

Physicalezing 2025: Van simpele colloïden naar intelligente zachte materialen

Marjolein Dijkstra ontving dit jaar de Physicaprijs. Tijdens FYSICA 2025 op 11 april jongstleden sprak zij de bijbehorende Physicalezing uit.

Materialen zijn overal

De kunst om materialen naar onze hand te zetten heeft de wereld zoals wij die kennen vormgegeven. Materialen zijn de bouwstenen van alles om ons heen: van gebouwen en voertuigen tot elektronica, kleding en zelfs voedsel. Ze leveren energie, voeren berekeningen uit en maken communicatie mogelijk. Niet voor niets spreken we over het stenen tijdperk, het ijzeren tijdperk en het silicium tijdperk – perioden in de geschiedenis waarin de mensheid leerde materialen uit de natuur te gebruiken. Maar wat als we nieuwe materialen zouden kunnen ontwerpen door simpelweg de atomen te ordenen zoals wij dat willen? Doorbraken in nanotechnologie en moderne synthesetechnieken brengen ons verleidelijk dicht bij het verwezenlijken van dit idee. We staan aan de vooravond van een nieuw tijdperk waarin we de grenzen van materialen en hun mogelijkheden opnieuw definiëren.

De natuur als leermeester

Een veelbelovende aanpak is hiërarchische zelfassemblage, waarbij indi-

viduele deeltjes spontaan geordende structuren vormen – een mechanisme dat de natuur gebruikt voor de vorming van complexe structuren. In dit proces vormen atomen moleculen, combineren moleculen zich tot grotere eenheden, en uiteindelijk organiseren deze colloïdale bouwstenen, zoals nanodeeltjes, zich tot driedimensionale geordende structuren. Deze materialen onderscheiden zich door een precieze, periodieke nanostructuur en een extreem hoge oppervlak-tot-volume-verhouding – ideaal voor toepassingen in optoelektronica, plasmonica, fotonica, katalyse en energieopslag.

Colloïdale Legodoos

Het succes van deze aanpak hangt af van ons vermogen om nieuwe nanodeeltjes en colloïdale bouwstenen te ontwerpen en fabriceren. Hoewel recente doorbraken hebben geleid tot een verscheidenheid aan nieuwe bouwstenen met interactiepotentialen – van hard of zacht repulsief tot attractief, dipolair, anisotroop, patchy of zelfs motorisch aangedreven – is tot nu toe slechts een fractie

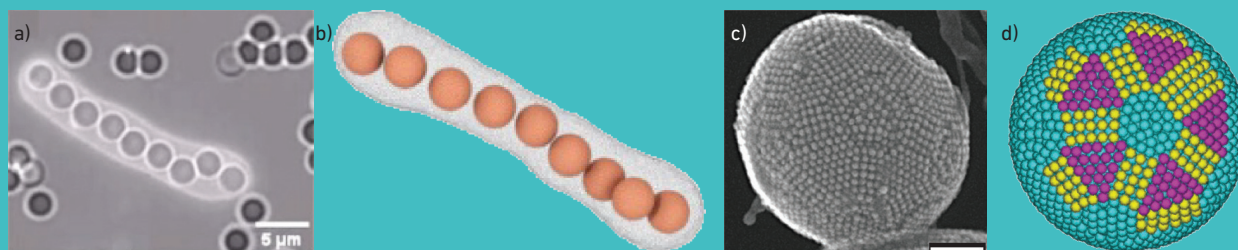
van het bijna oneindige scala aan mogelijke colloïdale bouwstenen en hun zelfgeassembleerde materialen gerealiseerd.

Computerspelletjes als oplossing

Om de ontwikkeling van zelfgeassembleerde materialen te versnellen, is het cruciaal dat theoretische voorspellingen het rationeel ontwerp van nieuwe materialen ondersteunen en begeleiden. De uitdaging ligt in de omvangrijke parameter ruimte, die wordt bepaald door de variëteit aan deeltjes, interactiepotentialen en experimentele condities zoals temperatuur, dichtheid en druk, evenals de complexe interacties in multicomponentsystemen. Computersimulaties bieden hier uitkomst. In de afgelopen decennia zijn ze uitgegroeid tot een krachtig instrument om de structuur en het fasegedrag van uiteenlopende deeltjes te voorspellen [1].

