

# Struktur der Materie: atomare und molekulare Wechselwirkungen.

Dr. Balázs Kiss

Myofilament-Mechanobiophysik Forschungsgruppe,  
Institut für Biophysik und Strahlenbiologie.

12. November 2025.



**SEMMELWEIS**  
UNIVERSITY 1769

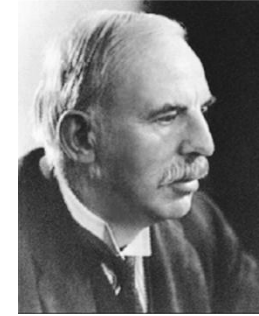
# Frühe Atommodelle



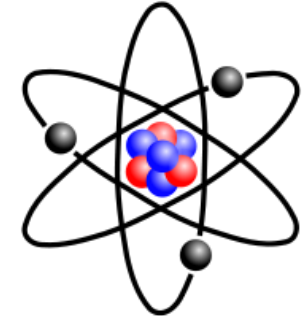
**Demokrit** (460-370 v. Chr.)  
Materie, die aus unteilbaren Teilchen („Atomen“) besteht



**Joseph John Thomson** (1856-1940)  
Entdeckung des Elektrons



**Ernest Rutherford** (1871-1937)



Rutherfords Atommodell:  
Miniaturplanetensystem



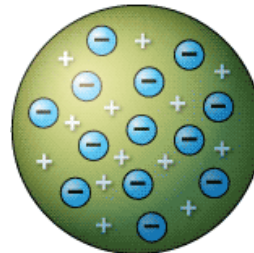
**John Dalton** (1766-1844)  
Ein gegebenes Element, besteht aus identischen, unteilbaren Atomen



Daltons Atom



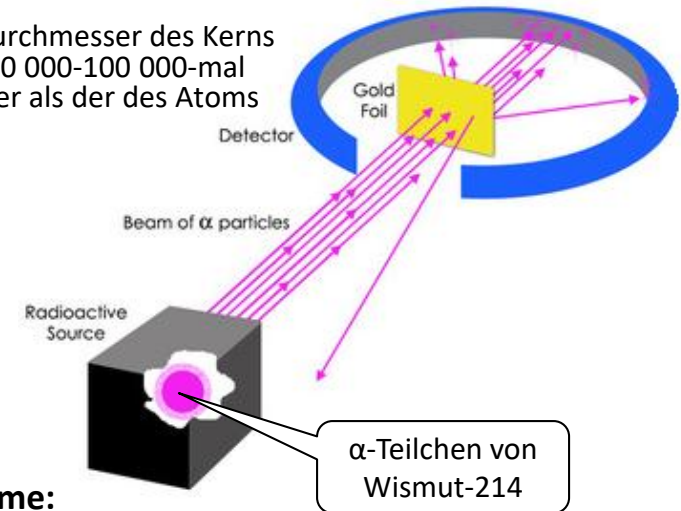
Kathodenstrahl (Elektronenstrahl) in einer Vakuumröhre



Plumpudding- oder Rosinenkuchenmodell

## Der Versuch von Rutherford

Der Durchmesser des Kerns ist 10 000-100 000-mal kleiner als der des Atoms



### Probleme:

- instabiles Atom
- Elektronen: Zentripetalbeschleunigung – Lichtemission – Energieverlust – sollen in den Kern fallen...

