi \leq 60^\circ$  überhaupt nicht. An den Rändern des Intervalls  $20^\circ < \phi < 40^\circ$  passiert zunächst dasselbe wie im jeweils außen angrenzenden Bereich, wohingegen der Teil-Loop im mittleren Abschnitt des Intervalls in die Klasse  $\downarrow \mathcal{F}_{-r}^3 \uparrow g_-^3$  fällt und einen Ratschensprung verursacht, der keine Partikel transportiert.

Zusammengefasst bewegen sich die Partikel also im Bereich  $0^\circ \leq \phi < 20^\circ$  nach unten links und im Bereich  $20^\circ < \phi \leq 60^\circ$  nach oben rechts. Dazwischen befindet sich wieder eine Konvergenzzone, in der sich die Partikel sammeln.<sup>5</sup> Eine Aufnahme des Experiments ist im Video `Video04_Brezel-Loop_Experiment.avi` zu sehen. Da die Bewegungsrichtungen links und rechts der Konvergenzzone im Gegensatz zum Ketten-Loop genau entgegengesetzt sind (also *nicht* dieselbe  $y$ -Komponente haben), ist keine effektive Bewegung der Kugeln in der Konvergenzzone zu beobachten. Auch hier entstehen aber Bipeds in der Konvergenzzone, die sich abhängig von der Länge unterschiedlich verhalten: Bipeds der Länge  $b_2$  bleiben wie einzelne Kugeln in der Konvergenzzone, während Bipeds der Länge  $b_3$  sie nach unten rechts verlassen.

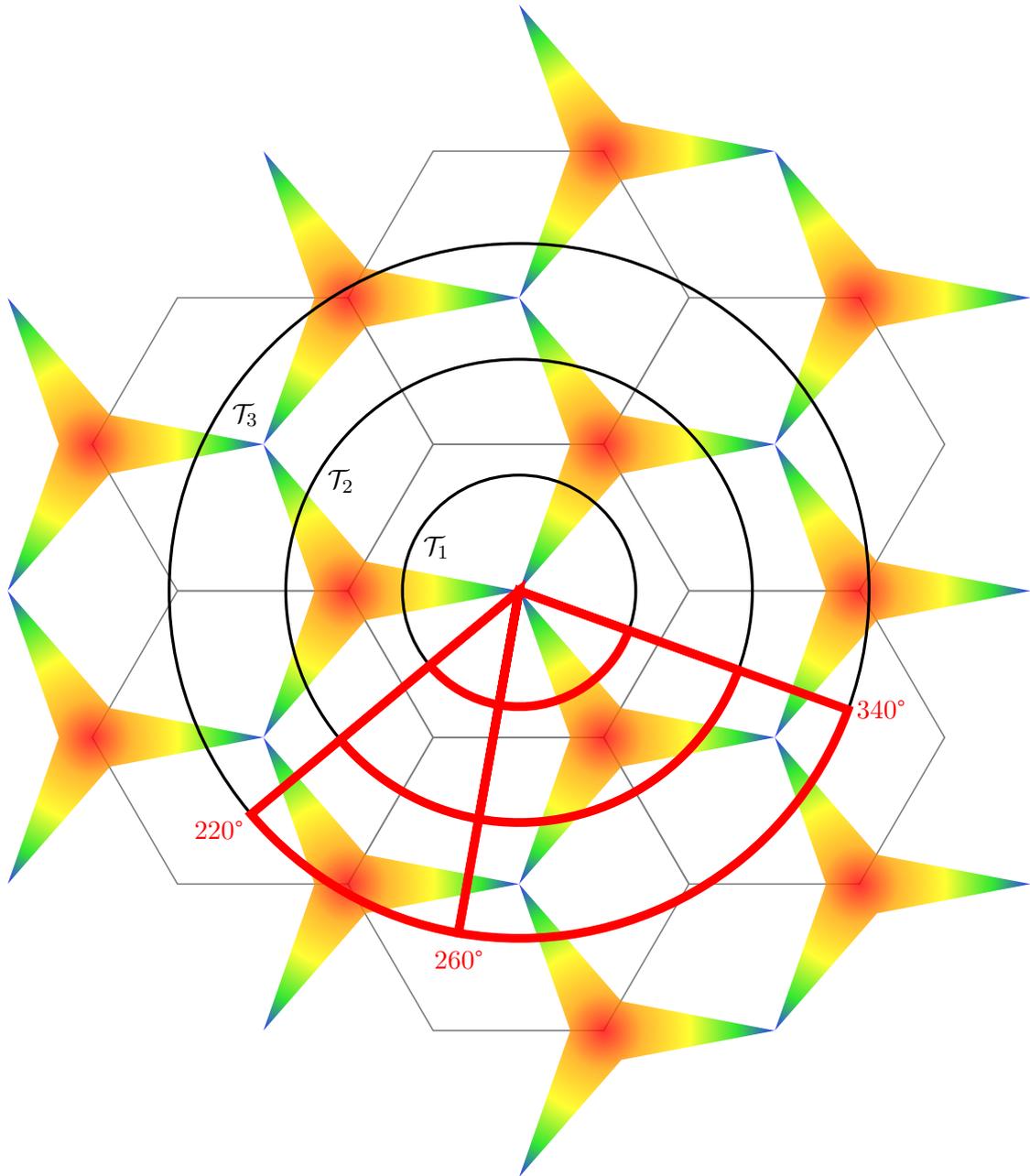
### 4.3.3 Brezel-Loop: Längenkontrolle von Bipeds

