

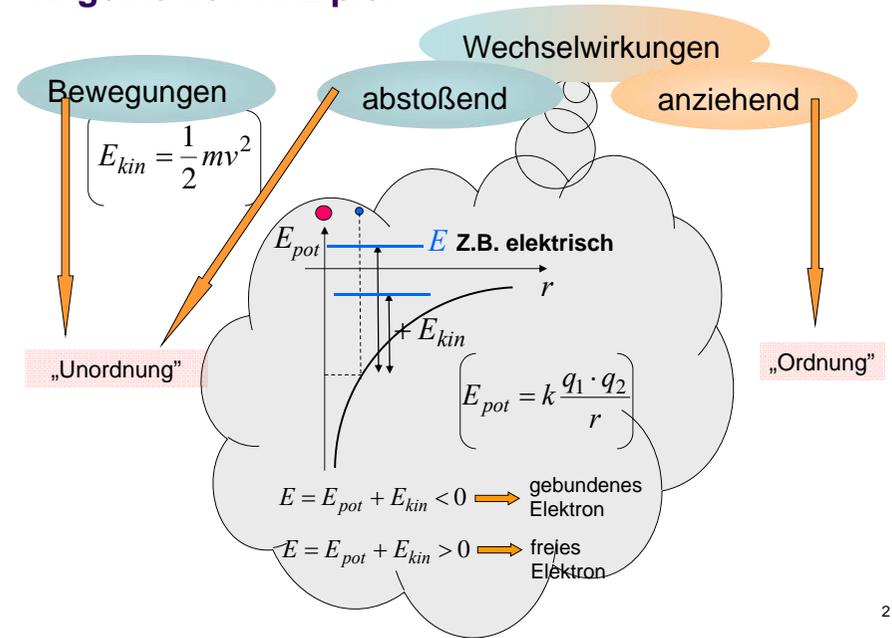
Biophysik für Pharmazeuten I.

2016/17
Vorlesung 3

Struktur der Materie

1

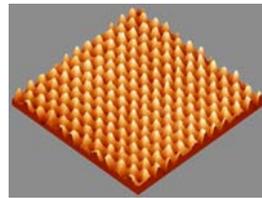
Allgemeine Prinzipien



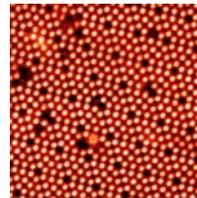
2

Atomarer Aufbau der Materie

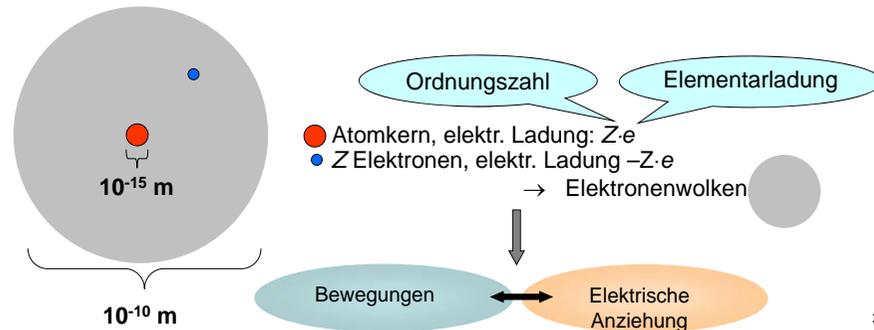
- Demokritos 5. Jht v. Chr.
- Dalton'sches Gesetz 1803
- Moderne Mikroskope:



Graphit



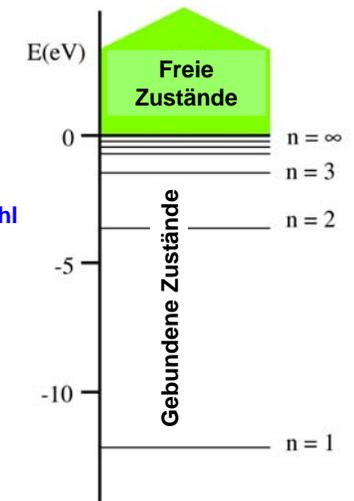
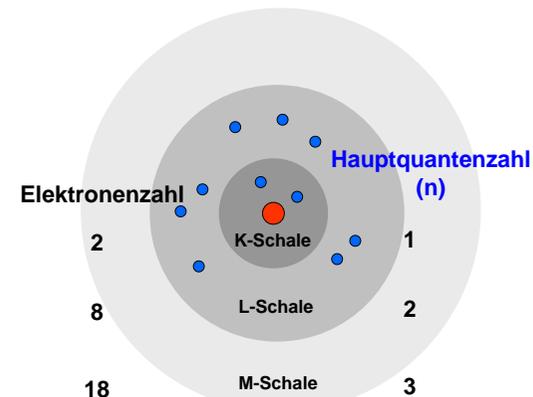
Si Kristall mit Defekten



3

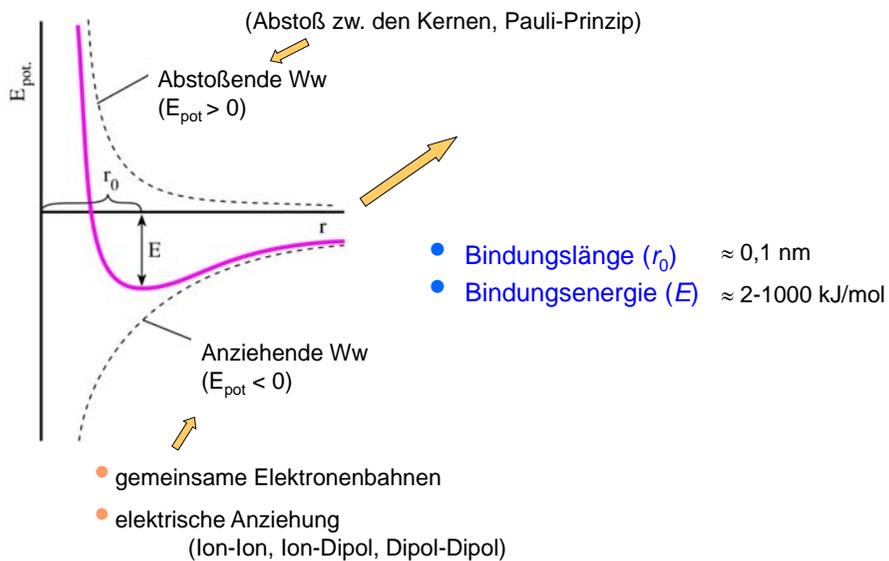
- Energieminimum
- Diskrete Energiezustände
- Pauli-Prinzip

Eine „neue“ Maßeinheit:
Elektronenvolt (eV), es gilt
 $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$



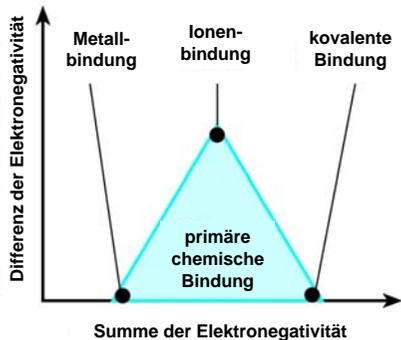
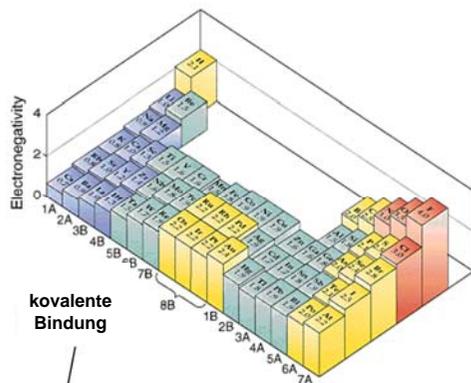
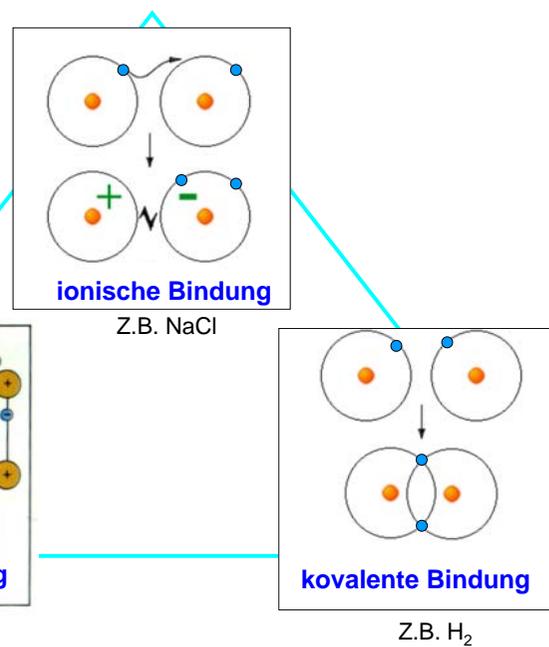
4