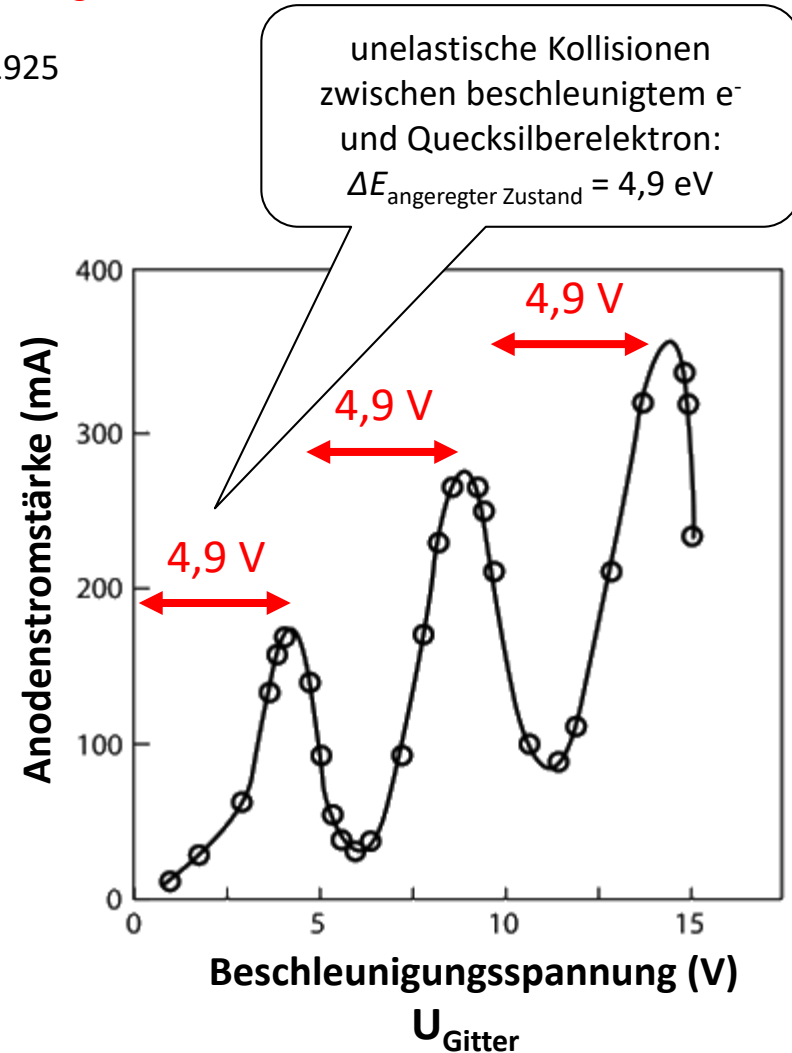
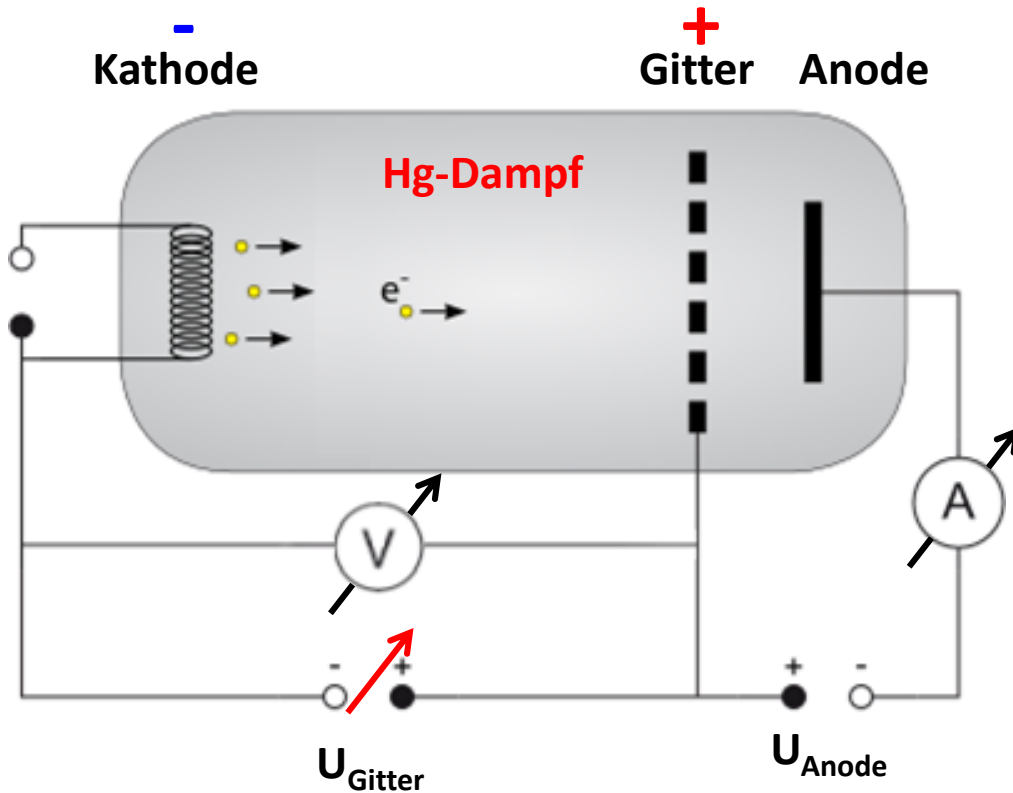
# Die Energie der Elektronen ist quantisiert



James Franck Gustav Hertz

## Franck-Hertz Versuch

- In 1914: **Elektronen** angeregter Quecksilberatome besitzen nur **diskrete, quantisierte Energiezustände**
- Physik Nobelpreis in 1925



# Das Bohrsche Atommodell

## Bohrs Postulate



Niels Bohr  
(1885-1962)

### 1. Quantenbedingung:

- Die Elektronen eines Atoms befinden sich auf vorgegebenen Bahnen.
- Auf der gegebenen Bahn emittiert das Elektron keine Strahlung, seine Energie ist konstant. Der Drehimpuls ( $L$ ) des Orbitalelektrons ist ein ganzzahliges Vielfaches von  $h/2\pi$ :

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

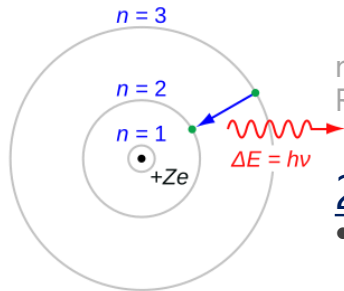
$n$  = Hauptquantenzahl. Der Radius der ersten Umlaufbahn beträgt  $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11}$  m („Bohrradius“). Die Radien der weiteren Umlaufbahnen betragen:  $r_n = n^2 r_1$

### 2. Frequenzbedingung:

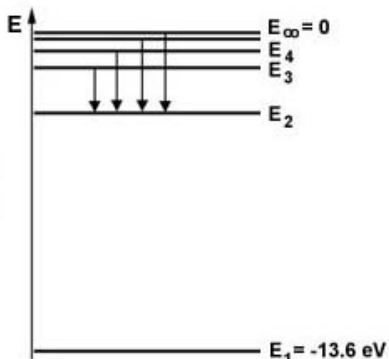
- Das Atom strahlt (Licht) nur dann aus, wenn das Elektron von einer Bahn zur anderen „springt“. Die Energie der Strahlung ist die Differenz der Bahnenergien:

$$E_{\text{Photon}} = h \cdot f = E_2 - E_1$$

Die Bahnenergien können berechnet werden. Energie der ersten Bahn ist  $E_1 = -13,6$  eV.