Um dies zu erklären, betrachten wir anhand von Abbildung 4.6 den Brezel-Loop im Transcription Space. Die Darstellung ist analog zu Abbildung 4.3 auf S. 29; wieder wird nur der Fall des  $S_6$ -Musters diskutiert. Die Bewegungsrichtung lässt sich mit analogen Argumenten wie beim Ketten-Loop herleiten. Während der Loop in  $\mathcal{T}_1$  – wie in Abbildung 4.5 erkennbar – durch den Fence läuft, gibt es dafür in  $\mathcal{T}_2$  und  $\mathcal{T}_3$  keine eindeutigen Anzeichen.

In  $\mathcal{T}_2$  befinden sich zwei Satelliten zwischen  $\varphi = 260^\circ$  und  $\varphi = 340^\circ$ . Unter der Annahme, dass nur adiabatischer Transport erfolgt, wird einer der beiden vom Teil-Loop 1–5 gegen den Uhrzeigersinn umrundet, was einen Transport um  $-\mathbf{a}_2$  (unten) bewirkt; der Teil-Loop 5–9 umrundet den anderen Satelliten im Uhrzeigersinn und bewirkt Transport um  $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$  (unten rechts). Da der Teil-Loop 9–1 keinen Satelliten umrundet, verursacht er keinen Transport. Unter den getroffenen Annahmen sollte der Brezel-Loop also Bipeds der Länge  $b_2$  um den Vektor  $\mathbf{a}_1 - 2\mathbf{a}_2$  (unten rechts) transportieren. Dies ist in der Simulation der Fall (vgl. `Video05_Brezel-Loop_Simulation_b2.avi`), nicht jedoch im Experiment. Im Video `Video04_Brezel-Loop_Experiment.avi` ist beispielsweise erkennbar, dass sich ein Biped der Länge  $b_2$  in der Konvergenzzone vertikal nach unten

---

<sup>5</sup>Da auch für  $\phi = 30^\circ$  Transport nach unten links erfolgt, befindet sich die Konvergenzzone im Gegensatz zum Ketten-Loop bei einem  $\phi > 30^\circ$ . Im Experiment ist dieser Unterschied jedoch nicht sichtbar.



**Abbildung 4.6:** *Brezel-Loop* im polydirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$ . Dargestellt ist eine Draufsicht auf  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  mit dem Fence für das  $S_6$ -Muster (Regenbogenfarben). Unterhalb des Fences wurden die Ränder der Wigner-Seitz-Zellen von  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  eingefügt (graue Linien), die dieselbe Form und Größe haben wie die von  $\mathcal{A}$ . Zu sehen sind außerdem die Schnitte der unidirektionalen *Transcription Spaces*  $\mathcal{T}_1$ ,  $\mathcal{T}_2$  und  $\mathcal{T}_3$  (schwarze Kreise) mit der Ebene  $\mathbf{b}_z = 0$  sowie die Projektion des Brezel-Loops in diese Ebene entlang der Längengrade der  $\mathcal{T}_n$  (rote Linien). An den Berührungspunkten der einzelnen Teil-Loops ist jeweils der Azimutwinkel  $\varphi$  angegeben. Eine genauere Beschreibung der Wirkungsweise des Loops ist im Text zu finden.

