

# Kolloidssysteme: Theorie und Simulation:

Klapp 6 physik. UV-berlin.de

EW 707

Sprechstunde: Di 12-13h

VL: Do 10.15 - 11.45 } EW 203  
Fr. 10.15 - 11.45 }

UE: Do 12-14h EW 229 (ab 18.4.13)

Inhalt der Übungen:

• Bearbeiten + Diskutieren von ~~11~~  
Übungszetteln  
(2/3 des Semesters)

• Bearbeiten + Vorstellen eines Projekts  
(1/3 des Semesters)

Vorstellung möglicher Projekte und  
Einkauf: 30.05.13

gesamtes  
Modul Kolloidsysteme: (12 ECTS)

Zusätzl. 2-stündige Veranstaltung  
aus dem Bereich der Statist.-Physik

- Seminar "Statist. Physik (2 SWS  
(Mo 14-16) "Komplexer Fluide"
- VL "Dynamik Komplexer Fluide"  
(Dr. Sebastian Heidenreich)  
(Mo 10-12)

## I. Einführung

Was sind Kolloide?

- Was "Kolloid" kommt aus dem Griechischen (Aet-)

• ist Zusammengesetztes

$K \approx 10^3$   $\hat{=} \text{Leim}$

$\epsilon \approx 10^5$   $\hat{=} \text{Form}$

⇒ System aus Teilchen oder Tröpfchen, die  
in einem anderen Medium fein verteilt sind

d.h.  
⇒ Vielteilchensysteme aus versch. Materialien

heute meist flüssiges Medium

⇒ man spricht von einer  
"Kolloidsuspension"

Speziell für Kolloidsysteme:

Mindestens eine vorherrschende Längenskala  
ist mesoskopisch

⇔ Die einzelnen Kolloidteilchen haben  
Durchmesser zw. 1 nm und 10  $\mu\text{m}$

Kolloide liegen zwischen atomaren (molekulare) Kristallen  
 (1 Angstrom ( $10^{-10}$  m)) und makroskop.  
 Körper  
 Kristalle      Kolloide      makroskop. Körper

## Beispiele

### • Aus dem Alltag

- Tinten, Farben (Lösungsmittel Wasser, Öl)
- Milch (Fetttröpfchen in Wasser)
- Waschmittel, Kosmetik, etc..

Kolloidale typischerweise  
 große Polymere, Aggregate  
 ( Mizellen )

⇒ Schnittstelle Chemie

- Beispiele aus der Biologie:

- ▶ Blut: Suspension roter Blutkörperchen

- Suspension aus sich bewegenden Bakterien "molekulare Motoren" (aktive Kolloide)

→ Schnittstelle zur  
Biologischen Physik

- Materialwissenschaft

heutzutage kann man Kolloidsysteme aus  
wohldefinierten festen Teilchen herstellen

z.B. ~~geladene~~ geladene (Silica-) Kugeln  
oder ferromagnet. Teilchen  
→ Ferrokugeln

sehr kontrolliert herstellbar!

(sehr scharfe Größenverteilung)

Weitere Beispiele

- Suspensionen aus Kohlenstoffnanoröhren,  
Gold-Stäube, Kolloidale Quantenpunkte

→ Schnittstelle zur  
Festkörperphysik

Um solche Materiedien / Systeme verstehen /  
weiterentwickeln  
zu können, brauchen wir detailliertes  
Verständnis des Vielteilchenverhaltens (statisch  
und dynamisch) → hier kommt die Statist.  
Physik ins Spiel!

## Kolloidsysteme aus Sicht der Statist. Physik

- Kolloide sind deutlich größer als Atome /  
Moleküle

→ man kann meist klassische Methoden  
(klass.) verwenden, quantenmechan. Eigenschaften zunächst  
ernstlich ausblenden

⇒ Relativ einfache experimentelle Method:

z.B. Lichtstreuung

Konfokale Mikroskopie → Verfolgung einzelner Trajektorien

- Kolloide sind aufgrund ihrer Größe auch viel langsamer als Atome / Moleküle

typ. Relaxationszeit sind  $\mu\text{s}$  - Skala

- Die Wechselwirkungen zw. Kolloidpartikeln lassen sich heutzutage "maßgeschneidert" einstellen

(z.B. Auswahl der Teilchensorte  
(z.B. geladen / magnetischer Polarisierbar)

experimenteller Einfluss (möglichst) | Auswahl der Temp.,  
Behandlung der Oberflächen,  
Eigenschaften des Lösungsmittels)

→ mikrostop. Hamiltonian  
(Wechselwirkungspotential)  
klar definiert!