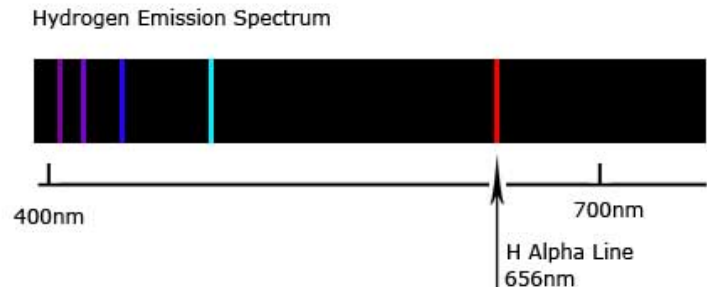
Bohr-Modell  
des Wasserstoffatoms



Energieniveaus im H-Atom

### Bedeutung

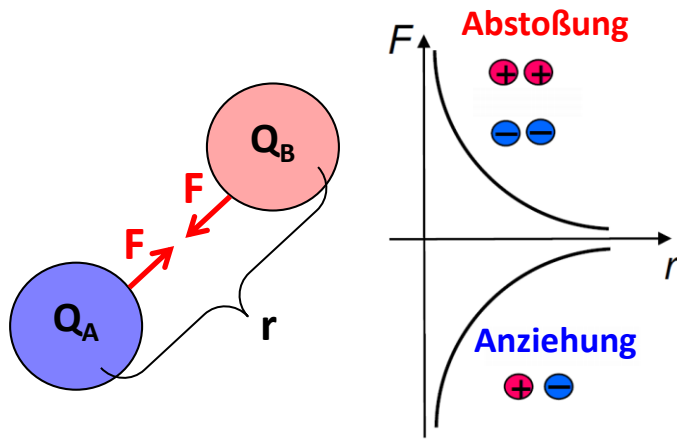
- Das Modell erklärte die Emissionsspektrallinien des Wasserstoffatoms. Aber nur das des Wasserstoffatoms.
- Emissionsspektroskopie
- (Laser)



# Grundsätzliche Wechselwirkungen der Physik

Wechselwirkung	Worauf wirkt?	Reichweite (m)	relative Stärke
Gravitation	auf alle Teilchen	unendlich ( $\sim 1/r^2$ )	$10^{-40}$
elektrostatische W.w. (Coulomb)	auf elektrisch geladenen Teilchen	unendlich ( $\sim 1/r^2$ )	$10^{-2}$
starke nukleare	auf Nukleonen	$10^{-15}$	1
schwache nukleare	auf alle Teilchen	$10^{-18}$	$10^{-13}$

## Coulomb-Wechselwirkung

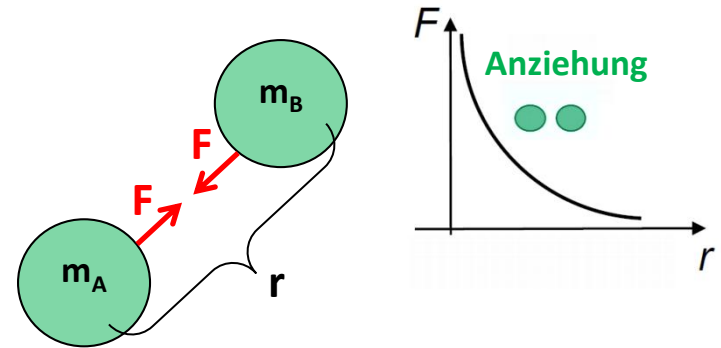


$$F_C = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r^2}$$

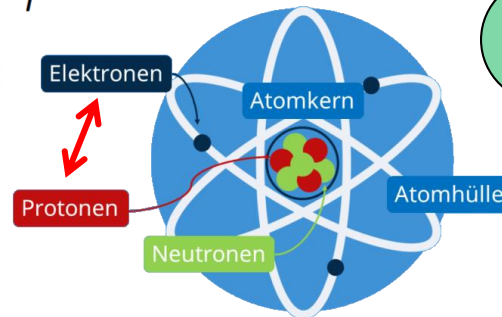
ähnliche  
Abstandsabhängigkeit



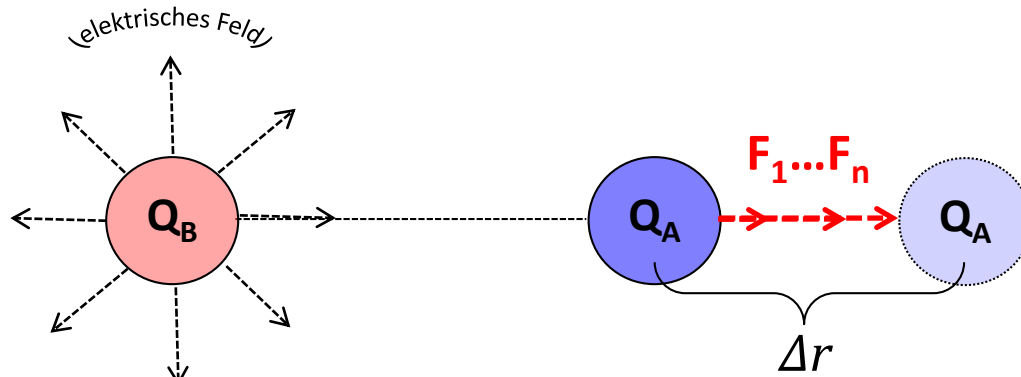
## Gravitation



$$F_g = G \cdot \frac{m_A \cdot m_B}{r^2}$$



# Elektrische potenzielle Energie ( $E_{pot}$ )



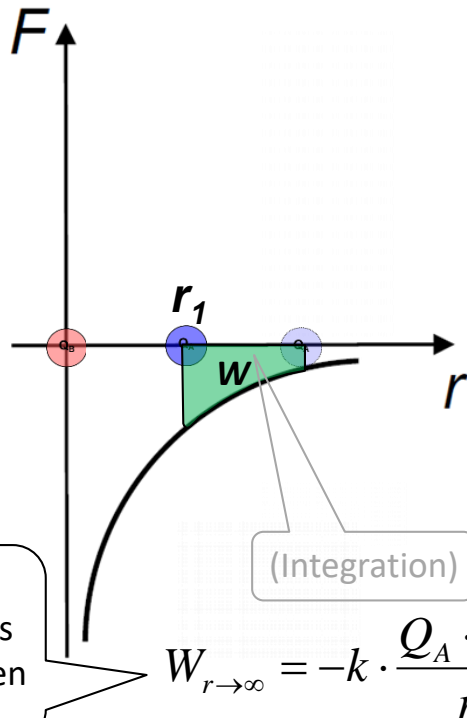
$$W = F \cdot s = F \cdot \Delta r$$

$$F = ?$$

verändert sich ständig!

