

## Projekt 1: Schwarmverhalten aktiver Teilchen

In diesem Projekt werden wir Computersimulationen (Brownian dynamics simulations) nutzen um das Schwarmverhalten aktiver Teilchen zu untersuchen. Aktiv bedeutet dabei, dass sich die Teilchen selbständig fortbewegen. Zusätzlich interagieren die Teilchen über elastische Federkräfte. Dieses einfache System zeigt jedoch bereits typisches Schwarmverhalten wie es u.a. aus der Biologie (Vögel, Fische, Bakterien) bekannt ist.



Ziel der Arbeit ist es, das Auftreten von zwei Typen von kollektivem Verhalten in Abhängigkeit einer effektiven Temperatur zu bestimmen.

### Literatur:

U. Erdmann, W. Ebeling, A. S. Mikhailov, *Phys. Rev. E* **71**, 051904 (2005)

### Kontakt:

Florian Kogler  
kogler@itp.tu-berlin.de  
Raum: EW 267

## Projekt 2: Phasendiagramm des 2D-Lennard-Jones-Fluids

Bei diesem Projekt werden Teilchen untersucht, die über ein Lennard-Jones-Potential (mit endlicher Reichweite) wechselwirken. Diese Art der Wechselwirkung findet man sowohl bei idealen Gasen als auch bei einigen Nanokolloiden. Hierbei wird zunächst der zweidimensionale Fall betrachtet. Dazu ist aus der Literatur das Phasendiagramm rund um den kritischen Punkt bekannt [1]. Hierbei schreibt Ihr eine kleine, für dieses Problem angepasste, Molekulardynamik-Simulation, wofür Euch ein entsprechendes Quellcodegerüst zur Verfügung steht. Des Weiteren berechnet Ihr Häufigkeitsverteilungen der Dichte für bestimmte Punkte im Zweiphasengebiet, bestehend aus flüssigen und gasförmigen Bereichen (durch Zerlegung der Simulationsbox in Blöcke) und vergleicht diese mit Literaturangaben [2].

### Literatur:

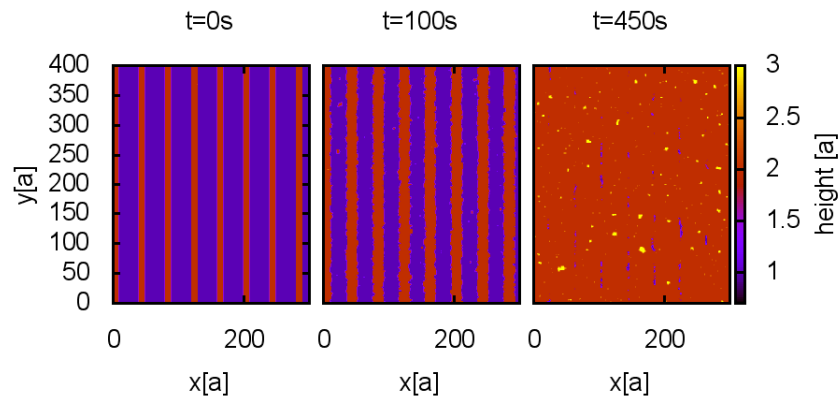
- [1] B. Smit, D. Frenkel, *J. Chem. Phys.* **94**, 5663 (1991)
- [2] M. Rovere, D. W. Heermann, K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 7009 (1990)

### Kontakt:

Thomas Heinemann  
thomasheinemann@mailbox.tu-berlin.de  
Raum: EW 269

## Projekt 3: Wachstum auf vorstrukturierten Oberflächen

In diesem Projekt nutzen wir eine kinetische Monte Carlo Methode um Oberflächenwachstum auf vorstrukturierten Oberflächen zu simulieren und die Evolution der Strukturen zu betrachten. Da permanent neue Teilchen adsorbiert werden, die das System aus dem Gleichgewicht treibt, hängen die Ergebnisse nicht nur von der ursprünglichen Struktur, sondern auch von den Aufdampfbedingungen ab. Die Strukturen können mittels Zeit- und Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen ausgewertet werden. Ihr werdet einen Simulationskern erhalten, jedoch wird die Auswertung ein wenig Programmierarbeit brauchen.



### Literatur:

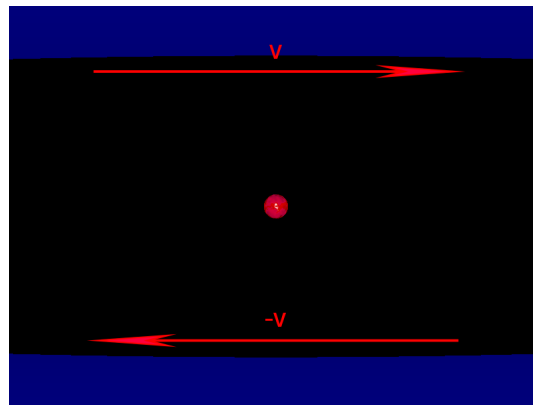
- [1] "Monte Carlo and kinetic Monte Carlo methods" von P. Kratzer (2009), URL: <http://arxiv.org/abs/0904.2556>
- [2] A. K. Jones, A. Ballestad, T. Li, M. Whitwick, J. Rottler and T. Tiedje, *Phys. Rev. B* **79** 205419 (2009)

