

Kolloidsysteme: Theorie und Simulation

Klapp G physik. tu-berlin.de
Sprechstunde: Di 12¹⁵

VL: $\left\{ \begin{array}{ll} \text{Di} & 10^{15} \\ \text{Do} & 14^{15} \end{array} \right.$ EW 202

UE Do 12¹⁵ - 13⁴⁵ (Alexander Kraft) EW 733 $\left| \begin{array}{l} \text{erste Termin} \\ 23.10. \end{array} \right.$

Ablauf der Übung

1. Hälfte des Semesters

"normale" Übungsblätter
Abgabe in 2er Gruppen
in der Di-VL

2. Hälfte des Semesters

Bearbeitung von Projekten
Vorstellung der mögl. Projekte
erfolgt ca. Semestermitte
Am Ende des Semesters Vorstellung der Projekte in der

möglich: Ausbau der Voraussetz.
Zum Wahlpflichtfach,
indem Sie

- Seminar "Statistische Physik
Komplexe Fluide"
- andere VL im Wahlpflichtbereich
(z.B. Statistische Physik
(Tobias Brandes)
oder andere VL nach Absprache)

I. Einführung

Was sind Kolloide?

Kolloid: Wort kommt aus dem Griechische

κβ'λλκ ≙ Leim

ε'τδσβ ≙ Form, Aussehen

⇒ System, in dem Teilchen oder Tröpfchen in einem anderen Medium verteilt sind

↳ meist Flüssigkeit

("Lösungsmittel", Solvent)

⇒ Kolloidsuspension

Mindestens eine der dabei vorkommende Längenskalen

ist mesoskopisch

d.h. die einzelnen Kolloidteilchen
haben typischerweise Durchmesser

$\sim 1 \mu\text{m}$

(es gibt aber auch schon
Teilchen der Größe $\sim 10 \text{ nm}$)

\Rightarrow in ~~den~~ vielen Fällen spielen ^{für die} Strukturierung
von Kolloidsystemen Quanteneffekte keine
Rolle!

Beispiele

• Aus dem Alltag

- Milch (Fetttröpfchen in Wasser)

- Tinten, Farben (Lösungsmittel Wasser, Öl)

- Kosmetik, Waschmittel

(Kolloidteilchen bestehen meist aus
Polymeren, Polymeraggregaten (Mizellen)

\Rightarrow Schnittstelle zur Chemie!

• Blut (Suspension roter
Blutkörperchen)

• Suspension aus Bakterien — mit Selbsttrieb
„aktive Kolloide“

Schnittstelle zu ~~Physik~~ Biologie

• Bezug zu Materialwissenschaften

~~ein~~ typischerweise Suspension aus festen
Teilchen

Suspension aus
— ferromagnetischen Kugeln

→ Ferrofluide

- Suspension aus
Kohlenstoffnanoröhre

- " aus Kolloiden
Quantenpunkt

} Schnittstelle
zur Festkörperphysik

hier häufig
Quantenphänomene
relevant

Um solche Materialien verstehen zu können, brauchen
wir detailliertes Verständnis des Vielteilchenverhaltens

→ hier kommt die statist. Physik
ins Spiel!

(oder allg.: ^{Theor.} Physik der kondensierten
Materie)

Kolloidsysteme aus Sicht der statistischen
Physik (warum ist das spannende Thema?)

• Kolloide sind 10^3 - 10^6 mal größer als Atome oder kleine Moleküle

→ man kann sich experimentell deutlich einfacher untersuchen

z.B. Konfokale Mikroskopie
Lichtstreuung

→ direkte Beobachtung der
Strukturen

→ theoretisch berechnete Größen
können häufig unmittelbar
experimentell überprüft werden!

• Aufgrund ihrer Größe sind Kolloide
auch viel langsamer als Atome/
Moleküle

⇒ auch dynamische Prozesse
können einfacher untersucht werden

- In vielen Fällen lassen sich Wechselwirkungen zwischen den Kolloiden ^{experimentell} "maßstabtreuer" einstellen (durch Typus der Teilchen, Behandlung der Oberfläche, Eigenschaften des Lösungsmittels...)

⇒ "mikroskopischer" Hamiltonian
(Teilchenebene)

Kann definiert!

enthält z.B. Coulomb-WW, van-der-Waals-
Wechselwirkung,

magnetische WW

...

⇒ In den letzten Jahren haben sich Kolloidsysteme als Modellsysteme etabliert, um Vorhersagen dar-
→