bewegt, bevor er sich mit einer einzelnen Kugel zu einem Biped der Länge  $b_3$  verbindet; andere Bipeds derselben Länge (im Video nicht zu sehen) waren nach Durchlauf des Loops hingegen wieder an ihrer ursprünglichen Position. Dies ist ein starkes Indiz dafür, dass der Transport hier nicht adiabatisch ist, da sonst beide Bipeds dieselbe Bewegung ausführen müssten. Eine Erklärung hierfür könnte sein, dass die beiden zwischen  $\varphi = 260^\circ$  und  $340^\circ$  liegenden Satelliten in  $\mathcal{T}_2$  bereits verbunden sind; dann laufen die Wege 1–4 und 8–9 des Brezel-Loops durch den Fence und können Ratschensprünge verursachen. Dafür spricht, dass diese Wege in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  relativ nahe am Fence vorbeilaufen (vgl. Abbildung 4.6). Der Teil-Loop 1–6 des Ketten-Loops umrundet zwar ebenfalls diese beiden Satelliten, läuft aber nur um sie herum und nicht zwischen ihnen hindurch. Somit hängt in seinem Fall die Bewegungsrichtung nicht davon ab, ob die Satelliten verbunden sind oder nicht.

Auch in  $\mathcal{T}_3$  befinden sich zwei Satelliten zwischen  $\varphi = 260^\circ$  und  $\varphi = 340^\circ$ . Der Teil-Loop 1–5 umrundet einen dieser Satelliten gegen den Uhrzeigersinn und verursacht Transport um den Vektor  $-\mathbf{a}_1$ , der Teil-Loop 5–9 umrundet den anderen Satelliten im Uhrzeigersinn und verursacht Transport um  $\mathbf{a}_1$ ; die beiden Teil-Loops bewirken also keine effektive Fortbewegung des Bipeds. Im Gegensatz zu vorher umwindet aber nun auch der Teil-Loop 9–1 einen Satelliten. Der Umlauf erfolgt im Uhrzeigersinn, was einen Transport um den Vektor  $\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$  (unten rechts) bewirkt. Dies erklärt, warum Bipeds der Länge  $b_3$  die Konvergenzzone wieder verlassen. Genau dieses Verhalten zeigt sich sowohl im Experiment (vgl. `Video04_Brezel-Loop_Experiment.avi`) als auch in der Computersimulation (vgl. `Video06_Brezel-Loop_Simulation_b3.avi`). Demnach stimmen hier die Resultate aus Theorie, Experiment und Computersimulation überein.

Da sich im Bereich rechts der Konvergenzzone kaum mehr Partikel befinden, wachsen die Bipeds nicht weiter, sobald sie die gewünschte Länge erreicht haben. Da sie sich zudem mit derselben Geschwindigkeit in dieselbe Richtung bewegen, kollidieren sie auch nicht miteinander. Dies legt die Vermutung nahe, dass die Längenkontrolle mit dem Brezel-Loop zuverlässiger funktioniert als mit dem Ketten-Loop. Allerdings wurden bisher in noch keinem Versuch mehr als drei der gewünschten Bipeds innerhalb des sichtbaren Bereichs hergestellt; die meisten Kugeln verharren einzeln in der Konvergenzzone und treffen dort nicht auf andere. Um die Robustheit des Verfahrens zu prüfen, ist jedoch eine höhere Produktionsrate erforderlich. Hier sind also weitere Versuche notwendig, möglicherweise wie beim Ketten-Loop mit unterschiedlichen Konzentrationen der verwendeten Suspension.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Versuche zum topologischen Transport von paramagnetischen Kolloiden auf einer Metamorphose durchgeführt. Bei den Kolloiden handelt es sich um Kugeln, die sich bei Annäherung im externen Magnetfeld zu Bipeds zusammenschließen, deren Länge durch die Anzahl der beteiligten Kugeln gegeben ist. Die Reaktion der Kolloide auf das externe Magnetfeld hängt sowohl von der Länge der Bipeds als auch von der Symmetrie und der Phase des Patterns ab.

