

Kolloidsysteme: Theorie und Simulation

I. Einführung: Was sind Kolloide?

Kolloid: kommt aus dem Griechische

$\chi\omicron\lambda\lambda\alpha$ $\hat{=}$ Leim

$\epsilon\tilde{\iota}\delta\omicron\beta$ $\hat{=}$ Form, Aussehen

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

↳ meist Flüssigkeit ("Lösungsmittel")

⇒ man hat eine "Kolloidsuspension"

Mindestens eine dabei vorkommende Längenskala ist dabei mesoskopisch!

⇒ d.h., die einzelnen Kolloidteilchen haben typischerweise Durchmesser zw. 1nm bis 1µm

Beispiele aus dem Alltag:

- Milch (Fetttröpfchen in Wasser)

- Tinten, Farben (Lösungsmittel: Wasser, Öl)

- Kosmetik, Waschmittel ..

(Kolloidteilchen sind dann meist

Polymere, Mizellen (molekulare Aggregate)

⇒ Schnittstelle zur Chemie!

- Lehm

- 2 -

- Blut ($\hat{=}$ Suspension roter Blutkörperchen)

- Suspension aus Bakterien

→ Schnittstelle zur Biologie /
Biophysik

- Materialwissenschaften:

• Kolloidsysteme aus wässrige ^{flüssigen} festen Teilchen: *

z.B. geladene Kugeln, kleine ferromagnet. Kugeln, ...

oder:
Komplexer

Suspension aus Kohlenstoffnanoröhren,
Kolloidalen Quantenpunkten, ...

⇒ Schnittstelle zur
Festkörperphysik!

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

→ hier kommt die Statist. Physik ins
Spiel!

(oder allgemeiner: Die Physik der kondensierten
Materie)

* solche Systeme sind heutzutage sehr gut und kontrolliert
herstellbar! (Größenbereich stark reduziert (nanodispas))

Kolloidsysteme aus Sicht der (statistischen) Physik:

- Kolloide sind $10^3 - 10^4$ mal größer als Atome oder kleine Moleküle

→ man kann sie deutlich einfacher (experimentell) beobachten

→ z.B. Konfokale Mikroskopie, Lichtstreuung

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

→ auch dynamische Prozesse können viel einfacher verfolgt werden!

- Die Wechselwirkungen zw. ^{vielen} Kolloidteilchen lassen sich heute quasi "maßgeschneidert" einstellen

(durch Auswahl der Teilchen, Behandlung der Oberflächen, Eigenschaften des Lösungsmittels, ...)

⇒ mikroskopischer Hamiltonian klar definiert!!

(enthält z.B. Coulomb-^W, magnet. Dipol-Dipol, Van-der-Waals-^{statisch}...)

⇒ In den letzten Jahren haben sich Kolloid-Systeme als Modellsysteme etabliert, um Vorhersagen der Physik der Kondensate ^{Nanopartikel} und Nichtgleichgewicht zu überprüfen / verstehen

häufig quantitativer Vergleich möglich zw.

Theorie, Computersimulation, Experiment !!

Beispiel:

• Kristallisation von Talchen in 3D ^{und Glasübergang}



(am Beispiel Ladungsträgerkolloide)

Rusey, van Meegen
Nature

1986

• Einbreuen und Schmelzen in 2D

Schmelzen ist 2-stufiger Prozess

→ Existenz hexatischer Phasen

(quasi-langwellige Ordnung)
algebraischer Abfall von Kondensation

zw. Fluid und Kristall
 $k_6(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^4}$ hexatisch

beachte: Eine echte Kristalline Phase mit ∞ Stufen höherer Ordnung existiert nicht

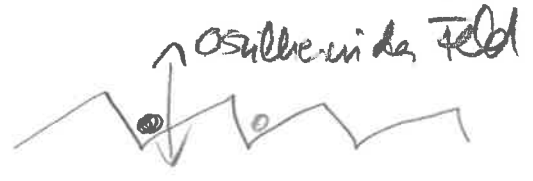
sogenannte Kosterlitz-Thouless-Halperin-Nelson-Yang Theorie (1979)

Experimente am Beispiel magnetischer Kollide :

V. Zahn, G. Maret
Phys. Rev. Lett. 1999 - 2004

Transportphänomene

z.B. thermische Ratschen



(wichtig für Bewegung separierter molekularer Motoren!)

• Diffusion durch Nanostrukturen

Review-Artikel (aus Theoret. Sinul) { P. Hänggi, F. Marchesoni, Rev. Mod. Phys (2009)
P. Reimann, Phys. Rep. (2002)

(+ J. Kärgen -> neueste Ausgabe des Physik-Journals)

• Nichtgleichgewichtsphänomene

• Fluktuationstheorem (Jarzynski-Relation)

Free Energy Difference $\frac{-\Delta F}{kT}$ Mittelwert $\frac{-W}{kT}$
$$e^{\frac{-\Delta F}{kT}} = e^{\frac{-W}{kT}}$$

W: Arbeit am System

(exakte Relation) für System weit weg aus dem Gleichgewicht

=> Differenz zw. den freien Energien zweier Zustände, die nicht durch Gleichgewichtsprozess verbunden sind (= Messung von Gleichgewichtsprozess im Nichtgleichgewicht)

gezeigt durch Theorie und Experiment!

z.B. M. Sano et al. Nature Physics (2010)
U. Seifert et al., Phys. Rev. Lett. (2012)

Weitere neuere Entwicklung:

⇒ Kolloide als wesentlicher Baustein ^{bei der} Erzeugung neuer Materialien

Kolloidale Gele

Kolloidale photoinische Kristalle

Kolloidale Quarzkristalle

(Talopini et al., Nature 2002)

⋮

Frage nun:

Wie behandeln wir wechselwirkende Kolloidsysteme im Rahmen der Theorie?

man benötigt
⇒ breite Palette von Methoden aus der modernen statistischen Physik

Ziel dieser VL ist es, einen Einblick in diese Methoden zu geben!

Im folgenden nun ein kurzes Überblick (der gleichzeitig auch die Struktur der VL liefert)

• Statistische Mechanik, Zustandssummen, ...

⇒ Konstruktion geeigneter effektiver Hamiltonians,
in denen nur die relevanten Freiheitsgrade
vorkommen

"Coarse-graining"

(Standardbeispiel: "Herausintegrieren" der
Freiheitsgrade des Lösungsmittels und/
innerer Freiheitsgrade)

• Klassische Dielektrikaltheorie (DFT)

($\hat{=}$ Erweiterung der elektrostatischen DFT auf klassische
Systeme bei $T > 0$)

⇒ liefert Entfernendichte und Korrelation in
auf Basis des μ inhomogenen Systemen
mikroskopischen Hamiltonians Kolloid

⇒ wird z.zt. als die mikroskopische Theorie
zur Beschreibung struktureller Eigenschaften
in Kolloidsystemen gesehen!

- Fokker-Planck-Gleichungen,
(Smoluchowski-)
und dynamische DFT

⇒ Beschreibung von Relaxationsphänomenen,
Transportprozessen, getriebenen
Kolloidsystemen, ...

⇒ Nukleationsprozesse

- Computersimulationen

Monte-Carlo (MC)

Brownian Dynamics (BD)

Kinetic MC