Atomare Wechselwirkungen



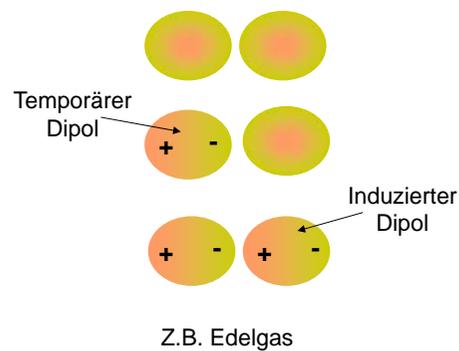
Bindungstypen

- primäre ≈ 100 kJ/mol
 - kovalente
 - metallische
 - ionische

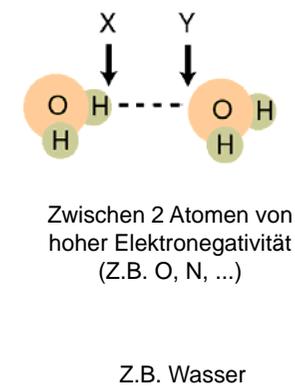


- sekundäre ≈ 10 kJ/mol
 - van der Waals (Orientierung, Induktion, Dispersion)
 - H-Brückenbindung

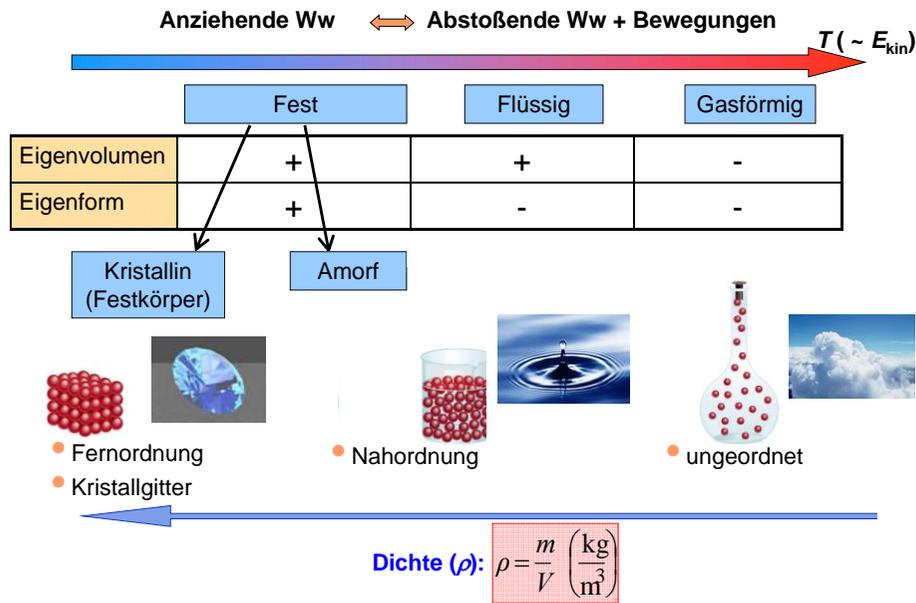
van der Waals Bindung (Dispersionskräfte)



