

# Kolloidsysteme: Theorie und Simulation:

Modul 6 physik. UV-bachelor  
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 ~~Teil~~  
Übungszetteln  
(2/3 des Semesters)

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

Vorstellung möglicher Projekte und  
Einführung: 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) "Komplexe Fluide"
- VL "Dynamik Komplexer Fluide"  
(Dr. Sebastian Heidenreich)  
(Mo 10-12)

## I. Einführung

Was sind Kolloide?

- Wort "Kolloid" kommt aus dem Griechischen (AeL-)

• ist Zusammengesetztes

$$k_B' \lambda \lambda_2 \cong \text{Lam}$$

$$\varepsilon \approx \varepsilon_0 \cong \text{Fom}$$

→ 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 vorkommende Längenskala  
ist mesoskopisch

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

Kolloide liegen zwischen atomaren <sup>(molekulare)</sup>  $\text{Ca}^{2+}$  Ionen  
 (1 Angstrom ( $10^{-10}$  m)) und makroskop.  
 $\text{Ca}^{2+}$  Ionen  $\uparrow$  makroskop. Körper  
 Kolloide  
 1 nm - 10  $\mu\text{m}$   
 Atom / Molekül  
 10<sup>-10</sup> - 10<sup>-7</sup> s Zeit

## 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  
Bausteinen "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 funktionel. Teilchen  
→ Funktions

sehr kontrolliert herstellbar!

(sehr schmale Größenverteilung)

Weitere Beispiele

- Suspension aus Kolloidstoffnanopartikeln,  
Gold-Nanopartikel, Kolloidale Quantenpunkte

→ Schnittstelle zur  
Festkörperphysik

Um solche Materie / Systeme verstehen /  
untersuchen 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  
(Theoret.) verwenden, quantenmechan. Effekte zunächst  
vernachlässigen

→ Relativ einfache experimentelle Method:

z.B. Lichtstreuung

Konfokale Mikroskopie → Vertikale Einstellung  
Trageflächen

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

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

• Drei Wechselwirkungen zw. Kolloidpartikeln lassen sich heutzutage "maßgeschneidert" einstellen

(z.B. Auswahl der Teilchenart  
(z.B. geladen / magnetisch / polarisierbar)

erweitert  
Einfluss  
möglichkeite

Auswahl der Teilchen,  
Behandlung der Oberflächen,  
Eigenschaften des Lösungsmittels

→ mikroskop. Hamiltonian  
(Wechsel in Hypothese)  
klar definiert!

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

→ Vorhersage über Gleichgewichts- und  
Nichtgleichgewichtsphänomene

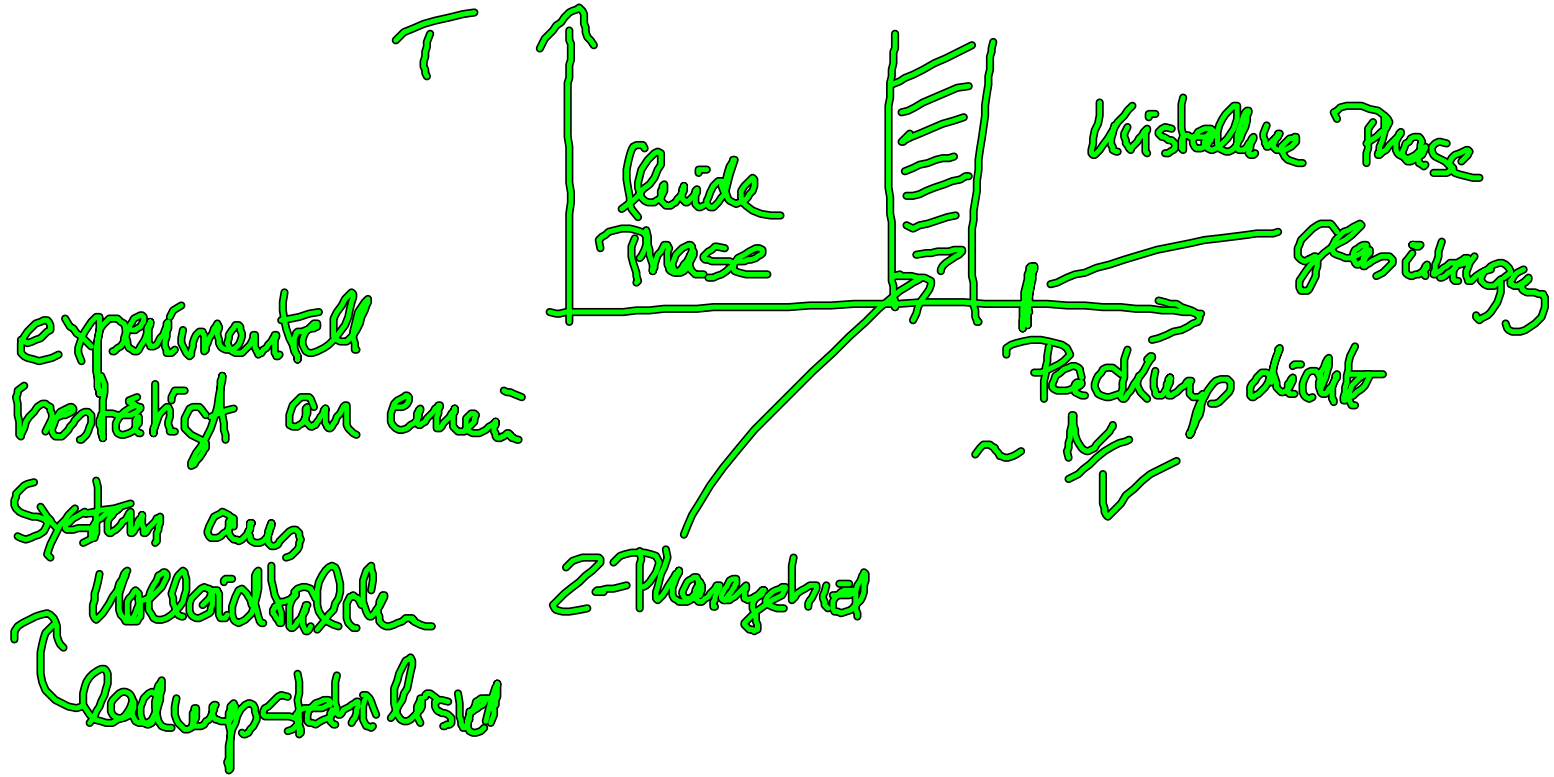
häufig quantitative Vergleich, möglich  
zw. Theorie, Computersimulation, Experiment!