positive Ladung  
(fixiert im Raum)

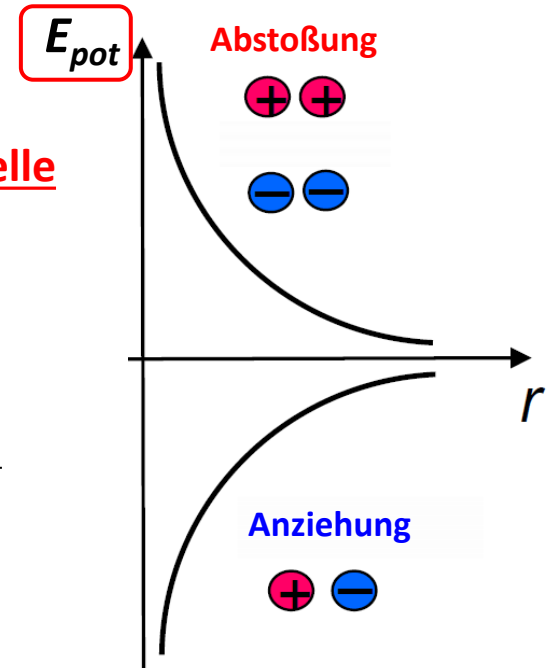
Wie groß ist die Arbeit bei der Entfernung der  
negativen Ladung?



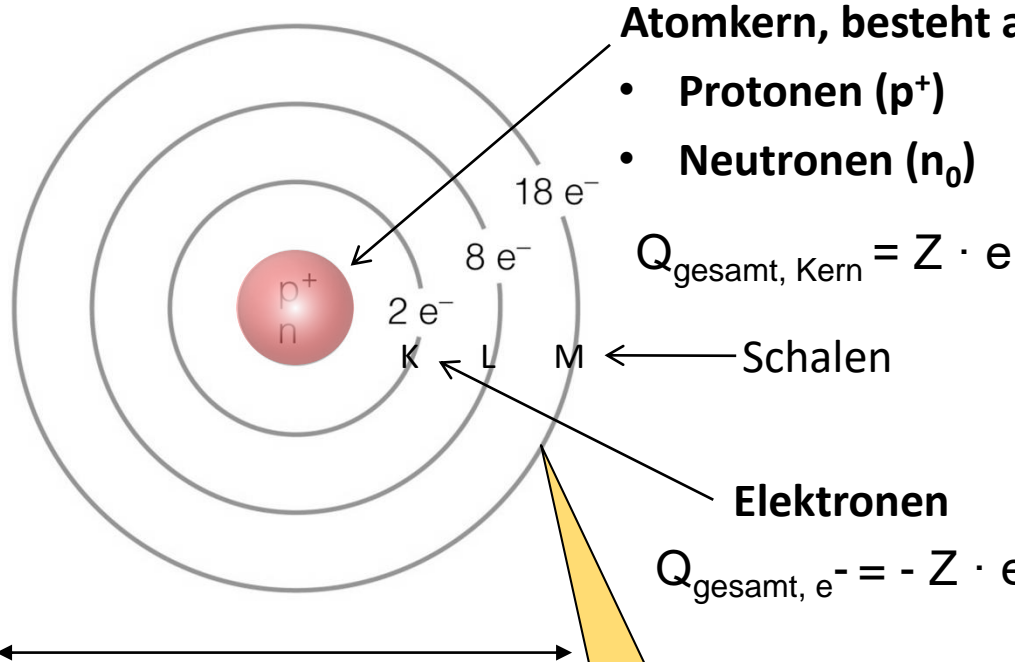
Elektrische potenzielle Energie :

$$E_{pot} = W_{\infty \rightarrow r}$$

$$E_{pot} = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r}$$



# Aufbau des Atoms



**Z: Ordnungszahl**  
(Anzahl der Protonen)

**N: Neutronenzahl**

**A: Massenzahl**  
(=Z+N)

$d \sim 0,1 \text{ nm}$

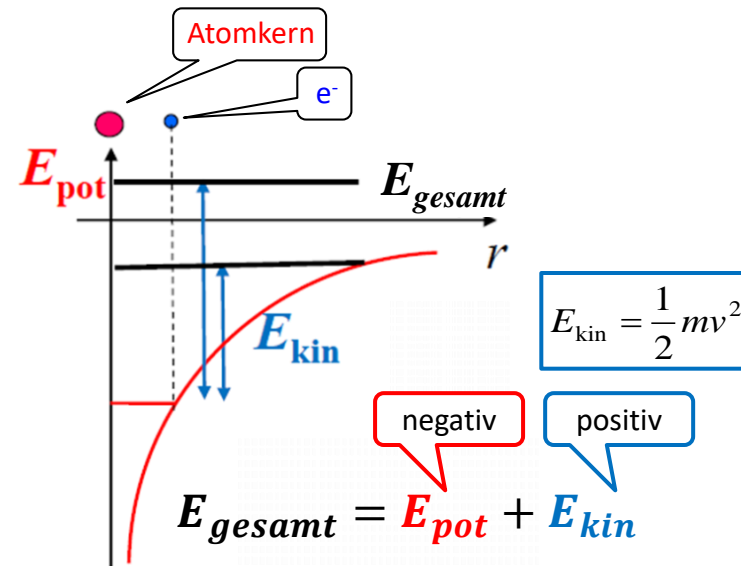
$0,1 \text{ nm} = 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$