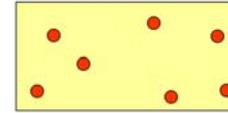
H-Brückenbindung



Aggregatzustände



Gase



Makroskopische Beschreibung:

- Kein Eigenvolumen und keine Eigenform
- Isotrop
- Messbare Größen:

Druck Volumen Stoffmenge
 p, V, ν, T Temperatur

$$pV = \nu RT$$

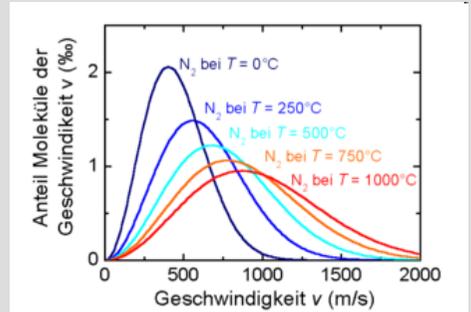
(Für ideale Gase: punktförmige Atome ohne Wechselwirkungen)

Mikroskopische Beschreibung:

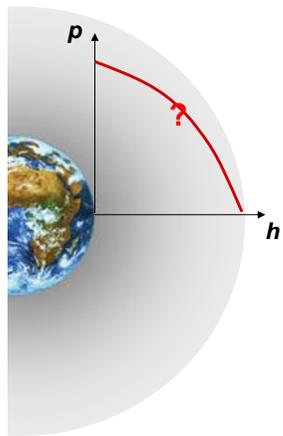
- Ungeordnet
- Starke und fast freie Bewegung

$$\frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT$$

Maxwell-Boltzmann-Verteilung

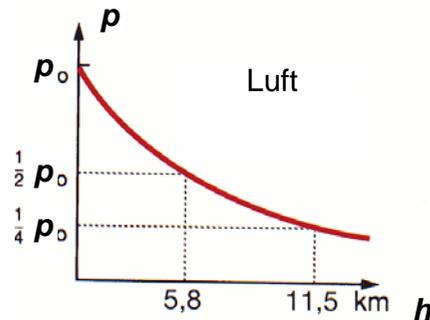


Gas im Gravitationsfeld – barometrische Höhenformel:



Im thermischen Gleichgewicht:

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



Boltzmann-Verteilung im Allgemeinen

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

$$\frac{n_i}{n_0} = \frac{e^{-\frac{\epsilon_i}{kT}}}{e^{-\frac{\epsilon_0}{kT}}} \quad \left. \begin{matrix} \epsilon_i \\ \epsilon_0 \end{matrix} \right\} \Delta\epsilon$$

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

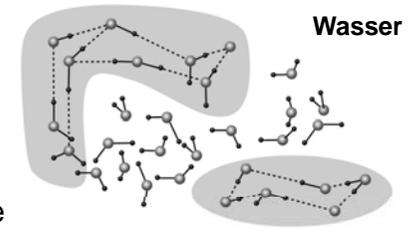
$$n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta\epsilon}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E}{RT}}$$

$$\left(\begin{matrix} \Delta E = \Delta\epsilon \cdot N_A \\ R = k \cdot N_A \end{matrix} \right)$$

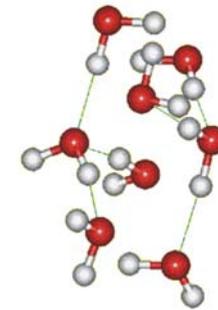
Anwendungen:

- 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
- ...

