

Kolloidsysteme: Theorie und Simulation

Klapp 6 physik.tu-berlin.de
Sprechstunde: Di 12¹⁵

VL: $\left\{ \begin{array}{ll} \text{Di } 10^{15} & \text{EW } 22 \\ \text{Do } 14^{15} & \text{EW } 202 \end{array} \right.$

UE Do 12¹⁵ - 13⁴⁵ EW 733 | ^{erste Klausur} 23.10.
(Alexander Hoff)

Ablauf der Übung

1. Hälfte des Semesters

"manuelle" 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

möglichst: Ausbauen der Voranstalts
Zum Wahlpflichtfach,
indem Sie

— Seminar "Statistische Physik
Komplexe Fluide"

— andere VL im Wahlpflichtbereich
(z.B. Statistische Physik
(Lehrer, Brunsch)
oder andere VL nach Absprache)

I. Einführung

Was sind Kolloide?

Kolloid: Wort kommt aus dem Griechische

$\chi\beta' \lambda\alpha$ $\hat{=}$ Leim

$\epsilon\tau\delta\omicron\sigma$ $\hat{=}$ Fein, aussehen

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

└ meist Flüssigkeit

("Lösungsmittel", Solvent)

\Rightarrow Kolloidsuspension

Mindestens eine der dabei
vorherrschende 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 rote
Blutkörperchen)

• Suspension aus Bakterien — mit Selbsttrieb
„aktive Kolloide“

Schnittstelle zu ~~Physik~~ Biologie

• Bezug zu Materialwissenschaften

~~typischerweise~~ Suspension aus Eisen
Tatke

Suspension aus
— ferromagnetischen Kugeln

→ Ferrokolloide

- Suspension aus
Kohlenstoffnanoröhre

- " aus Kolloiden
Quantenpunkt

} Schnittstelle
zur Festkörperphysik

hier häufig
Quantenphänomene
relevant

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

→ hier kommt die statist. Physik
ins Spiel!

(oder allg.: ^{Thema} 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
Struktur

→ höchste erreichbare Größe
kann 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 ^{explizite} "maßgebend" einstellen (durch Typus der Partikel, Behandlung der Oberfläche, Eigenschaften des Lösungsmittels...)

→ "mikroskopischer" Hamiltonian
(Tatdanebene)