### Kontakt:

Nicola Kleppmann  
nicola.kleppmann@tu-berlin.de  
Raum: EW 279

## Projekt 4: Kolloide im gescherten System

In diesem Projekt soll die mittlere quadratische Verschiebung (mean squared displacement) eines freien, gescherten Kolloides bestimmt werden. Das Projekt wird aus zwei Teilaufgaben bestehen. Im ersten Teil soll das Verhalten des Kolloides analytisch berechnet werden. Im zweiten Teil soll die Dynamik des Kolloides auf Basis eines zur Verfügung gestellten Programmes simuliert werden. Anschliessend müssen die simulierten und berechneten Ergebnisse gegeneinander gefittet und die Ergebnisse diskutiert werden. Für den zweiten Teil der Aufgabenstellung muss das Simulationsprogramm ein wenig erweitert werden.



### Literatur:

- [1] L. Holzer, J. Bammert, R. Rzehak, W. Zimmermann, *Phys. Rev. E* **81**, 041124 (2010)
- [2] H. Kählert, H. Löwen, *Phys. Rev. E* **86**, 041119 (2012)
- [3] M. Krüger, F. Weysser, M. Fuchs, K. Binder, *Eur. Phys. J.* **34**, 88 (2011)

### Kontakt:

Tarlan Vezirov  
tarlan.a.vezirov@tu-berlin.de  
Raum: EW 279

## Projekt 5: Wechselwirkendes Kolloidsystem im zeitabhängigen, externen Feld

In diesem Projekt soll die „Dynamische Dichtefunktionaltheorie“ (DDFT) benutzt werden, um die *Dynamik* von weichen Kolloiden in einem zeitabhängigen externen Feld zu studieren. Als Ausgangspunkt wird ein nicht-wechselwirkendes System in einer (3-dim.) beschränkten Geometrie gewählt. Die Gleichgewichtseinteilchendichte kann in diesem Fall exakt bestimmt werden. Im nächsten Schritt wird eine repulsive Paarwechselwirkung zwischen den Kolloiden (Molekularfeldnäherung) eingeschaltet und das Relaxationsverhalten mittels DDFT untersucht. Als Beispiel für ein zeitabhängiges Feld wird ein zeitlich oszillierendes, externes Potential betrachtet. Ziel ist es, geeignete Transportgrößen auf Basis der zeitabhängigen Einteilchendichte zu definieren, um die Dynamik des Systems zu charakterisieren.

### Literatur:

- [1] J. Dzubiella, C. N. Likos *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, L147 (2003)
- [2] A. J. Archer, R. Evans, *J. Chem. Phys.* **121**, 4246 (2004)

### Kontakt:

Ken Lichtner  
lichtner@mailbox.tu-berlin.de  
Raum: EW 266

## Projekt 6: Nukleation auf Oberflächen

An einem frischen Frühlingsmorgen kann man ein Phänomen beobachten, das jeder Autofahrer kennt: die Kondensation von Wasser auf der Windschutzscheibe. Hier soll der zugrunde liegende Mechanismus zunächst rein theoretisch mit Hilfe der klassischen Nukleationstheorie beschrieben werden. Anschließend wird die klassische Dichtefunktionaltheorie (alternativ auch die dynamische Variante „DDFT“) benutzt, um die Barriere der freien Enthalpie (Nukleation ist ein aktivierter Prozess) zu bestimmen. Ziel der Arbeit ist es, die Eigenschaften der Oberfläche (über externe Felder) zu ändern, um das Wachstumsverhalten der kondensierten Phase zu „steuern“.

### Literatur:

- [1] K. Lichtner, A. J. Archer, S. H. L. Klapp *J. Chem. Phys.* **136**, 024502 (2012)
- [2] "Nucleation: Basic Theory with Applications" von D. Kashchiev (2000), Butterworth-Heinemann Verlag

### Kontakt:

Ken Lichtner  
lichtner@mailbox.tu-berlin.de  
Raum: EW 266

## Projekt 7: Spinodale Entmischung

Im Inneren des Zweiphasengebiets (z.B. Metall-Legierung als binäre Mischung oder Flüssigkeit-Gas im kolloidalen System) kann man ein interessantes, raumzeitliches Verhalten beobachten, das sich „spinodale Entmischung“ nennt.

Aufgrund der Instabilität der homogenen Lösung bilden sich „labyrinthartige“ Strukturen aus, die sich im Laufe der Zeit vergrößern bis zur vollständigen Entmischung mit scharfer Grenzfläche (vgl. Übungsaufgabe 14, Blatt 5). Die frühe Phase dieses Entmischungsvorgangs soll mit Hilfe einer linearen Stabilitätsanalyse theoretisch untersucht werden. Die Dichteprofile für spätere Phasen sind analytisch schwerer zu lösen, so dass hier auf eine numerische Untersuchung mittels Dynamischer Dichtefunktionaltheorie (DDFT) zurückgegriffen werden soll.

### Literatur:

- [1] A. J. Archer, R. Evans, *J. Chem. Phys.* **121**, 4246 (2004)
- [2] "An Introduction to Dynamics of Colloids" von J.K.G. Dhont (1996), Elsevier Verlag

### Kontakt:

Ken Lichtner  
lichtner@mailbox.tu-berlin.de  
Raum: EW 266