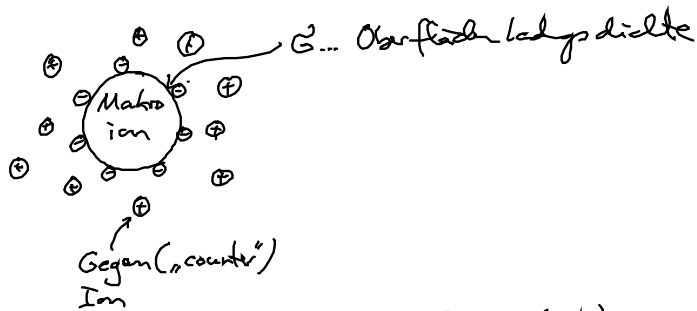


7.4 Repulsive, elektrostatische WW



- 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 & Ionen in der Salzlsg. \triangleq Elektrolyt
Dichte: $c_i(x)$, Ladung: $z_i e$, $i=1, \dots, N$

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

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

... Poisson-Boltzmann-Gl.

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

c_{0i} ... Referenzdichte

& Randbedingungen: Makroion

$$\text{Gauss: } \underline{E} \cdot \underline{n} \Big|_0 = -\underline{n} \cdot \nabla V \Big|_0 = \frac{G}{z_r \epsilon_0} \quad (7.15)$$

\underline{n} ... Oberflächennormale

- Molekularfeld („mean-field“) Näherung:

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

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?



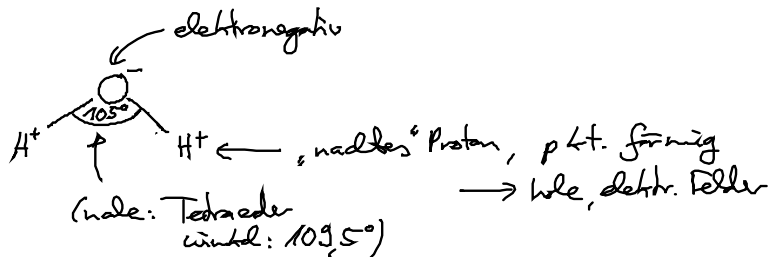
.....

7.5 Wasser

7.5.1 Wasserstoffbrücken

• H_2O -Molekül: polar

Dipol+
(höhere
Multipol)



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

• Wasserstoffbrücken: Folie