Während die Metamorphose durchgängig dreizählige Symmetrie aufweist, ist die Phase ortsabhängig: Beim verwendeten Pattern ändert sie sich linear in  $x$ -Richtung. Aus diesem Grund hängt die Reaktion der Kolloide auf das externe Magnetfeld von ihrer Position in  $x$ -Richtung ab. Diese Tatsache wurde dazu genutzt, anfangs beliebig auf dem Pattern verteilte Kugeln in einem bestimmten Bereich, der Konvergenzzone, zu sammeln. Da sich dort viele Kugeln auf kleinem Raum befinden, entstehen viele Bipeds. Diese werden im Verlauf der Zeit länger, da sich ständig mehr Kugeln in der Konvergenzzone einfinden. Hier wurde die Abhängigkeit des Verhaltens der Bipeds von ihrer Länge genutzt, um Bipeds der Länge  $b_3$  von solchen der Länge  $b_2$  und einzelnen Kugeln zu trennen. Dies wurde auf zwei verschiedene Arten realisiert: einerseits mit dem Ketten-Loop, andererseits mit dem Brezel-Loop.

Der Ketten-Loop transportiert Kugeln von beiden Seiten zur Konvergenzzone, wobei die  $y$ -Komponente beider Bewegungsrichtungen dieselbe ist. Dies hat zur Folge, dass sich die Kugeln in der Konvergenzzone im Zickzack nach oben bewegen, da sie sich abwechselnd links und rechts der Linie mit  $\phi = 30^\circ$  befinden. Dasselbe gilt auch für Bipeds, wobei sich Bipeds der Länge  $b_3$  schneller bewegen als solche der Längen  $b_2$  und als einzelne Kugeln. Dieses Verhalten lässt sich mit einem vereinfachten Modell des Fences  $\mathcal{F}_-$  im polydirektionalen Transcription Space  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  verstehen. Dieses erklärt die Bewegung von einzelnen Kugeln und Bipeds der Länge  $b_2$ , sagt aber für Bipeds der Länge  $b_3$  eine noch höhere Geschwindigkeit voraus als beobachtet. Hier wäre es sinnvoll, den Loop und den Fence in den  $\mathcal{T}_n$  exakt darzustellen.

Die Bipeds werden vom Ketten-Loop anhand ihrer Geschwindigkeiten separiert. Da die Bipeds jedoch anfangs nicht räumlich getrennt sind, ist unklar, welche Ausbeute der gewünschten Bipeds erreichbar ist. Hier sind weitere Versuche notwendig, bei denen beispielsweise die Konzentration der verwendeten Suspension variiert wird. Außerdem könnte der Loop angepasst werden, um den Bereich, aus dem Kugeln in die Konvergenzzone wandern, weiter in  $x$ -Richtung zu beschränken. Dies führt automatisch zu einer Verkleinerung des Bereichs, in dem Kugeln auf die Konvergenzzone treffen.

Der Brezel-Loop unterscheidet sich einerseits dadurch vom Ketten-Loop, dass die  $y$ -Komponenten der Bewegungsrichtungen beiderseits der Konvergenzzone entgegengesetzt sind. Daher bewegen sich die Kugeln in der Konvergenzzone effektiv nicht mehr fort, son-

dern jede Auslenkung in eine Richtung führt zu einer Bewegung in die genau entgegengesetzte Richtung; die Kugeln befinden sich in einem stabilen Gleichgewicht. Bei Bipeds der Länge  $b_2$  wurde in der Konvergenzzone unterschiedliches Verhalten beobachtet: Manche bewegen sich nicht, andere nach unten fort. Hier treten vermutlich Ratschensprünge auf. Im Gegensatz dazu verlassen Bipeds die Konvergenzzone nach unten rechts, sobald sie die Länge  $b_3$  erreicht haben. Dieses Verhalten ist auch in der Computersimulation zu beobachten und lässt sich mit dem einfachen Modell des Fences in  $\mathcal{T}_{\text{poly}}$  verstehen. Auch hier wäre aber die genaue Kenntnis des Fences in  $\mathcal{T}_2$  und  $\mathcal{T}_3$  wünschenswert, um eine fundierte Erklärung für die beobachteten Bewegungen aller Bipeds zu liefern.

