

Biophysik für Pharmazeuten I.

2014. 09. 22. Struktur der Materie

Tölgyesi Ferenc

Hausaufgaben:

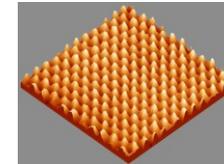
Neue Aufgabensammlung : 1.17–18, 22–23, 26–28, 31–32, 34, 35, 38, 40, 47, 49, 50, 52



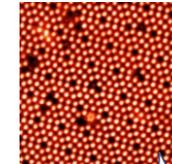
1

Atomarer Aufbau der Materie

- Demokritos 5.Jht v.Chr.
- Daltonsches Gesetz 1803
- Moderne Mikroskope:



Graphit



Si-Kristall mit Defekten

Was hält die Atome zusammen?
Warum ist eine Struktur stabil?

2

I. Atomare, molekulare Wechselwirkungen

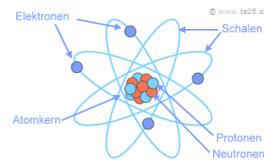
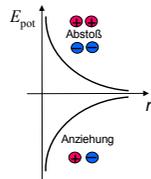
1. Im Allgemeinen über Wechselwirkungen

- Kraft, die newtonschen Gesetze und Beispiele für Kraftgesetze
- Arbeit und Energie
- Energieerhaltung
- Leistung
- Druck
- Elektrische Wechselwirkung – Coulomb-Gesetz

Vorkenntnisse (s. „Physikalische Grundlagen ...“)

2. Elektrische Wechselwirkung

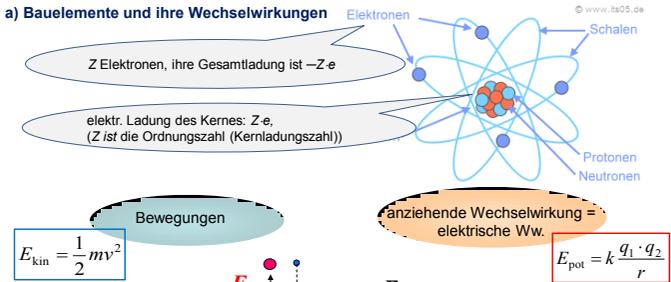
- elektrische potenzielle Energie (E_{pot}) $E_{\text{pot}} = k \frac{q_1 \cdot q_2}{r}$



3

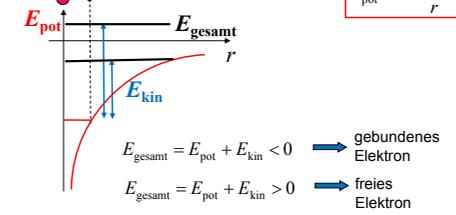
3. Aufbau des Atoms

a) Bauelemente und ihre Wechselwirkungen



$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}mv^2$$

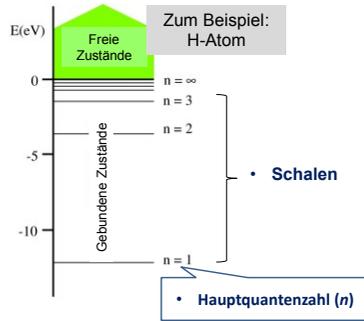
$$E_{\text{pot}} = k \frac{q_1 \cdot q_2}{r}$$