Kanonskogels

Een suspensie van colloïdale bolletjes, eenvoudig als harde bollen te beschrijven, vormt een fascinerend



Figuur 1. De *worstcatastrofe*: de dichtste pakking van 55 of minder bollen binnen een convexe omhulling is een worstvormige zak, waargenomen in experimenten (a) in de groep van Rao Vutukuri, Universiteit Twente, en simulaties (b) van colloïden in een vervormbaar vesikel. Bij toevoeging van één extra bol verandert de dichtste pakking abrupt naar een compacte cluster [2]. *Stapelgekke kristallen*: colloïdale bollen opgesloten in een vloeistofdruppel vormen, zowel in experimenten (c) in de groep van Alfons van Blaaderen, Universiteit Utrecht, als in simulaties (d), icoesaëdrische en rombisch icosidodecaëdrische clusters [3].

natuurkundig probleem. De efficiëntste stapeling van deze bollen – oftewel de optimale kristalstructuur bij hoge drukken – is een eeuwenoud probleem dat teruggaat tot Johannes Kepler, Carl Friedrich Gauss en Isaac Newton. Zelfs de Engelse zeevaarder Sir Walter Raleigh hield zich bezig met deze vraag, in zijn zoektocht naar de efficiëntste manier om kanonskogels op zijn schip mee te nemen. In 1611 stelde Kepler dat de dichtst mogelijke stapeling de kubische vlakgecentreerde stapeling (FCC) is, die 74% van de ruimte vult. Deze manier van stapelen is bijvoorbeeld herkenbaar bij sinaasappels op de markt. Kepler had geen bewijs voor de FCC als de dichtste pakking en zijn hypothese bleef nog vier eeuwen lang een uitdaging voor wiskundigen. Pas in 1998 kwam Thomas Hales met een bewijs, dat zo complex was dat wiskundigen na jaren van verificatie met 98% zekerheid konden bevestigen dat het klopte. Dat harde bollen een FCC-kristal vormen bij hogere drukken, werd echter al in 1957 voorspeld met simulaties en in 1987 experimenteel bevestigd.

De worstcatastrofe

Er is hier echter wat gek aan de hand. Het antwoord dat FCC de dichtste pakking oplevert geldt alleen voor een oneindig aantal bollen, maar met een eindige hoeveelheid bollen blijkt de meest efficiënte manier om 55 bollen te verpakken een lange worstvormige zak te zijn. Voeg je daar echter één bol aan toe, dan blijkt een andere

pakking opeens efficiënter. Dit fenomeen, de ‘worstcatastrofe’, fascineert wetenschappers al jaren. Samen met collega’s in Twente ontdekten we dit door vervormbare vesikels (membraanachtige blaasjes) te vullen met bolvormige colloïden. Zowel experimenten als simulaties toonden aan dat bollen tot negen stuks geen compacte stapeling vormen, maar een worstvorm aannemen. Door de druk en aantal deeltjes te variëren, brachten we deze verrassende resultaten in kaart die ons begrip van stapelingen volledig op zijn kop zetten [2].

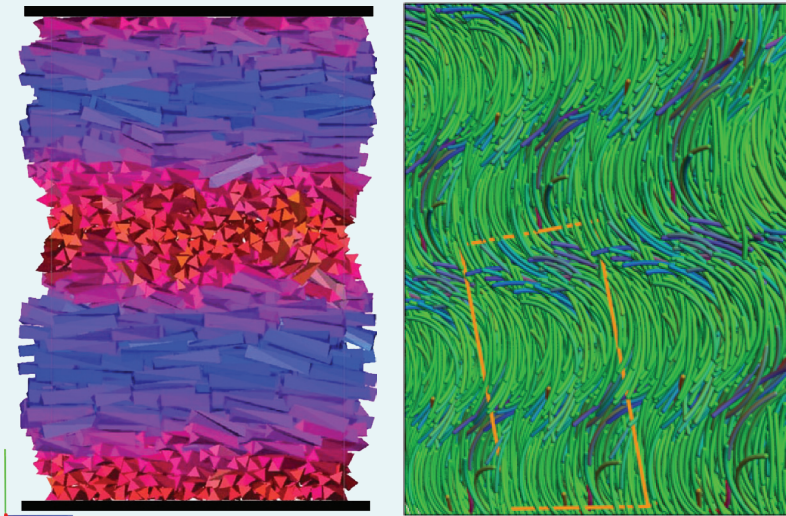
Stapelgekke kristallen van bollen in een bol