Wird der Bereich rechts der Konvergenzzone zuvor mittels des Brillen-Loops weitgehend von Partikeln geleert, wachsen die Bipeds dort nicht weiter. Da sie sich mit derselben Geschwindigkeit in dieselbe Richtung bewegen, kollidieren sie auch nicht miteinander, sodass mit dem Brezel-Loop zuverlässig Bipeds der Länge  $b_3$  hergestellt werden können. Für die Zukunft ist es wünschenswert, die Produktionsrate der Bipeds zu erhöhen, z. B. ebenfalls durch Verwendung von Suspensionen anderer Konzentration. Auf diese Weise könnte die Robustheit des Verfahrens besser überprüft werden.

Gleichzeitig ist es vorstellbar, nach demselben Prinzip wie beim Brezel-Loop Bipeds anderer Längen  $b_n$  herzustellen. Dazu müssen die Kugeln wieder zunächst in einer Konvergenzzone gesammelt werden; der Loop muss dann so gestaltet sein, dass Bipeds mit kleinerer Länge als  $b_n$  in der Konvergenzzone bleiben, solche mit Länge  $b_n$  sie hingegen verlassen. Da dafür nur die vom Loop umrundeten Satelliten entscheidend sind, nicht aber seine genaue Form, ist dies vermutlich möglich, solange die Satelliten aus verschiedenen  $\mathcal{T}_n$  weit genug auseinander liegen, wenn sie in  $\mathcal{C}$  projiziert werden. Zusammenfassend bieten die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente einige Anknüpfungspunkte für weitere Versuche.

## 6 Literatur

- [1] A. Ashkin und J. M. Dziedzic. „Optical Trapping and Manipulation of Viruses and Bacteria“. In: *Science* 235.4795 (20. März 1987), S. 1517–1520. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: 10.1126/science.3547653. URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.3547653> (besucht am 19.06.2022).
- [2] Victor Gold, Hrsg. *The IUPAC Compendium of Chemical Terminology: The Gold Book*. 4. Aufl. Research Triangle Park, NC: International Union of Pure und Applied Chemistry (IUPAC), 2019. DOI: 10.1351/goldbook. URL: <https://goldbook.iupac.org/> (besucht am 19.06.2022).
- [3] Daniel de las Heras. „Noch zu veröffentlichen“. In: (2022).
- [4] Johannes Loehr u. a. „Lattice symmetries and the topologically protected transport of colloidal particles“. In: *Soft Matter* 13.29 (2017), S. 5044–5075. ISSN: 1744-683X, 1744-6848. DOI: 10.1039/C7SM00983F. URL: <http://xlink.rsc.org/?DOI=C7SM00983F> (besucht am 31.05.2022).
- [5] Mahla Mirzaee-Kakhki u. a. „Gauge invariant and gauge dependent aspects of topological walking colloidal bipeds“. In: *Soft Matter* 17.6 (2021), S. 1663–1674. ISSN: 1744-683X, 1744-6848. DOI: 10.1039/D0SM01670E. URL: <http://xlink.rsc.org/?DOI=D0SM01670E> (besucht am 11.06.2022).
- [6] Mahla Mirzaee-Kakhki u. a. „Simultaneous polydirectional transport of colloidal bipeds“. In: *Nature Communications* 11.1 (Dez. 2020), S. 4670. ISSN: 2041-1723. DOI: 10.1038/s41467-020-18467-9. URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-020-18467-9> (besucht am 31.05.2022).
- [7] Charles E. Mortimer, Ulrich Müller und Johannes Beck. *Chemie: Das Basiswissen der Chemie*. 12., korrigierte und aktualisierte Auflage. Stuttgart New York: Georg Thieme Verlag, 2015. 709 S. ISBN: 978-3-13-484312-5.
- [8] Liesbeth C. Venema u. a. „Length control of individual carbon nanotubes by nanostructuring with a scanning tunneling microscope“. In: *Applied Physics Letters* 71.18 (3. Nov. 1997), S. 2629–2631. ISSN: 0003-6951, 1077-3118. DOI: 10.1063/1.120161. URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.120161> (besucht am 19.06.2022).

# Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Die Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Arbeiten übernommen wurden, sind durch Angaben der Herkunft kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher nirgends in gleicher oder ähnlicher Form zur Erlangung eines akademischen Grades eingereicht.

Ort, Datum

Unterschrift