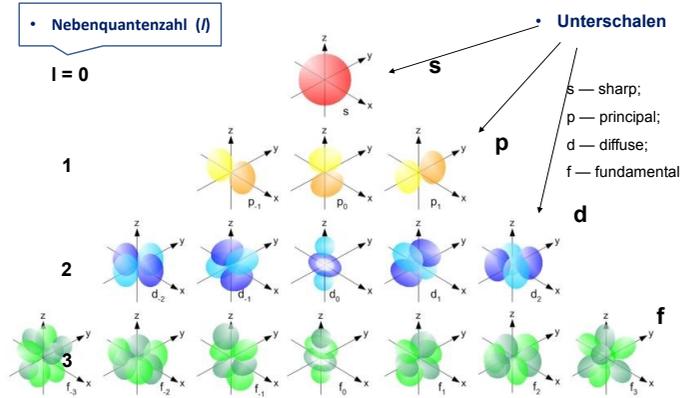
4

b) Energiezustände

Spezielle Eigenschaft der Mikrowelt:
— diskrete Energiezustände



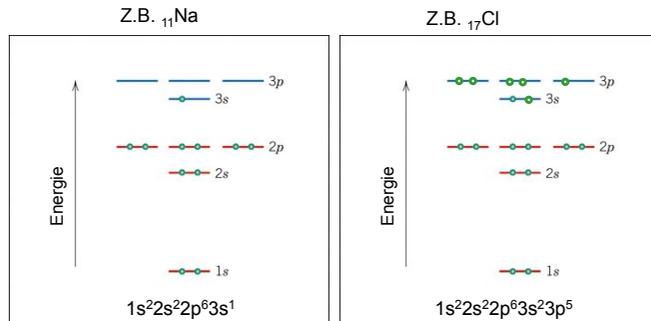
5



Weitere Prinzipien bei der Besetzung der Energiezustände (Schalen, Unterschalen):

- **Energieminimum**
- **Pauli-Prinzip**

6



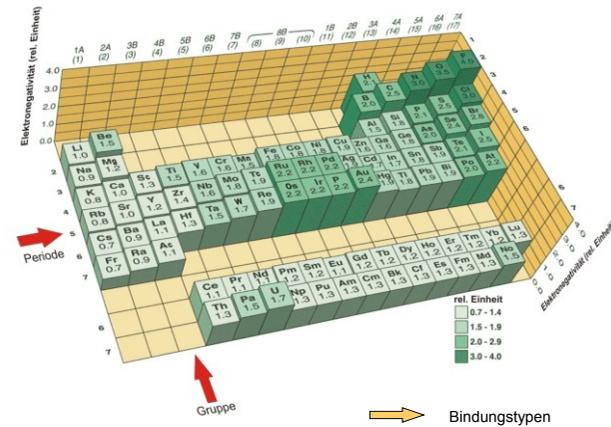
• **Ionisierungsenergie (I):**
Zur Entfernung des äußersten Elektrons benötigte Energie (eV/Atom; kJ/mol)

• **Elektronenaffinität (A):**
Bei der Aufnahme eines Elektrons freigesetzte Energie (eV/Atom; kJ/mol)

c) **Elektronegativität** = $|I| + |A|$

7

Elektronegativität - Pauling-Skala:

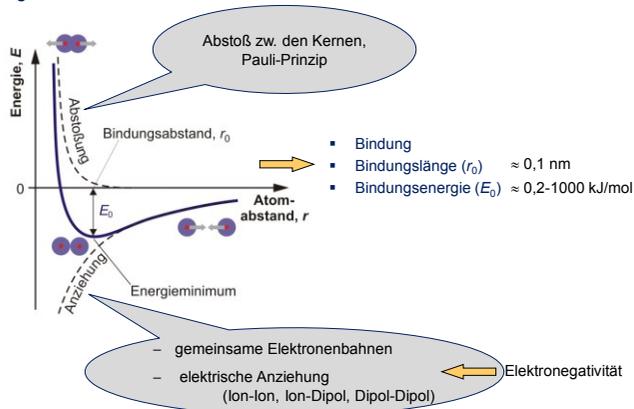


→ Bindungstypen

8

4. Atome, molekulare Wechselwirkungen

a) Energiekurve

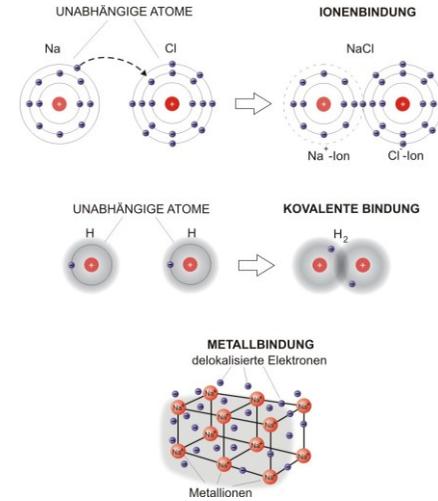


9

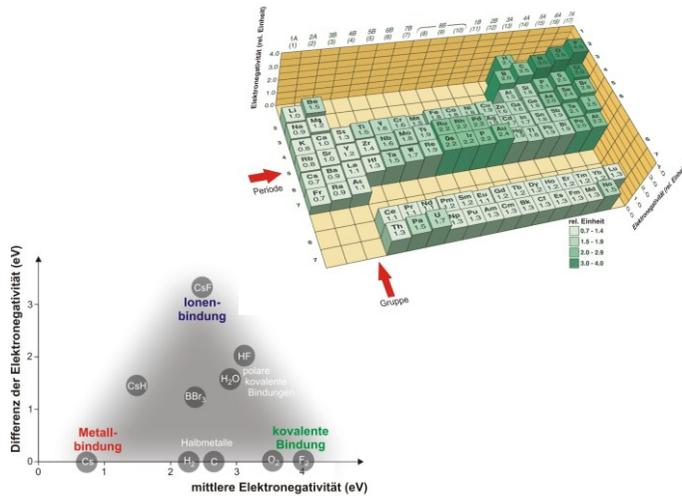
b) Primäre Bindungen

- Ionenbindung
- Kovalente Bindung
- Metallbindung

≈ 100 -1000 kJ/mol



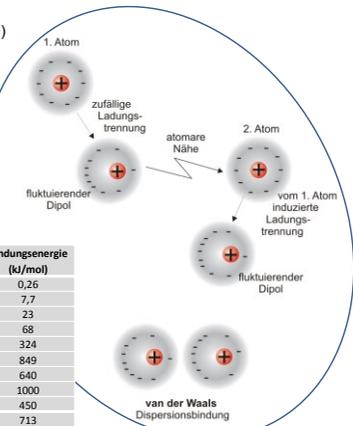
10



11

c) Sekundäre Bindungen $\approx 0,2$ -50 kJ/mol

- van der Waals (Dipol-Dipol)
 - Orientierung (2 permanente Dipole)
- Induktion (1 permanenter und 1 induzierter Dipol)
- Dispersion
- H-Brückenbindung



Bindungsstärke	Bindungstyp	Material	Bindungsenergie (kJ/mol)
schwach (sekundär)	van der Waals	Neon (Ne)	0,26
		Argon (Ar)	7,7
	H-Bindung	Wasser (H ₂ O)	23
stark (primär)	Metallbindung	Quecksilber (Hg)	68
		Aluminium (Al)	324
		Wolfram (W)	849
	Ionenbindung	NaCl	640
		MgO	1000
	Kovalente Bindung	Silizium (Si)	450
		Kohlenstoff (C, Diamant)	713

12

Primäre und sekundäre Bindungen



- Moleküle
- Aggregatzustände (flüssige und feste Körper)

5. Energiezustände in Molekülen

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

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

• alle Energieformen sind quantiert

Z. B. Vibrationen

stretching

Elektronenniveaus

Vibrationsniveaus

(Rotationsniveaus sind nicht gezeigt.)

13

II. Aggregatzustände

1. Allgemeine Beschreibung

Temperature axis T with arrow pointing right.