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 der

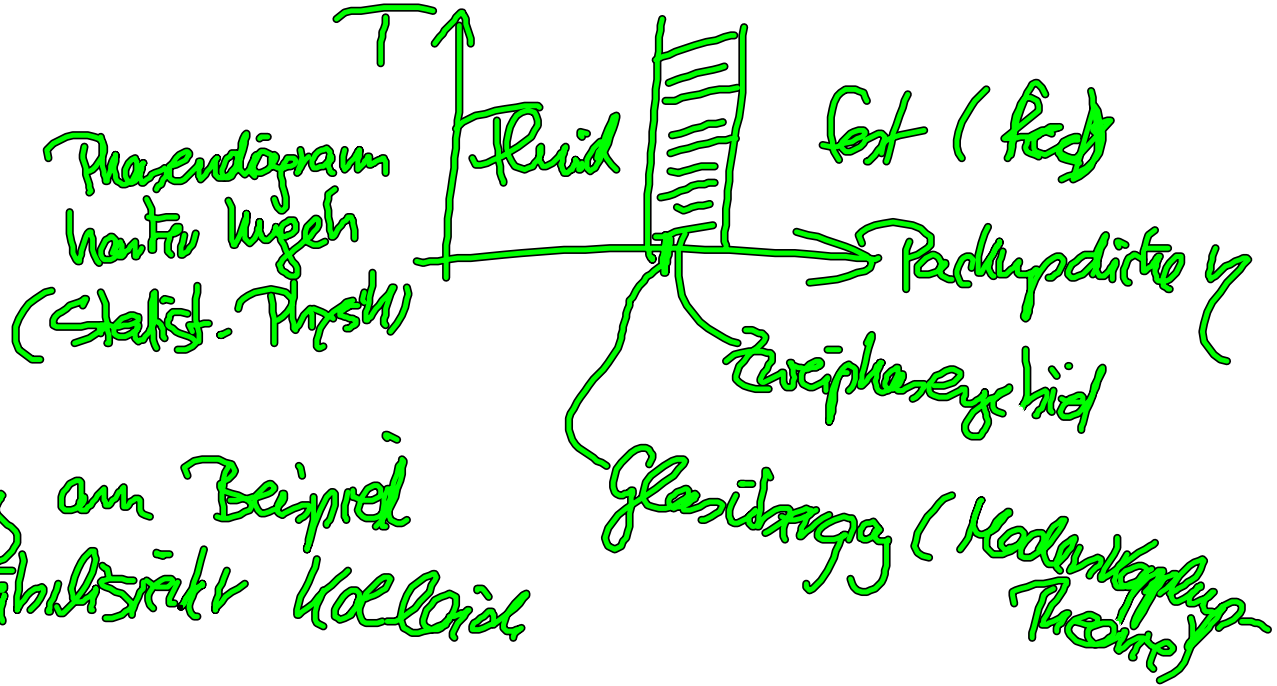
Physik der kondensierten Materie

im Gleichgewicht und Nichtgleichgewicht
zu überprüfbar / verstellbar

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

Beispiele

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



Bekanntung am Beispiel
 Ladungstabilität & Koalition

Pusey, van Meegen

Nature (1986)

- Einfrieren und Schmelzen in 2D (Zustände) → Existenz hexagonaler Phase

Quasi-Longrange Order

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

Ordnungsparameter
Korrelationsfunktion

↖ algebraische
Abfall

Sogenannt

Kosterlitz-Thouless Halbleiter

Nelson-Young-Theorie

1979

Experimentell bestätigt anhand von
paramagnetische Kolloide in 2D

Zahn, Maret

Phys. Rev. Lett. 1999-2004

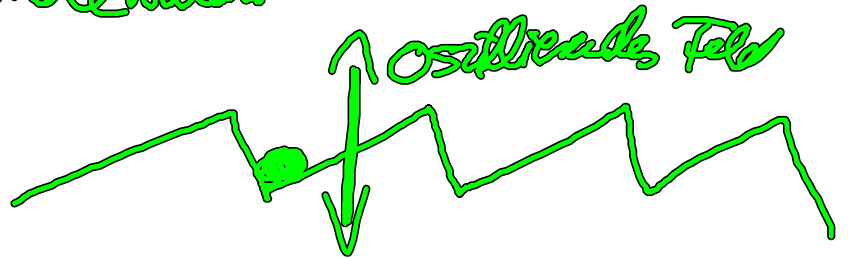
• Transportphänomene

- Diffusion durch Vortexstrukturen

P. Hänggi, F. Marchesoni

- Thermische Ratsche

(wichtig für die Bewegung
molekularer Motoren)



• Fluktuationstheoreme
(Jarzynski Relation)

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

Free Energy Difference

Arbeit
Hilfen um
Möglichkeit
gleich

exakte Relation für Systeme Weg von
Gleichgewicht

Aussage: Differenz zwischen dem 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
- Kolloidale photoniische Kristalle
- " " " Quarzkristalle

Frage nun:

Behandlung wie sind wir heute
Kolloidsysteme in 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,
Reduktion von Zuständen

bei insbesondere:

⇒ Konstruktion eines geeigneten effektiven

Hamiltonians, in denen nur die relevanten
Freiheitsgrade vorkommen!

Konkret: „Herausintegrieren“ der
Freiheitsgrade des Lösungsmittel

„Coarse-Graining“

2) Klassische Dichte funktionaltheorie

→ die mikroskopische Theorie

Zur Beschreibung struktureller
Eigenschaften von Kolloidsystemen

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

3) Folger-Pearce-Gleichungen, (Langevin) dynamische Dichtefunktionaltheorie

→ Beschreibung von Relaxationsphänomenen,
Transport etc. (Nukleationsprozess)

4) Computersimulationen des Vielteilchensystems

Monte-Carlo, Brauer Dynamik