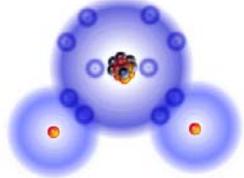
Flüssigkeiten



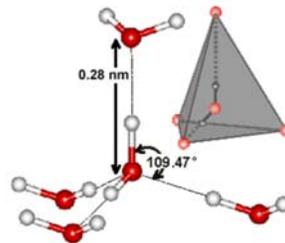
- Eigenvolumen
- Keine Eigenform/flüssig – keine innere Scherkräfte
- Nahordnung
einige nm große geordnete dynamische Bereiche
- Viele Strukturdefekte
- mittelstarke Bewegungen
- Isotrop



Wasser



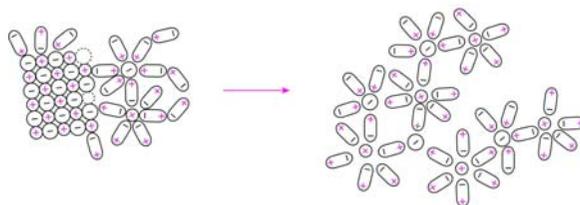
Dipol



➤ hohe spezifische Wärmekapazität, Schmelzwärme und Verdampfungswärme

➤ hohe Oberflächenspannung

➤ gutes Lösungsmittel



Feste Körper

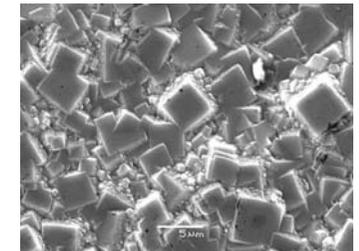
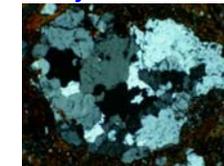
(Kristall = Festkörper)

Kristalline Stoffe

Amorphe Stoffe

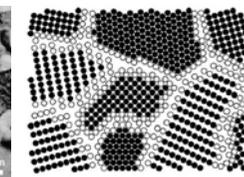
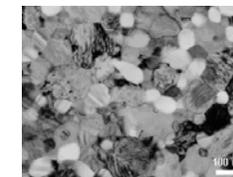
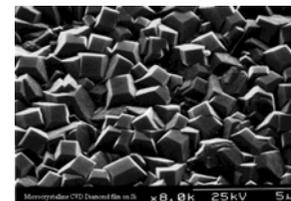
Einkristalle

Polykristalle



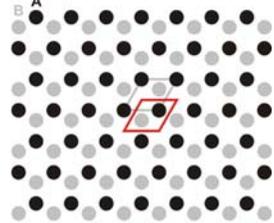
Mikrokristalline Stoffe

Nanokristalline Stoffe



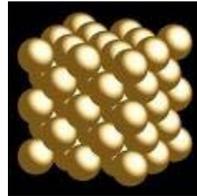
Festkörper (Kristalle)

- Eigenvolumen/Eigenform
- Fernordnung
geordnete Struktur in makroskopischen Bereichen
- Periodizität, Elementarzelle, Kristallgitter
- Wenig Defekte
- Schwache Bewegungen
- Oft anisotrop



Kristallgitter
(Raumgitter)

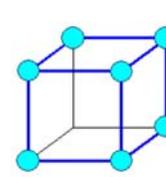
Elementarzelle



17

Raumgitter (Kristallklassen)

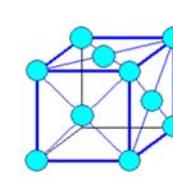
kubisch



einfach

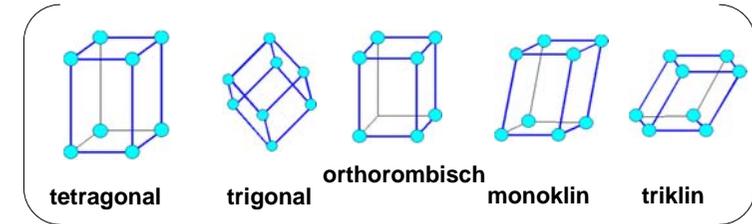
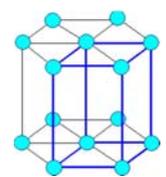


raumzentriert



flächenzentriert

hexagonal



tetragonal

trigonal

orthorombisch

monoklin

triklin

18

Kristalltypen

- Atomkristall



Diamant



Si

- Ionenkristall



Salz



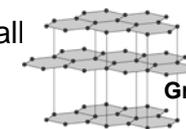
Apatit

- Metallkristall



Gold

- Molekülkristall



Graphit



Eis

Eiweiß (Lysozym)