	Fest	Flüssig	Gasförmig
Eigenvolumen	+	+	-
Eigenform	+	-	-

flüssiges H₂O WASSER

gasförmiges H₂O DAMPF

festes H₂O EIS

14

2. Einige grundlegenden Größen zur Beschreibung von Körpern:

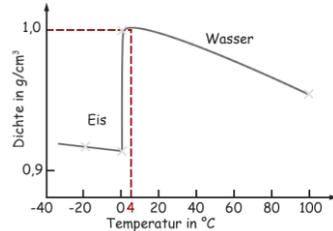
- Zahl der Bauelemente (Atome oder Moleküle) im Körper (N)
 - Stoffmenge (ν) in Mol: 1 mol enthält $6,03 \cdot 10^{23}$ Bauelemente
- $\nu = \frac{N}{N_A}$

Avogadro-Konstante (N_A): $N_A = 6,03 \cdot 10^{23} \text{ 1/mol}$

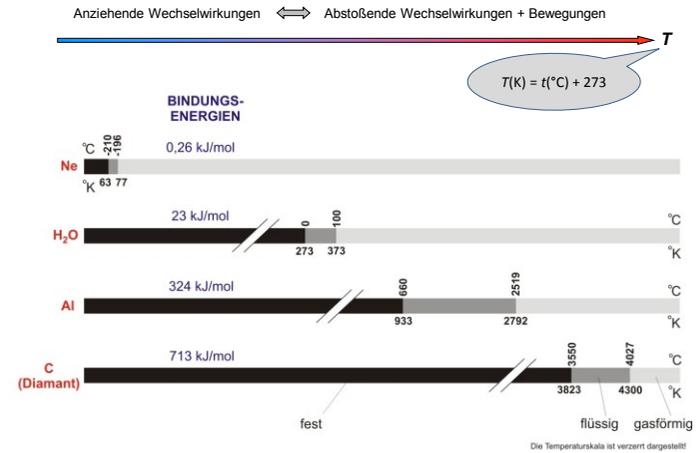
- Masse (m)
 - Molare Masse (M): die Masse von einem Mol
- $m = \nu \cdot M$
- Volumen (V)
 - Dichte (ρ): $\rho = \frac{m}{V} \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right)$

Stoff	$\rho \text{ (g/cm}^3\text{)}$
Wasser	1
Fettgewebe	$\approx 0,9$
Blut	$\approx 1,05$
Knochen	$\approx 1,8$
Körpergewebe (Mittelwert)	$\approx 1,04$

Temperaturabhängigkeit der Dichte - $\rho(T)$:



15

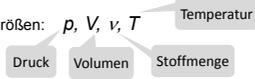


16

2. Gasförmiger Aggregatzustand

a) Makroskopische Beschreibung:

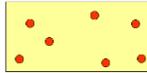
- Kein Eigenvolumen und keine Eigenform
- Isotrop
- Messbare Größen: p, V, v, T



allgemeine Gaskonstante
 $R = 8,31 \text{ J/(molK)}$
 $pV = \nu RT$ (für ideale Gase)

b) Mikroskopische Beschreibung:

- Ungeordnet
- Starke und fast freie Bewegungen



c) Kinetische Deutung der Temperatur:

durchschnittliche kinetische Energie eines Teilchens

$$\overline{E}_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \overline{v}^2 = \frac{3}{2} kT$$

Boltzmann-Konstante
 $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$
 Temperatur

Masse eines Teilchens
 Geschwindigkeit des Teilchens

$kT = \text{„thermische Energie“}$

17

Eine andere Form:

durchschnittliche kinetische Energie von einem Mol

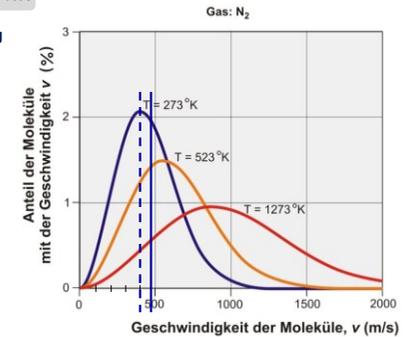
$$\overline{E}_{\text{kin, mol}} = \frac{1}{2} M \overline{v}^2 = \frac{3}{2} RT$$