→ In den letzten Jahren haben sich Vollzeitsysteme  
als Modellsysteme der Physik der kondensierten  
Materie etabliert

→ Vorhersage über Gleichgewichts- und  
Nichtgleichgewichtsphänomene

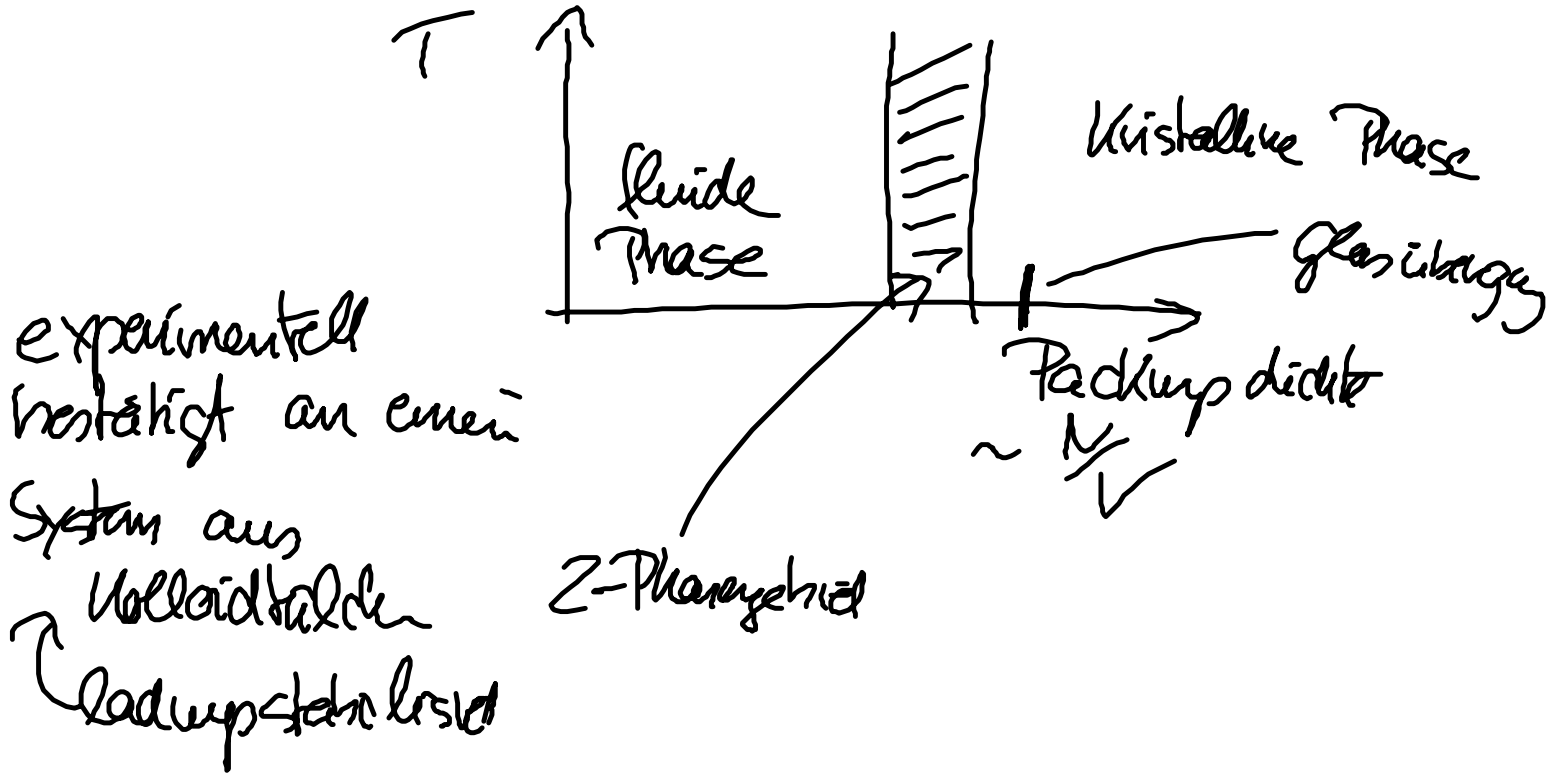
häufig quantitativer Vergleich möglich  
zw. Theorie, Computersimulation, Experiment!

