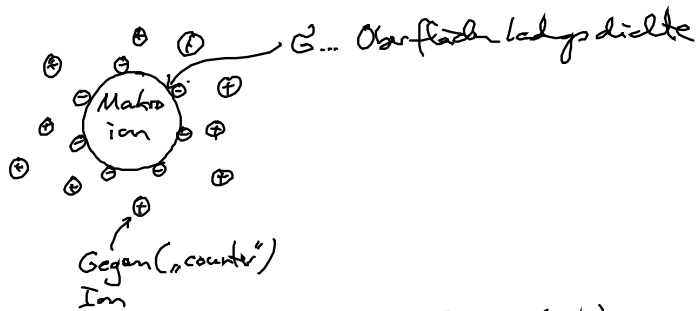


## 7.4 Repulsive, elektrostatische WW



- Debye-Länge:  $\lambda_D = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r k_B T}$  (7.13),  $H_2O: \lambda_D = 0,71 \text{ nm}$

### 7.4.1 Poisson-Boltzmann-Gl.

- Ges:  $E = -\text{grad } V$
- i.a.: Gegenionen & Koionen in der Salzlsg.  $\triangleq$  Elektrolyt  
Dichte:  $c_i(x)$ , Ladung:  $z_i e$ ,  $i=1, \dots, N$

Valenz  
 $|z_i|=1$ , monovalent

- Gauss:  $\text{div}(z_r \epsilon_0 E) = \rho(x) = e \sum_{i=1}^N z_i c_i(x)$   
Nernst/Boltzmann:  $c_i(x) = c_{0i} e^{-e z_i V(x)/k_B T}$   $\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} E = -\text{grad } V$

$$\nabla^2 V(x) = -\frac{e}{z_r \epsilon_0} \sum_{i=1}^N z_i c_{0i} e^{-e z_i V(x)/k_B T} \quad (7.14)$$

... Poisson-Boltzmann-Gl.

$V(x)$  ... elektrostat. Potential

$c_{0i}$  ... Referenzdichte

& Randbedingungen: Makroion

$$\text{Gauss: } \left. \begin{array}{l} \underline{E} \cdot \underline{n} \Big|_0 = -n \cdot \nabla V \Big|_0 = \frac{G}{z_r \epsilon_0} \end{array} \right\} (7.15)$$

$n$  ... Oberflächennormale

- Molekularfeld („mean-field“) Näherung:

pot. Energie:  $e z_i V(x)$  ausdrückt:  $\frac{e^2 z_i z_j}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r}$

### 7.4.2 Diffuse Ladungsschicht I

### 7.4.3 Diffuse Ladungsschicht II

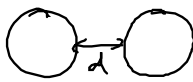
### 7.4.4 Repulsion $\leftrightarrow$ Ionenwolke

### 7.4.5 Andere Geometrien (in Salzlösung)

• Kugeln:

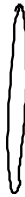


linearisierte PB:  $V(r) \sim \frac{e^{-r/\lambda_D}}{r}$



Wechselwirkungspotential:  
 $U(d) = \underbrace{F(d)}_{\text{freie Energie}} - F(\infty) \sim \frac{e^{-d/\lambda_D}}{d + 2R}$

• Stäbe, DNS?



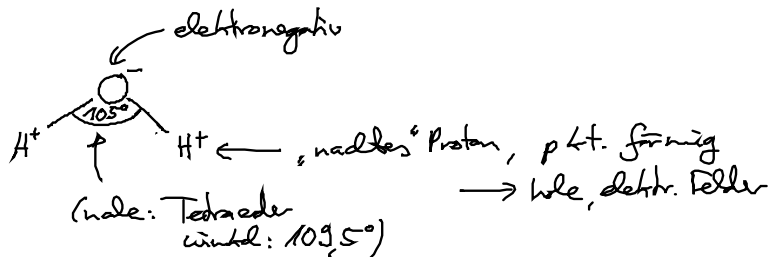
.....

## 7.5 Wasser

### 7.5.1 Wasserstoffbrücken

•  $H_2O$ -Molekül: polar

Dipol+  
(höhere  
Multipol)



starker Dipol  $\rightarrow \epsilon_r = 81!$   
 $\rightarrow$  Mikrowelle

• Wasserstoffbrücken: Folie