Anders Jonas Ångström

$$E_{\text{pot}} = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r}$$

potenzielle Energie



$E_{\text{gesamt}} < 0$ : gebundenes Elektron

$E_{\text{gesamt}} > 0$ : freies Elektron

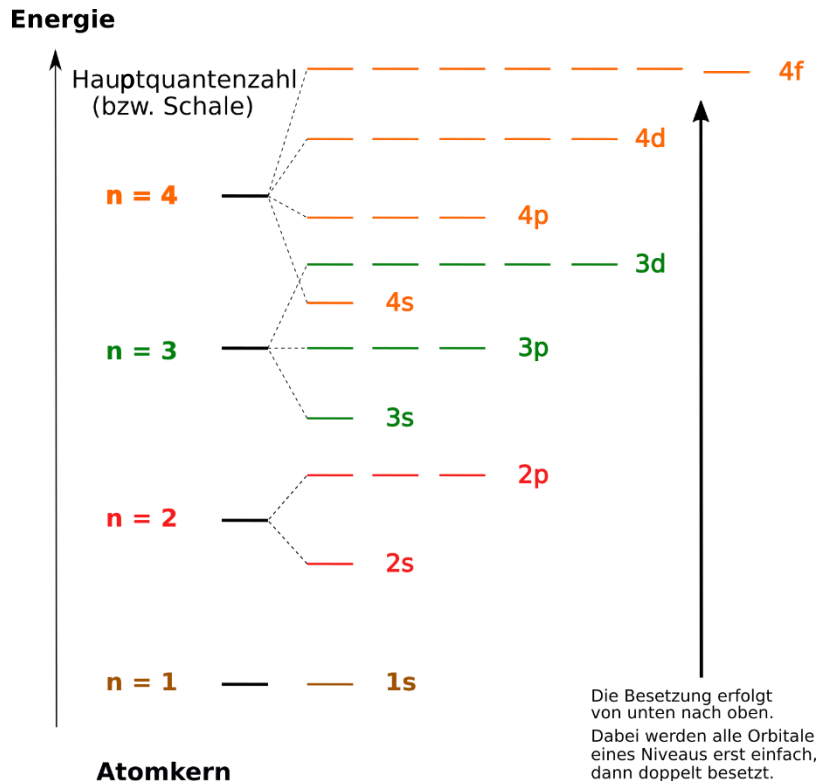
# Energiezustände und Übergänge

Eine spezielle Eigenschaft der Mikrowelt:

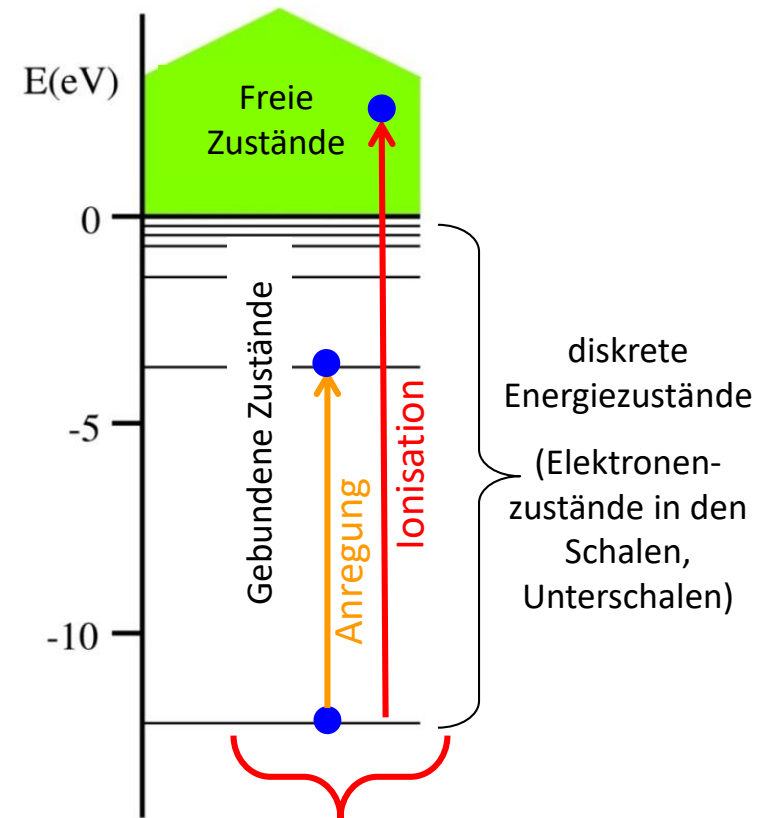
- **diskrete (quantierte) gebundene Energiezustände**

Prinzipien bei der Besetzung der Energiezuständen (Schalen, Unterschalen):

- **Energieminimum**
- **Pauli-Prinzip**
- **Hundsche Regeln**



Beispiel: H-Atom



**Elektronenübergänge (Zustandsänderungen):**  
Anregung, Ionisation, ...



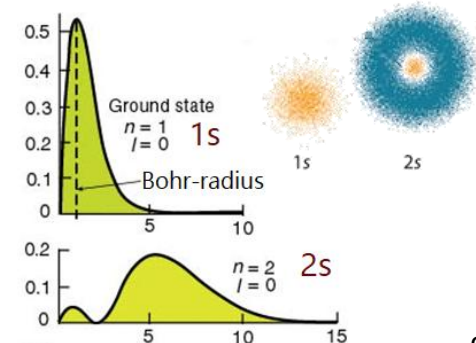
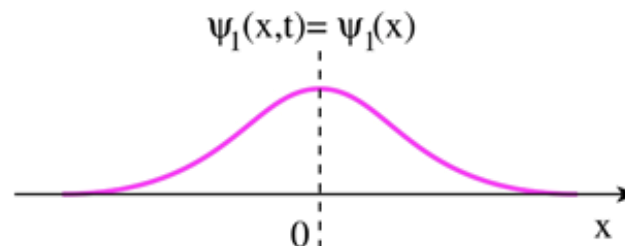
dazu muss Energie zugeführt werden (oder wird dabei Energie freigesetzt)