Wanneer colloïdale bollen in een vloeistofdruppel worden opgesloten, vormen ze, zowel in experimenten als in simulaties, kristalstructuren met fascinerende geometrieën als icoesaëders en rombische icosidodecaëders [3]. Deze structuren hebben een opvallende vijfvoudige symmetrie, die wiskundig onmogelijk een volledige ruimte vullen zonder open ruimtes achter te laten. De verklaring ligt in de bolvormige geometrie van de druppel, die de bollen dwingt te kristalliseren tot een icoesaëder, een platonisch lichaam met twintig gelijkzijdige driehoeken en vijfvoudige symmetrie. Bij grotere clusters ontstaat een verwante structuur: de rombische icosidodecaëder. Door deze unieke kristalvormen beschikken materialen met dergelijke supradeeltjes over bijzondere optische eigenschappen. Voeg je nog meer bollen toe in de druppel, dan keren

ze verrassend genoeg terug naar de vertrouwde sinaasappelstapeling. Ook mengsels van colloïdale bollen met twee verschillende afmetingen leiden tot onverwachte kristalstructuren. Bij een grootteverhouding van ongeveer 0,8 in een bolvormige omsluiting ontstaat een binair kristal met opnieuw icoesaëdrische symmetrie. Dit nieuwe type kristal met een structuur analoog aan $MgCu_2$, wijkt af van de gangbare $MgZn_2$ -fase die zich in bulk vormt [4]. Deze inzichten bieden een veelbelovende basis voor de ontwikkeling van fotonische kristallen.

Van bollen naar staven

Colloïdale deeltjes met een anisotrope vorm, zoals staven of schijven, kunnen vloeibaar-kristallijne fasen vormen. Net als krijtjes die spontaan kunnen olijnen, kunnen deze deeltjes zich ook vanzelf ordenen. Vloeibaar-kristallijne fasen vertonen unieke eigenschappen die tussen die van vloeistoffen en vaste stoffen liggen. Ze zijn niet volledig wanordelijk zoals vloeistoffen, maar ook niet perfect geordend zoals kristallen. Een bekend voorbeeld is het nematische vloeibaar kristal, toegepast in lcd-schermen. Maar vloeibare kristallen hebben meer toepassingen: coatings met bijzondere reflecterende eigenschappen helpen bijvoorbeeld gebouwen te koelen. Met behulp van geavanceerde computersimulaties hebben wij aangetoond dat de ordening van vloeibare kristallen volledig wordt bepaald door de vorm van de deeltjes. Wanneer de deeltjes een subtiele twist



Figuur 2. Deeltjes met een twist vormen spontaan een chirale nematische fase (links) met een spiraalvormige structuur [5]. Deeltjes met een kromming vormen een zogeheten *splay-bend* nematische fase (rechts), die we ook experimenteel hebben waargenomen in samenwerking met de groep van Roel Dullens (Oxford, Nijmegen) en Alfons van Blaaderen (Utrecht) [6].

hebben, vormen ze spontaan een chirale nematische fase. In deze fase richten de deeltjes zich niet alleen uit, maar draaien ze ook enigszins ten opzichte van elkaar, waardoor een spiraalvormige structuur ontstaat. Bovendien kan de lengteschaal van deze chirale fase worden ingesteld met een elektrisch veld.

Deeltjes met een kromming

Wanneer de staafjes echter gekromd zijn, wordt de oplijning verstoord. Al vijftig jaar geleden werd theoretisch voorspeld dat deze ‘frustratie’ zou leiden tot de vorming van een zogenaamde *splay-bend* nematische vloeibaar kristallijne fase, maar experimenteel bewijs ontbrak tot nu toe. Met behulp van computersimulaties hebben wij handreikingen gegeven om deze fasen te realiseren. Samen met collega’s uit Oxford hebben we het bestaan van deze fase experimenteel aangetoond door de oplijning te verstoren met banaanvormige deeltjes. Daarnaast toonden we met collega’s uit Utrecht aan dat deze fase ook optreedt in gekromde silica staafjes wanneer polydispersiteit – verschillende deeltjeslengtes – voor extra frustratie zorgt. Deze

ontdekking vormt een belangrijke stap in de ontwikkeling van banaanvormige vloeibare kristallen, die zich razendsnel kunnen heroriënteren in elektrische velden. Dit maakt ze ideaal voor innovatieve beeldschermen met ultrasnelle responstijden en heeft een ware ‘bananenmanie’ ontketend in de wereld van vloeibare kristallen.