Molare Masse

Allgemeine Gaskonstante
 $R = 8,34 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$

$RT = \text{„molare thermische Energie“}$

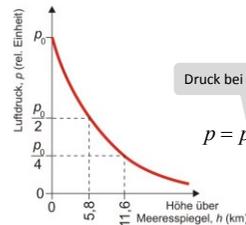
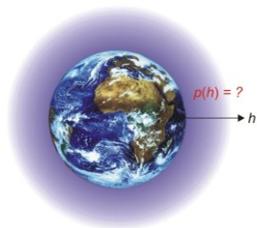
d) Maxwell-Boltzmann-Verteilung



18

e) Barometrische Höhenformel (Gas im Gravitationsfeld)

Gravitation \leftrightarrow Bewegung



Druck bei $h = 0$

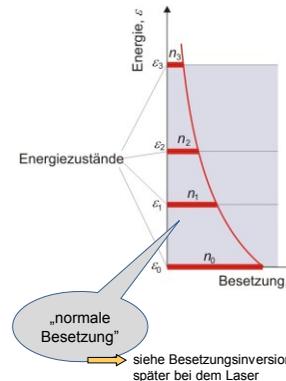
$$p = p_0 \cdot e^{-\frac{mgh}{kT}}$$

Nur im thermischen Gleichgewicht!!

19

f) Boltzmann-Verteilung

Die Verteilung der Teilchen auf die Energiezustände im thermischen Gleichgewicht ($T = \text{konstant}$).



$$n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta \epsilon}{kT}}$$

$$\left[\begin{array}{l} n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta \epsilon}{RT}} \\ \Delta \epsilon = \Delta \epsilon \cdot N_A \\ R = k \cdot N_A \end{array} \right]$$

Anwendungen der Boltzmann-Verteilung:

- Barometrische Höhenformel
- Thermische Elektronenemission von Metallen
- Konzentrationselemente, Nernst-Gleichung
- Chemische Reaktionen (Geschwindigkeits- und Gleichgewichtskonstante)
- Konzentration von thermischen Punktdefekten (in Kristallen und Makromolekülen)
- Elektrische Leitfähigkeit von Halbleitern
- ...

(Gilt aber nicht z. B. bei der Besetzung der Elektronenschalen in einem Atom!)

20

3. Flüssiger Aggregatzustand

a) Makroskopische Beschreibung:

- Eigenvolumen aber keine Eigenform
- Isotrop
- Viskosität (s. später bei Transportprozessen)

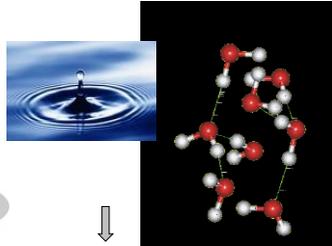
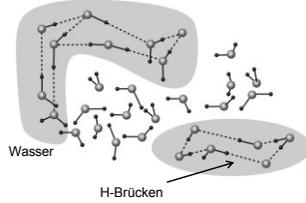


Keine Eigenform:
Nach Deformieren bleibt so,
es gibt keine rückstellende
Scherkräfte.

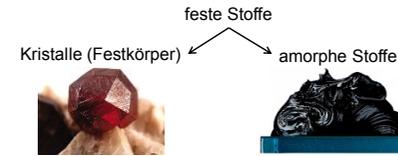
Eigenform:
Nach Deformieren stellt sich
zurück, da es rückstellende
Scherkräfte gibt.

b) Mikroskopische Beschreibung:

- Dynamische Nahordnung
- Mittelstarke Bewegungen



21



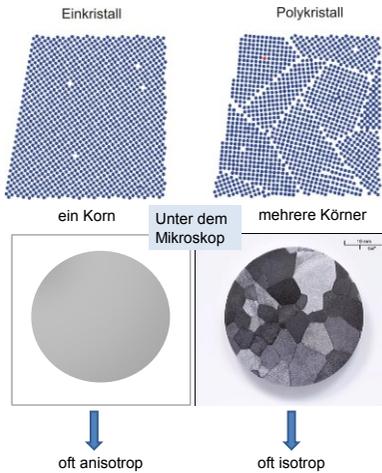
4. Fester Aggregatzustand - Kristalle

a) Makroskopische Beschreibung:

- Eigenvolumen, Eigenform
- Einkristalle: oft anisotrop; Polykristalle: isotrop



22



23

b) Mikroskopische Beschreibung:

- Fernordnung
- Periodizität – Kristallgitter
- Schwache Bewegungen (Schwingungen)

Elementarzelle Kristallgitter

Zum Beispiel: kubisch hexagonal

24

c) Kristalltypen:

- Atomkristall (kovalente Bindung)
- Ionenkristall (Ionenbindung)



Diamant



Salz

- Metallkristall (Metallbindung)



Gold

- Molekülkristall (sekundäre Bindung)

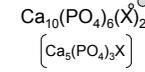
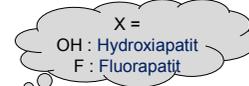


Eis

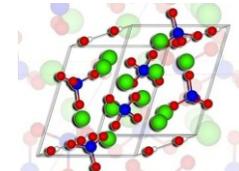
Bindungsenergie (E_b) \rightarrow Eigenschaften, wie Schmelzpunkt, Schmelzwärme, Steifigkeit, Wärmeausdehnungskoeffizient, ...

25

d) Apatit



- ein hexagonales Ionenkristall
- anorganische Substanz der harten Gewebe (Knochen, Dentin, Zahnschmelz)
- etwa 2/3 des Knochengewebes



Dentin, Knochen: 20-60 nm x 6 nm große Kristalle
 Zahnschmelz: 500-1000 nm x 30 nm große Kristalle

26

e) Gitterfehler:

- Punktfehler

- Thermische Fehler

- Leerstelle (Vakanz, Schottky-Defekt)
- Interstitium (Zwischengitteratom)
- Frenkel-Defekt

Zahl der Schottky-Defekte (n_s):

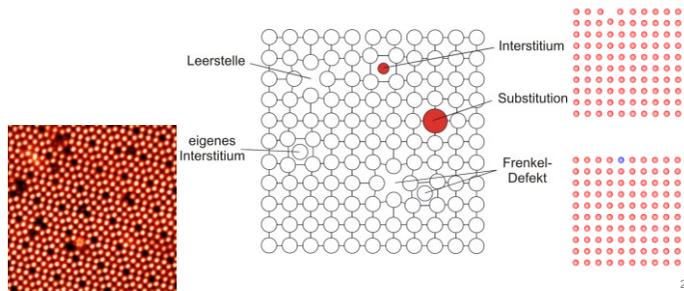
Aktivierungsenergie (\approx Bindungsenergie)

$$n_s = N \cdot e^{-\frac{E_s}{kT}}$$

- Fremdatome (chemische Fehler, Dotierung)

- Substitutionsatom
- Interstitielles Atom (Interstitium)

Zahl der besetzten Gitterstelle (\approx Zahl der Atome)



27

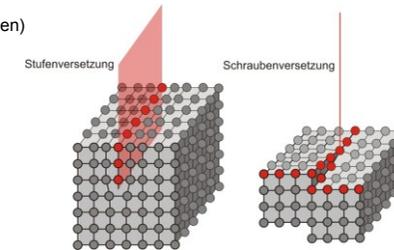
Thermische Fehler in biologischen Makromolekülen:

Zahl der aufgespaltenen H-Brücken

$$n_s = N \cdot e^{-\frac{E_s}{kT}}$$

Zahl der intakten H-Brücken

- Versetzungen (Dislokationen)



28

Gitterfehler \Rightarrow Eigenschaften!!