# Quantenzahlen

Name	Symbol	Wertebereich	Bedeutung
Hauptquantenzahl Energiezustand des Elektrons	$n$	$n \in \mathbb{N}$	gibt die Energiestufe $n$ des Elektrons an $n = 1$ K-Schale $n = 2$ L-Schale $n = 3$ M-Schale ...
Nebenquantenzahl Bahndrehimpuls, Betrag	$l$	$l \in \mathbb{N}$ $0 \leq l \leq n-1$	bestimmt die Art des Orbitals $l = 0$ s-Orbital Kugelform $l = 1$ p-Orbitale Hantelform $l = 2$ d-Orbitale komplizierte 3D-Strukturen $l = 3$ f-Orbitale komplizierte 3D-Strukturen
Magnetquantenzahl Bahndrehimpuls, Richtung	$m$	$m \in \mathbb{Z}$ $-l \leq m \leq +l$	bestimmt die Orientierung des Orbitals in einem elektromagnetischen Feld Beispiel: längs der x-Achse, der y-Achse oder der z-Achse
Spinquantenzahl Eigendrehimpuls	$s$	$s = +\frac{1}{2}$ oder $s = -\frac{1}{2}$	bestimmt die Eigenrotation des Elektrons (im Uhrzeigersinn oder im entgegengesetzten Uhrzeigersinn)

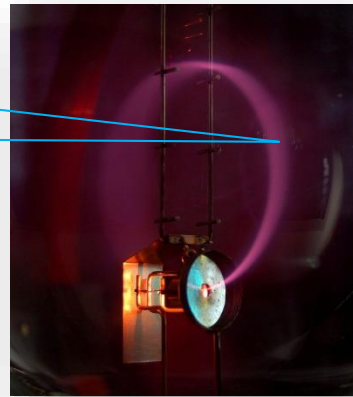
## Quantenmechanik

- beschreibt die Zustände des Elektrons  
(ein Zustand  $\rightarrow$  eine **Wellenfunktion,  $\Psi$** )
- berechnet den wahrscheinlichsten Ort  
(Orbital,  $r$ ) und die Energie ( $E$ ) des Elektrons



# Teilchen-Wellen-Dualität des Elektrons

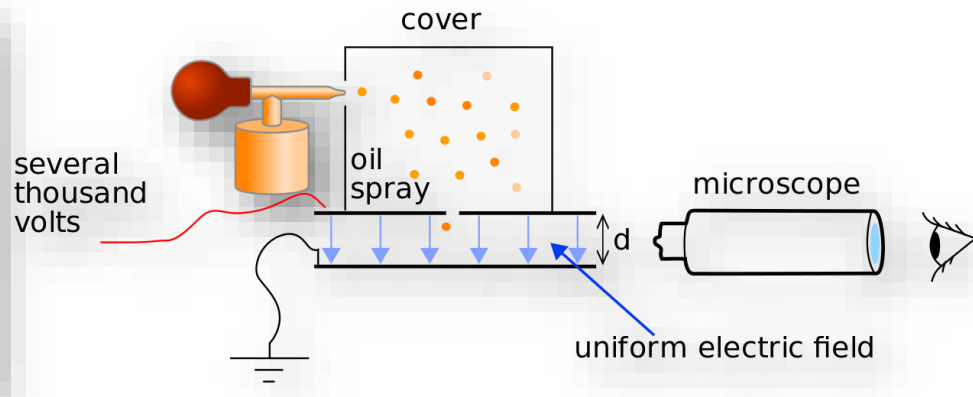
Der Elektronenstrahl wird im Magnetfeld abgelenkt



**Masse**

(Thomson, 1897; Masse-Ladungs-Verhältnis)

$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$



**Ladung**

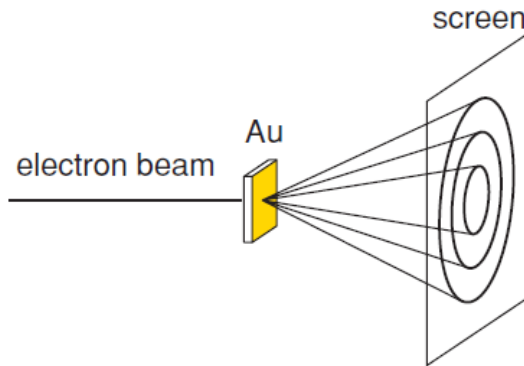
(Millikan, 1910)

$$e = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

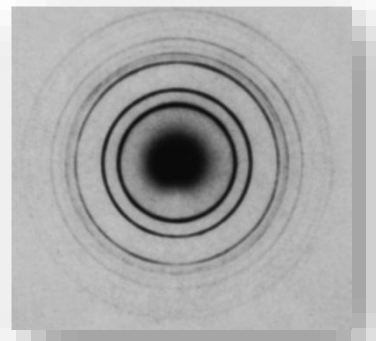
Teilchen



Welle



Davisson und Germer, 1927



**Beugung von schnellen Elektronen an eine Goldfolie**

Einstein: Masse-Energie-Äquivalenz  
Planck: Strahlungsgesetz  
Maxwell: Lichtgeschwindigkeit