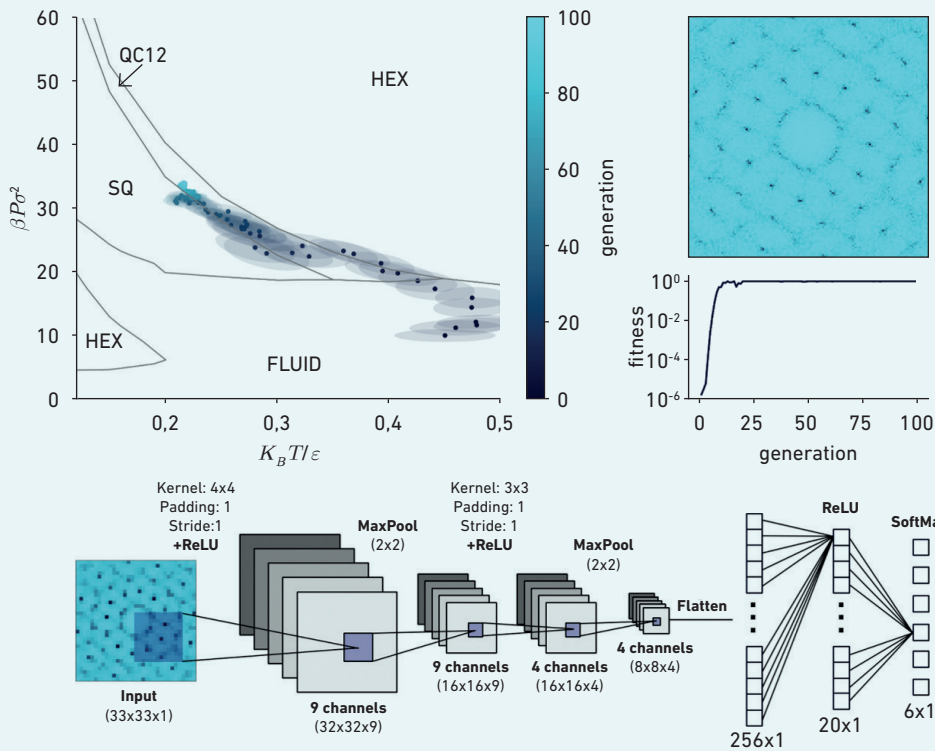
Ontwerpproces op zijn kop

Slimme materialen, zoals katalysatoren en membranen, bestaan uit moleculen of nanodeeltjes die zichzelf ordenen tot een specifieke structuur. Traditioneel worden nieuwe materialen vaak bij toeval ontdekt: uit een bijna oneindig aantal mogelijke combinaties van moleculen en verbindingen wordt onderzocht welke chemische samenstelling leidt tot materialen met interessante eigenschappen. Omdat er echter astronomisch veel mogelijke combinaties zijn, is het onbegonnen werk om alle mogelijkheden systematisch te onderzoeken. Om dit te doorbreken, hebben we een op kunstmatige intelligentie (AI) gebaseerd systeem ontwikkeld dat een belangrijke stap zet in het doelgerichter ontwerpen van nieuwe materialen door het ontwerpproces om te keren.