### Beispiele

- Tusey, von Meegen (Nature, 1986)

Kristallisation und Glasübergang von  
Kugelförmigen Teilchen in 3 Dimensionen





- ~~Kristallisation~~ / Schmelzen in 2 Dimensionen

Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Yang Theorie  
 (1976-79)

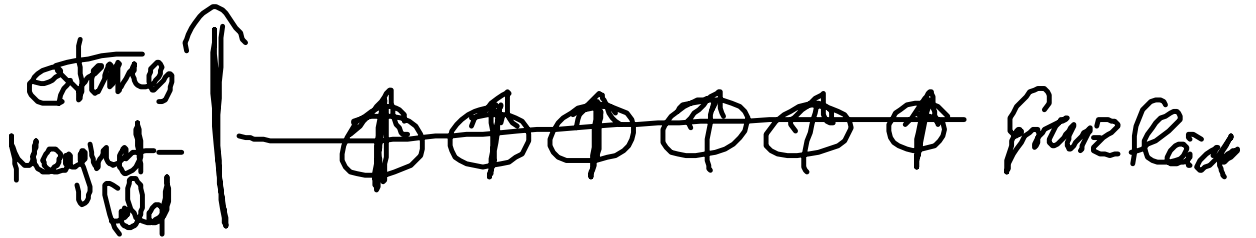
→ zw. fluide Phase und quasi-kristalliner Phase existiert "hexatische Phase"  
 charakterisiert durch  
 → Defektstrukturen und algebraisches Verhalten von Korrelationsfunktion

Erstmal experimentell bestätigt 1999

U. Zehner, G. Maret (Karlsruhe)

Phys. Rev. Lett (1999-2004)

am Beispiel magnet. Kolloide in 2D



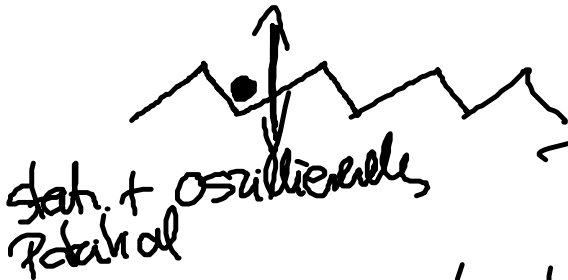
• Transportphänomene

• Diffusion durch Kanalschlüsse

1D →

P. Hänggi, F. Marchesoni

Rev. Mod. Phys. (2009)



sah. + oszillierendes Potential

Phänomene der fremdsprachigen Sprache...

⇒ beobachtbar an Kolloidsystemen (Potentiale aus Laserfeldern)

• Nichtgleichgewichtphänomene

• Theorie: Jarzynski-Relation

$$e^{-\frac{\Delta F}{k_B T}} = e^{-\frac{W}{k_B T}}$$

$\Delta F$ : Differenz der freien Enthalpien zweier Gleichgewichtszustände,

die durch Nichtgleichgewichtsprozesse  
verbunden sind:

W: dabei am System  
verrichtete Arbeit

..... Mittelwert über  
Nichtgleichgewichtszustand

durch Kolloide besticht!

Sano et al. Nature Physics (2010)

Seifert et al. Phys. Rev. ~~Let~~ Lett. (2012)

aufßerdem.

Kolloide als ~~Baus~~ Bausteine neuer Mechaniken ...

Frage: Wie behandeln wir solche Systeme aus  
der Sicht der Theorie?

## II. Konstruktion geeigneter Hamiltonians

~~II~~  
Herausintegrieren irrelevanter Freiheitsgrade  
(Teilchen des "Bades" (Lösungsmittel),  
innere Freiheitsgrade der Kolloidteilchen,...)

→ Coarse-graining

## III. Klassische Dichtefunktionaltheorie

→ Berechnung der Einpartikeldichte  
und Korrelationsfunktion auf  
Basis des mikroskop. Hamiltonians  
⇒ Struktur, Phasenübergänge

## IV. Fokker-Planck-Gleichungen (Smoluchowski-Gleichung)

⇒ dynamische Dichtefunktionaltheorie  
⇒ Relaxationsphänomene, Transportprozesse, Wachstum

## V. Vielteilchen-Computer-Simulationen

~~IV~~ Mark-Cardo, Brownian Dynamics, Kinetik  
Mark-Cardo