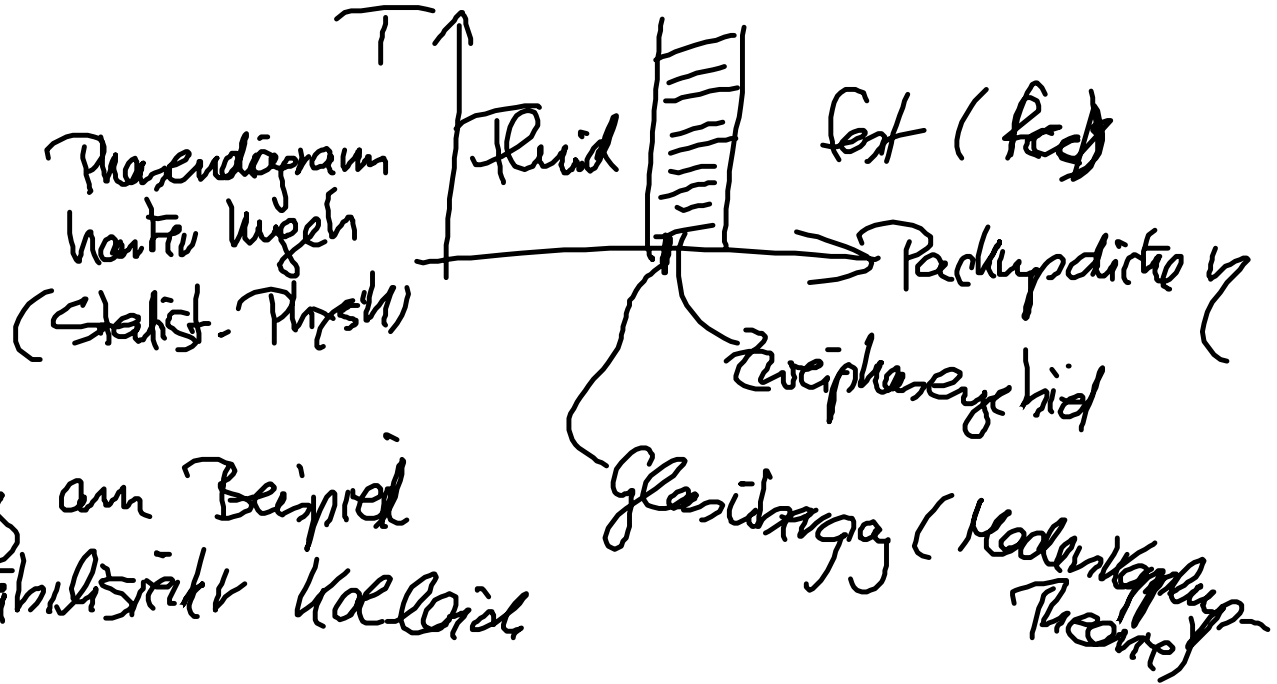
Physik der kondensierten Materie

im Gleichgewicht und Nichtgleichgewicht
zu überprüfen / verstehen

häufig ist quantitative Vergleich zw.
Theorie, Computersimulation und
Experiment möglich!

Beispiele

- Kristallisation und der
Glasübergang von ^{Teilchen} _{halten} in 3D



Pusey, van Meegen

Nature (1986)

- Einfrieren und Schmelzen in 2D (Zufrierprozess)
 - Existenz hexatischer Phasen

quasi-longrange order

$$\langle \psi_6(\underline{r}) \psi_6(\underline{r}') \rangle \sim \frac{1}{|\underline{r} - \underline{r}'|}$$

Ordnungsparameter
Korrelationsfunktion

↑ algebraische
Metall

sogenannte

Kosterlitz-Thouless Halbleiter-

Nelson-Young-Theorie

1979

experimentell bestätigt anhand von
paramagnetische Kolloide in 2D

Zahn, Maret

Phys. Rev. Lett., 1999-2004

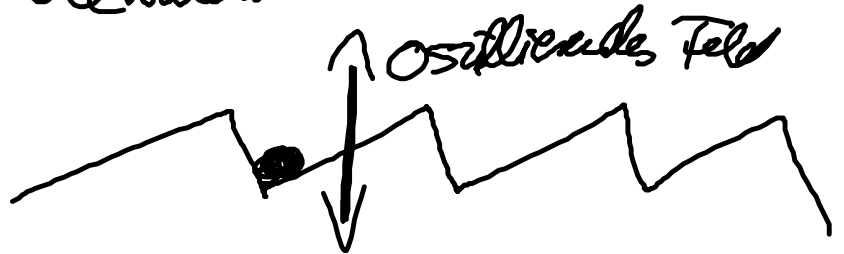
• Transportphänomene

- Diffusion durch Nanostrukturen

P. Hänggi, F. Marchesoni

- Thermische Ratsche

(wichtig für die Bewegung molekularer Motoren)



o Fluktuationstheoreme

(Jarzynski Relation)

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

Freie
Energie-
Differenz

Arbeit
Mittelung über
Möglichkeiten

exakte Relation für Systeme weg von Gleichgewicht

Aussage: Differenz zwischen den Freien Energie zweier Zustände, die nicht durch Gleichwichtsprozess verbunden sind

M. Sano et al.

Nature Physics (2010)

U. Seifert et al.

Phys. Rev. Lett. (2012)

Weitere neue Entwicklungen:

Kolloide als wesentlicher Baustein neuer
Materialien

- Kolloidale Gele
- Kolloide photonische Kristalle
- " Quanten Kristalle

Frage nun:

Behandlung wie sind wir bei
Kolloidsystemen im Rahmen der Theorie?

- man benötigt breite Palette von
Methoden der Statistischen Physik

In diese VL soll Einblick in diese
Methoden gegeben werden!

A) Statistische Mechanik des Gleichgewichts,
Berechnung von Zustenssummen

hier insbesondere:

⇒ Konstruktion einer geeigneten effektiven

Hamiltonians, in denen nur die relevanten
Freiheitsgrade vorkommen!

Konkret: „Herausintegrieren“ der
Freiheitsgrade des Lösungsmittels

„Coarse-Graining“

2) Klassische Dichte funktionaltheorie

→ die mikroskop-Theorie

Zur Beschreibung struktureller
Eigenschaften von Kolloidsystemen

Erweiterung der elektronischen DFT
auf Systeme bei $T > 0$
↑
Klassische

3) Folker-Planck-Gleichungen,
(Langevin)
dynamische Dichtefunktionaltheorie

→ Beschreibung von Relaxationsphänomenen,
Transport etc. (Nukleationsprozess)

4) Computersimulationen
des Vielteilchensystems

Monte-Carlo, Brownsche Dynamik