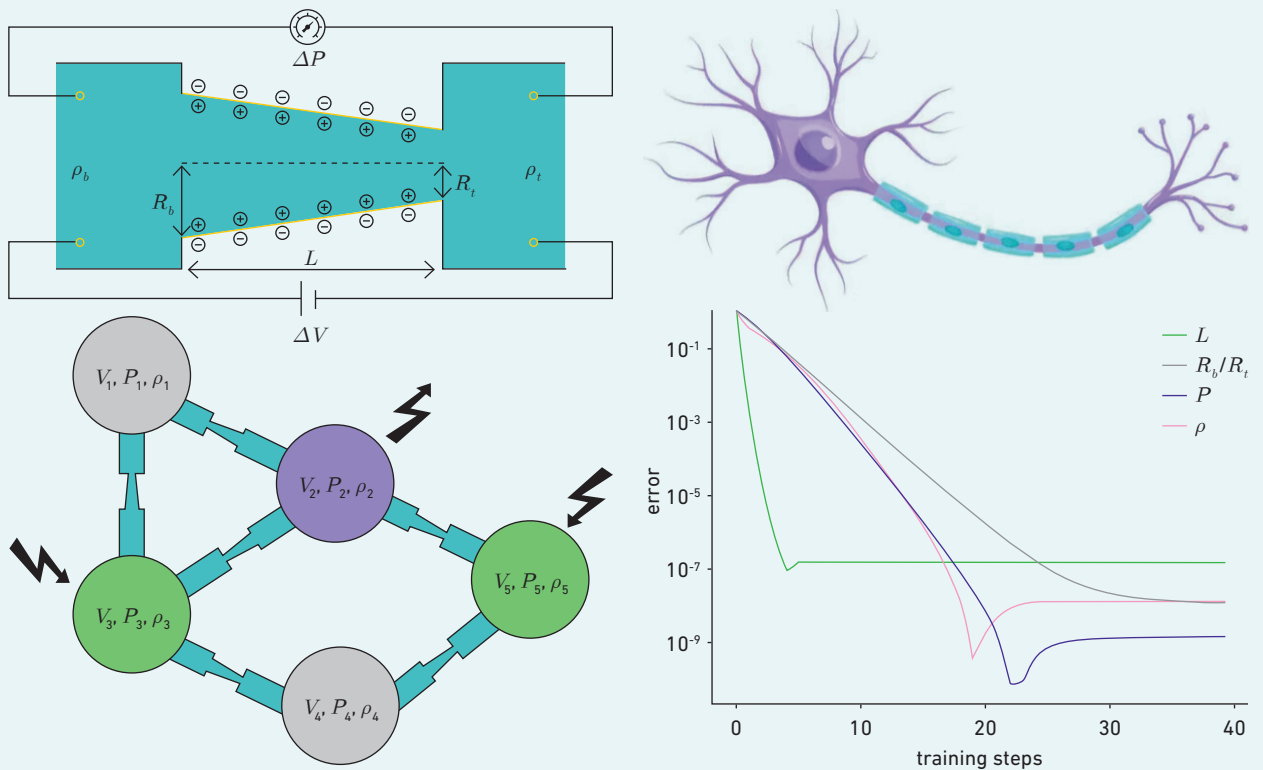
In plaats van eindeloos combinaties uit te proberen, begint het systeem bij de gewenste materiaaleigenschappen en berekent het welke bouwstenen en omstandigheden nodig zijn om die structuur te realiseren. Ons AI-systeem maakt gebruik van een evolutionair algoritme, geïnspireerd op natuurlijke selectie, om de deeltjes en condities stap voor stap aan te passen en te optimaliseren voor de gewenste structuur. Vervolgens beoordeelt een kunstmatig neurale netwerk of de gewenste structuur daadwerkelijk is gevonden. We tonen de werking van het AI-systeem aan door quasikristallen te ontwerpen – structuren waarin de deeltjes geen periodiek rooster vormen, maar toch een bepaalde regelmaat vertonen. Quasikristallen hebben toepassingen in onder andere fotonica. Daarnaast hebben we AI ingezet om materialen te ontwerpen voor een duurzame toekomst, bijvoorbeeld poreuze zeolietmaterialen die effectief CO₂ kunnen vangen en opslaan.

De toekomst

De toekomst van materiaalontwerp ligt niet bij traditionele, statische materialen, maar bij slimme, dynamische materialen die zich aanpassen aan hun omgeving. De natuur biedt talloze inspirerende voorbeelden: kameleons reguleren hun temperatuur met kleurverandering, planten buigen naar het zonlicht en gekko’s hechten zich aan oppervlakken met haartjes op hun voeten. Door deze principes toe te passen, kunnen we flexibele, dynamische materialen ontwikkelen met toepassingen van adaptieve medicijnafgiftesystemen tot zelfherstellende structuren. We willen echter verder gaan dan alleen dynamische, adaptieve materialen en ons richten op zelflerende materialen. Deze materialen zijn niet ‘af’ wanneer ze uit de fabriek komen, maar passen zich voortdurend aan hun omgeving aan en leren van hun ervaringen. We onderzoeken samen met collega’s uit Utrecht hoe eenvoudige bouwstenen, zoals water en ionen in microfluidische netwerken, elementaire machinelearningtaken



Figuur 3. Een op kunstmatige intelligentie gebaseerd systeem ontwerpt de optimale parameters voor een quasikristal. Het systeem maakt gebruik van een evolutionair algoritme om de deeltjes en condities te optimaliseren, terwijl een kunstmatig neurale netwerk aangeeft hoe dicht we bij de gewenste structuur zijn [7].