$$E = mc^2 \quad E = hf \quad c = \lambda f$$

Louis de Broglie:  $mc^2 = h \cdot \frac{c}{\lambda}$

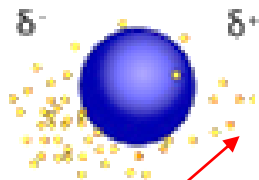
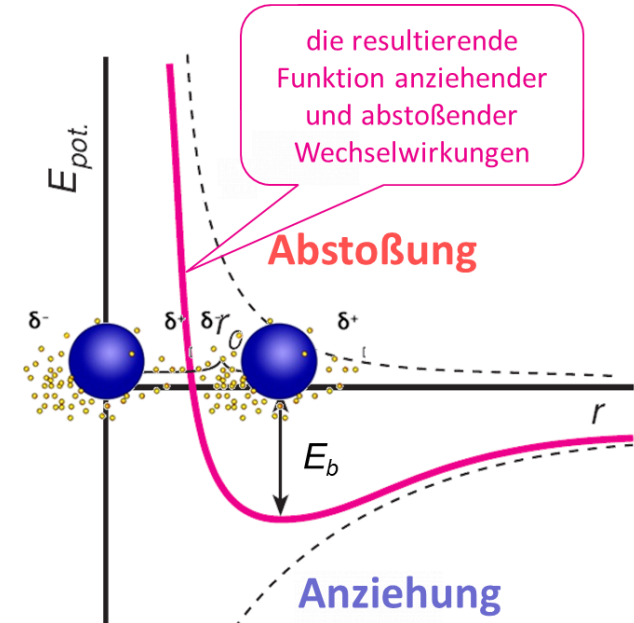
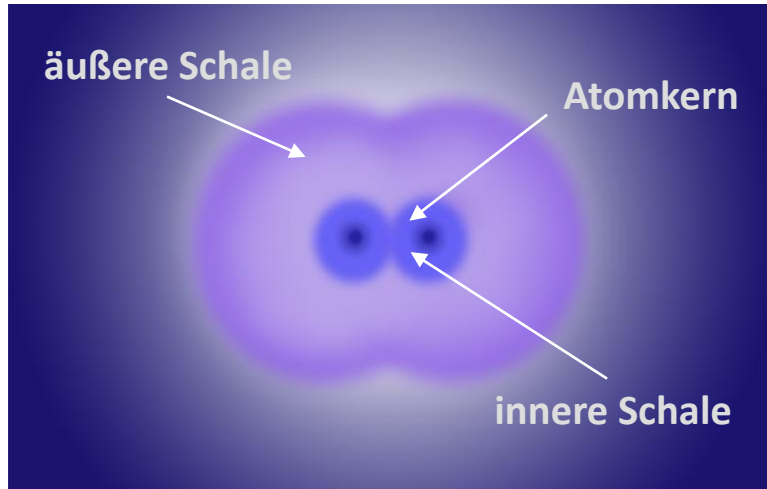
**Impuls von Teilchen (oder Photonen):**

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

**Wellenlänge von Materiewellen:**

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

# Wie entstehen die Moleküle?

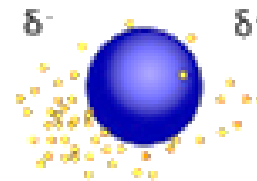


**Abstoßung**

**(innere Schale, Atomkerne) Anziehung = Abstoßung**



**Gleichgewicht**



**Anziehung**

**(äußere Schale)**

$$E_{pot} = E_{anziehend} + E_{abstoßend}$$

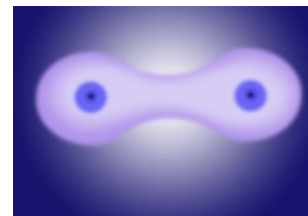
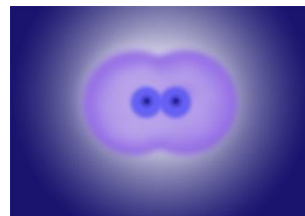
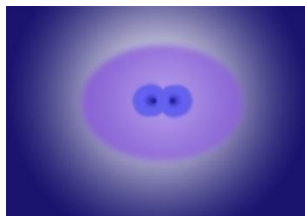
$$E_{pot} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

A, B: Interaktionskonstanten (atomspezifisch)

**n (anziehend) < m (abstoßend)**

$r_0$ : Bindungsabstand

$E_b$ : Bindungsenergie



# Primäre chemische Bindungen

- **kovalente Bindung:** gemeinsamer Elektronenzustand um die beteiligten Kerne, stark:  $E_b > 1\text{eV}$
- **Metallbindung:** mehratomiges System,  $E_b > 1\text{eV}$
- **Ionenbindung:** Coulomb-Kräfte zwischen Ionen,  $E_b > 1\text{eV}$

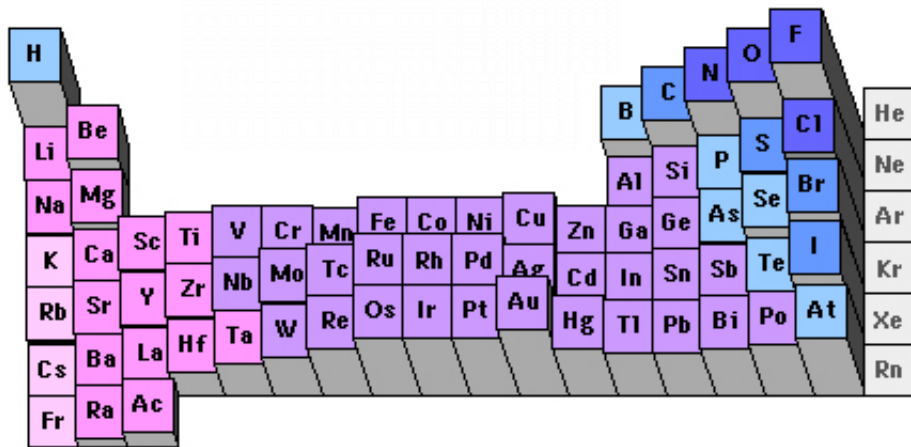
„Tendenz eines Atoms, Elektronen anzuziehen“