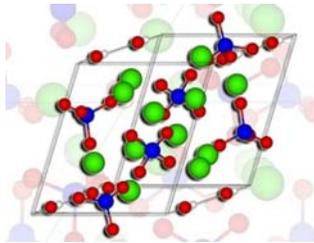
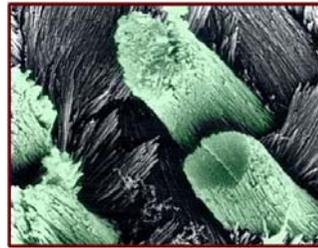
19

20



Apatit

OH : Hydroxiapatit
F : Fluorapatit



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

Gitterdefekte

• Punktdefekte

- thermisch
 - Vakanz/Leerstelle (Schottky-Defekt)
 - Interstitielles Atom (Zwischengitteratom)
- Fremdatom
 - An einer Gitterstelle (Substitutionsatom)
 - An einer Zwischengitterstelle (interstitielles Atom)

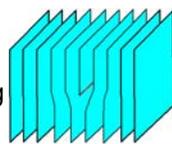
$n_S = N \cdot e^{-\frac{\epsilon_s}{kT}}$

Zahl der Schottky-Defekte

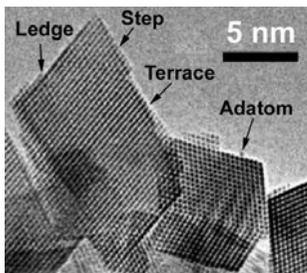
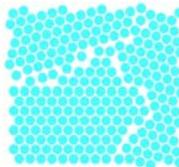
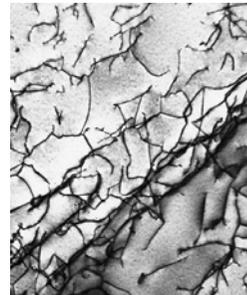
Frenkel-Defekt

s. Legierungen !!

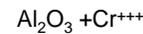
- Versetzungen
 - Stufenversetzung
 - Schraubensversetzung
- Korngrenzen



Versetzungen in einer Ti-Legierung

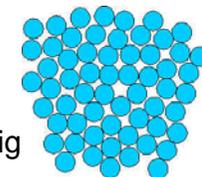


Gitterdefekte ⇒ Eigenschaften!!



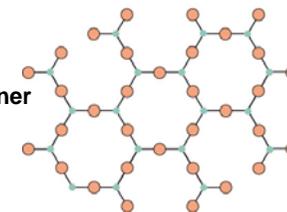
Amorphe (feste) Körper

- Eigenvolumen
- Mechanisch hart
- Keine Eigenform/flüssig
sehr hohe Viskosität;
„gefrorene Flüssigkeit“
- Nahordnung
- Viele Defekte
- Isotrop

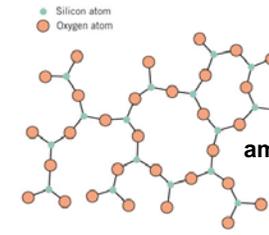


Z.B. Glas, Harz, Wachs, Bitumen, ...