Figuur 4: Een microfluidisch netwerk van kegelvormige kanalen, bestudeerd in samenwerking met de groep van René van Roij, Universiteit Utrecht [8], gevuld met een elektrolyt, dat elementaire machinelearning-taken uitvoert.

kunnen uitvoeren. Daarnaast bestuderen we hoe topologische defecten in vloeibare kristallen ingezet kunnen worden voor informatieverwerking. Door gebruik te maken van multistabiliteit, hysteresis en niet-lineariteit in zachte materialen, streven we niet alleen naar fundamenteel inzicht in het ontstaan van intelligent gedrag, maar ook naar de ontwikkeling van geavanceerde intelligente materialen. Materialen die zelfstandig leren, zich aanpassen aan hun omgeving en zelfs berekeningen kunnen uitvoeren – een stap richting de toekomst van echte slimme materie.

Dank

Ten slotte wil ik iedereen uit mijn onderzoeksgroep in Utrecht bedanken die heeft bijgedragen aan de totstandkoming van dit onderzoek, evenals de onderzoeksgroepen van René van Roij

en Alfons van Blaaderen (Universiteit Utrecht), Rao Vutukuri (Universiteit Twente), en Roel Dullens (Radboud Universiteit).

Marjolein Dijkstra behaalde haar master moleculaire wetenschappen in Wageningen en natuurkunde in Utrecht. Ze promoveerde aan het AMOLF en werkte vervolgens als postdoc in Oxford, Lyon en Bristol. In 1999 trad ze in dienst bij de Universiteit Utrecht, waar ze sinds 2007 hoogleraar Soft Condensed Matter is aan het Debye Institute for Nanomaterials Science. Ze ontving de Minervaprijs in 2000, een Vici-beurs in 2006 en een ERC Advanced Grant in 2020. Sinds 2020 is zij lid van de KNAW. In 2025 ontving zij de Physicaprijs. m.dijkstra@uu.nl

REFERENTIES

1 M. Dijkstra en E. Luijten, From predictive modelling to machine learning and reverse engineering of colloidal self-assembly, *Nature Materials* **20**, 762 (2021).

- 2 S. Marin-Aguilar et al., A colloidal viewpoint on the sausage catastrophe and the finite sphere packing problem, *Nature Communications* **14**, 7896 (2023).
- 3 B. de Nijs et al., Entropy-driven formation of large icosahedral colloidal clusters by spherical confinement, *Nature Materials* **14**, 56 (2015).
- 4 D. Wang et al., Binary icosahedral clusters of hard spheres in spherical confinement, *Nature Physics* **17**, 128 (2021).
- 5 S. Dussi en M. Dijkstra, Entropy-driven formation of chiral nematic phases by computer simulations, *Nature Communications* **7**, 11175 (2016).
- 6 M. Chiappini en M. Dijkstra, A generalized density-modulated twist-splay-bend phase of banana-shaped particles, *Nature Communications* **12**, 2157 (2021); C. Fernández-Rico et al., Shaping colloidal bananas to reveal biaxial, splay-bend nematic, and smectic phases, *Science* **369**, 950 (2020); R. Kotni et al., Splay-bend nematic phases of bent colloidal silica rods induced by polydispersity, *Nature Communications* **13**, 7264 (2022).
- 7 G.M. Coli, E. Boattini, L. Filion en M. Dijkstra, Inverse design of soft materials via a deep learning-based evolutionary strategy, *Science Advances* **8**, eabj6731 (2022).
- 8 T.M. Kamsma et al., Iontronic neuromorphic signaling with conical microfluidic memristors, *Physical Review Letters* **130**, 268401 (2023). W.Q. Boon, T.E. Veenstra, M. Dijkstra en R. van Roij, Pressure-sensitive ion conduction in a conical channel: Optimal pressure and geometry, *Physics of Fluids* **34**, 101701 (2022).

Figuur 6. Werkbespreking van de simulatiegroep over de quasikristallijne orde van supra-deeltjes van tetraëdrische nanodeeltjes. Foto: Ivar Pel.