Der Typ hängt von der **Elektronegativität (EN)** ab

$$EN = |E_i| + |E_{ea}|$$

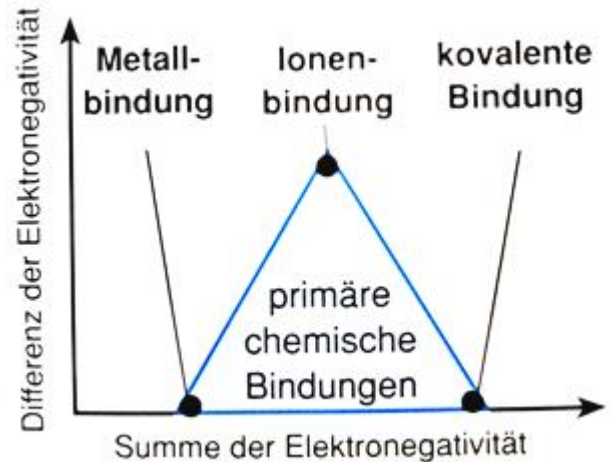
Ionisierungsenergie

Elektronenaffinität



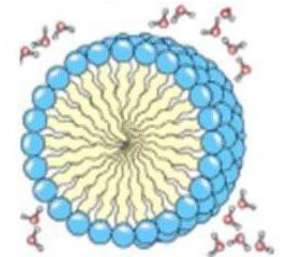
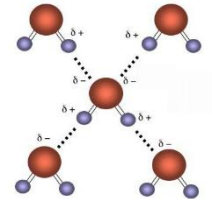
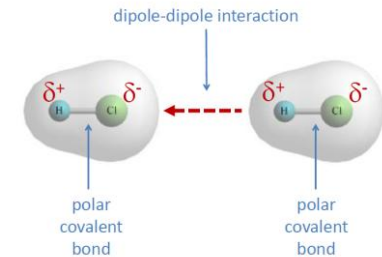
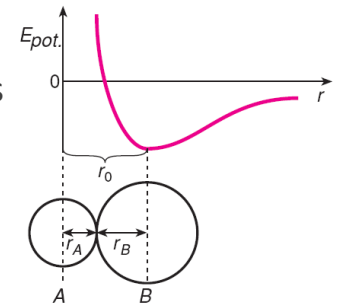
- < 1.0
- 1.0 – 1.4
- 1.5 – 1.9
- 2.0 – 2.4
- 2.5 – 2.9
- 3.0 – 4.0

EN-Werte nach Pauling



# Sekundäre chemische Bindungen

- **Van der Waals:** zwischen zwei apolaren Atomen (ohne permanentes Dipolmoment), wo ein vorübergehend erzeugter Dipol mit einem apolaren Molekül oder Atom wechselwirkt und es so in einen Dipol (induzierter Dipol) umwandelt
  - Van der Waals Radius:  $r_0 = r_A + r_B$
  - Intermolekular oder intramolekular
  - Wichtige biologische Rolle: Bildung organischer Strukturen
  - Schwach: ( $E_b \sim 0,02$  eV)
- **Dipol-Dipol-Wechselwirkung:** In einem (bestimmten Teil eines) Moleküls liegt eine konstante Ladungsverteilung vor
  - teilweise werden (+) und (-) Segmente durch elektrostatische Wechselwirkungen (Coulomb-Kräfte) zusammengehalten
  - Intra-/intermolekular
  - schwache Wechselwirkung ( $E_b = 0,003-0,02$  eV)
- **H-Bindung:** Das H-Atom verbindet zwei andere Atome (F, O, N) mit hoher Elektronegativität
  - $r \sim 0,23 - 0,35$  nm
  - $E_b \sim 0,2$  eV
- **Hydrophobe Wechselwirkung:** schwache Van-der-Waals-Wechselwirkung ( $E_b = 0,003 - 0,02$  eV), die thermische Bewegung ( $kT \sim 0,025$  eV) könnte das System zerstören.
  - geordnete Wassermoleküle schließen die apolaren Strukturen aus (Kontaktfläche kann minimiert werden)



# Energiezustände in Molekülen

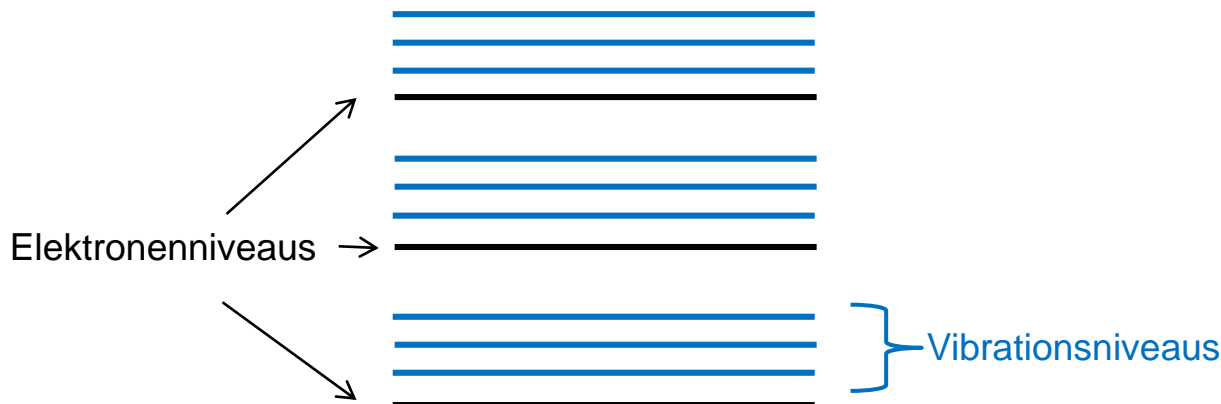
Durch primäre und sekundäre Bindungen (Wechselwirkungen) →

- Moleküle
- Aggregatzustände (flüssige und feste Körper)

$$E_{\text{Molekül}} = E_{\text{Elektron}} + E_{\text{Vibration}} + E_{\text{Rotation}}$$

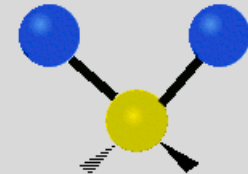
$\approx 1 \text{ eV}$        $\approx 0,1 \text{ eV}$        $\approx 0,01 \text{ eV}$

- alle Energieformen sind quantisiert

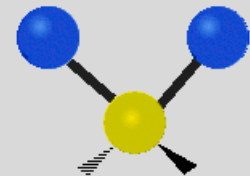


(Rotationsniveaus sind nicht gezeigt.)

Beispiele für Vibrationen:



Symmetrische Valenzschwingung



Deformationschwingung

# Hausaufgaben

Aufgabensammlung

1.17 - 1.21

## Feedback