kristalliner SiO₂

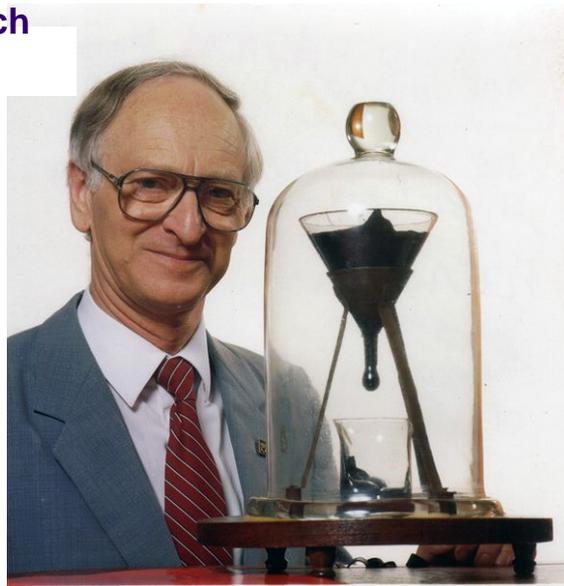


amorpher SiO₂



Längster Versuch der Welt

- Pechtropfen-Experiment
- In 1927 gestartet
- 9 Tropfen

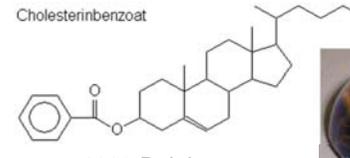


<https://de.wikipedia.org/wiki/Pechtropfenexperiment>

<http://www.nature.com/news/world-s-slowest-moving-drop-caught-on-camera-at-last-1.13418>

Flüssigkristalle

Cholesterinbenzoat



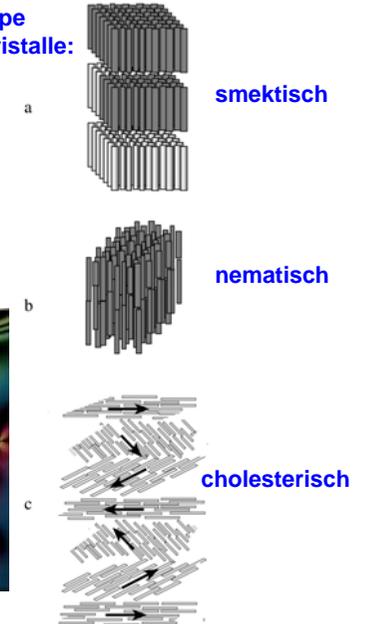
1883 Reinitzer



- Anisodimensionale Moleküle
- Mesophase
- Flüssig
- Teilweise geordnete Strukturen
- Optisch anisotrop
- Gegen äußere Einwirkungen empfindliche Struktur



Termotrope Flüssigkristalle:

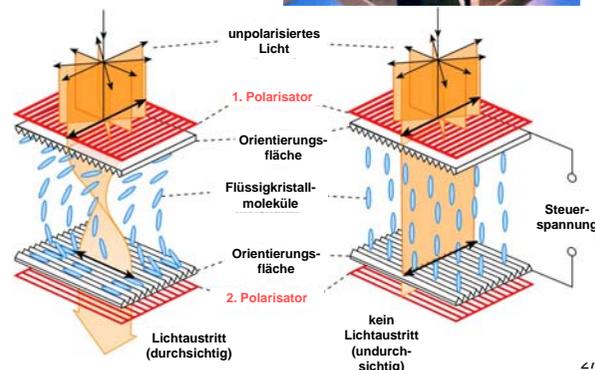
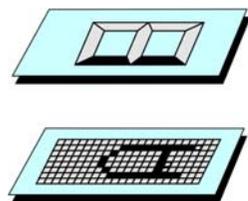


26

Kontaktthermographie/Plattenthermographie (thermo-optisches Phänomen)

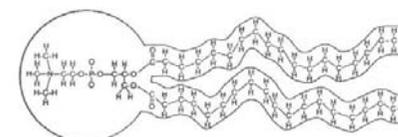


LCD (elektro-optisches Phänomen)



27

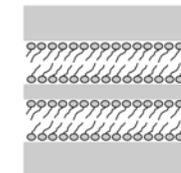
Lyotrope Flüssigkristalle:



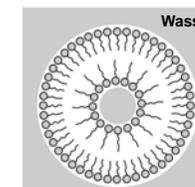
hydrophil

hydrophob

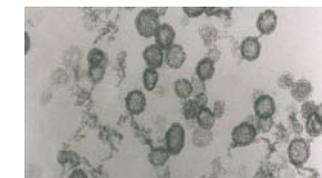
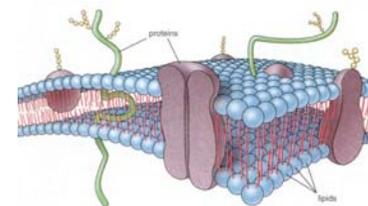
Phospholipidmolekül



Lamellare Struktur



Liposom



28