29

5. Fester Aggregatzustand - amorphe Stoffe

Z.B. Glas, Harz, Wachs, Bitumen,

a) Makroskopische Beschreibung:

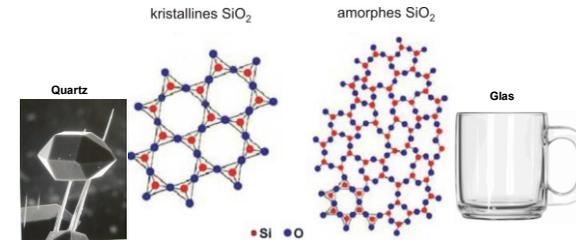
- Eigenvolumen aber keine Eigenform
- Isotrop
- sehr hohe Viskosität



b) Mikroskopische Beschreibung:

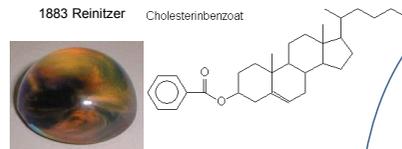
- Nahordnung
- Schwache Bewegungen

= Eingefrorene Flüssigkeiten, Gläser !



30

6. Flüssigkristalle - Mesophase zw. dem festen und flüssigen Zustand

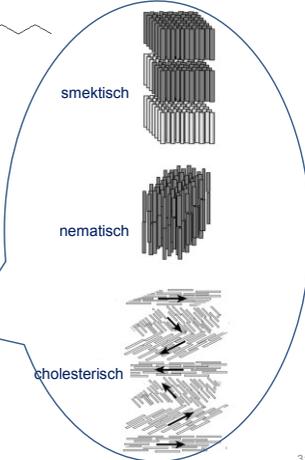


a) Makroskopische Beschreibung:

- Eigenvolumen aber keine Eigenform
- Optische Anisotropie
- Eigenschaften sind empfindlich gegen schwache äußere Einwirkungen

b) Mikroskopische Beschreibung:

- Teilweise geordnete Strukturen (Orientierung, Schichten)



31

c) Anwendungen von Flüssigkristallen:

Kontaktthermographie/Plattenthermographie

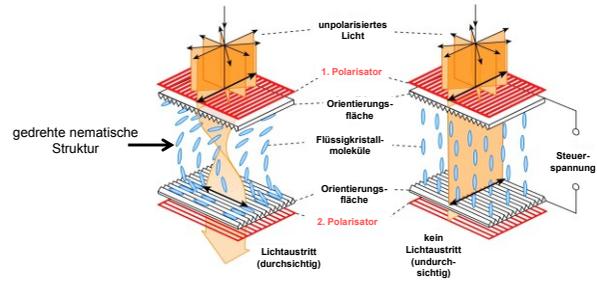
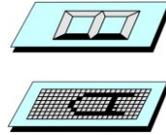
Grundlage: thermo-optisches Phänomen (bei Temperaturänderungen ändern sich die optischen Eigenschaften)



32

LCD (liquid crystal display)

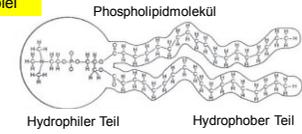
Grundlage: elektro-optisches Phänomen
(durch elektrisches Feld ändern sich die optischen Eigenschaften)



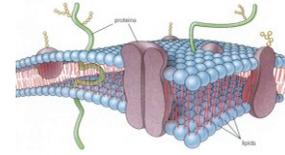
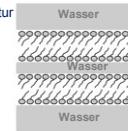
→ Erklärung siehe später bei den Wechselwirkungen zwischen Licht und Materie!

33

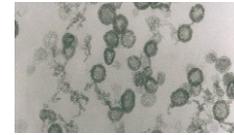
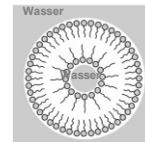
d) Lyotrope Flüssigkristalle: Beispiel



Lamellare Struktur



Liposom



34