### Beispiele

- Tusey, von Meegen (Nature, 1980)

Kristallisation und Glasübergang von  
Kugelsymmetrischen in 3 Dimensionen





- ~~Kristallisation~~ / Schmelzen in 2 Dimensionen

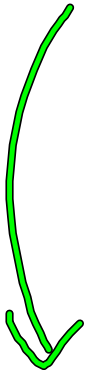
Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Young Theorie  
 (1976-79)

→ zw. fluide Phase und quasi-kristalliner Phase existiert "hexatisches  $T_{MH}$ "  
 charakterisiert durch  
 → Defektstrukturen und algebraisches Verhalten von Korrelationsfunktionen

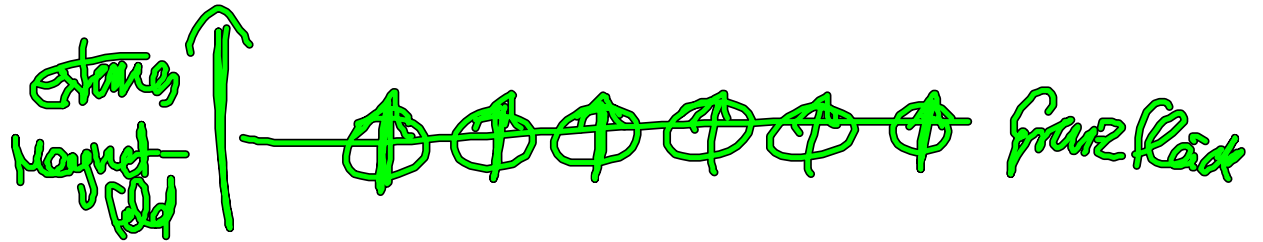
Erstmals experimentell bestätigt 1999

U. Zahn, G. Harst (Karlsruhe)

Phys. Rev. Lett (1999-2004)



am Beispiel magnet. Kolloide in 2D



• Transportphänomene

• Diffusion durch Nanostrukturen



Z. Hänggi, F. Marchesoni

Rev. Mod. Phys (2009)



Phänomene der dreidimensionalen Potentiale...

→ beobachtbar an Kolloidsystemen (Potentiale aus Laserfeldern)

• Nichtgleichgewichtphänomene

• Theorie: Jazayiski-Relation

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

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

die durch Nichtgleichgewichtsprozesse  
verbunden sind!

W: dabei am System  
reicht Arbeit

... Mittel und über  
Nichtgleichgewichtszustand

durch Kolloide best.!

Sano et al. Nature Physics (2010)

Seifert et al. Phys. Rev. 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~~  
Heranziehen inelastischer Freiheitsgrade  
(Teilchen des "Bades" (Lösungsmittel),  
inneren 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-Coupled-Simulations

~~II~~ Mark-Case, Brownian Dynamics, Kinetic  
Mark-Case