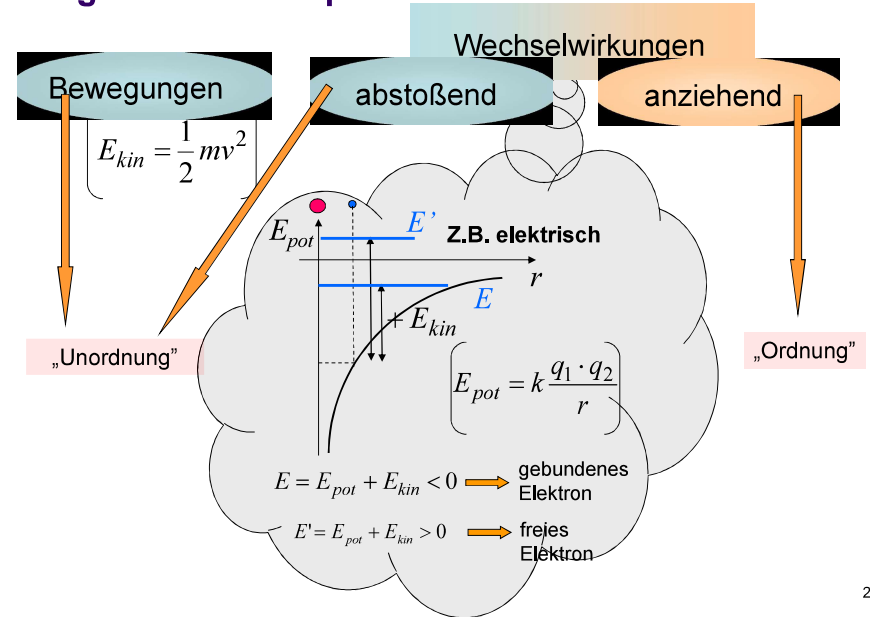


# Biophysik für Pharmazeuten I.

2018/19  
Vorlesung 4

## Struktur der Materie

## Allgemeine Prinzipien

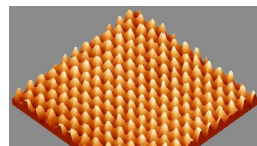


1

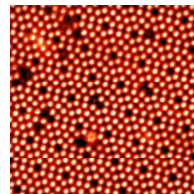
2

## Atomarer Aufbau der Materie

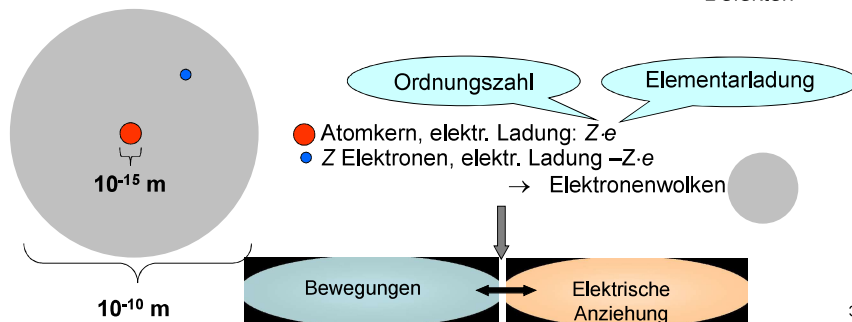
- Demokritos 5. Jht v. Chr.
- Daltonsches Gesetz 1803
- Moderne Mikroskope:



Graphit



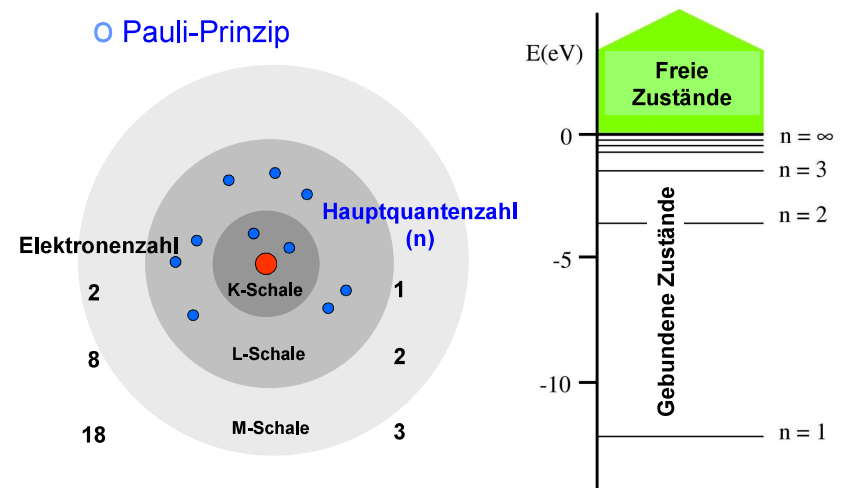
Si Kristall mit Defekten



3

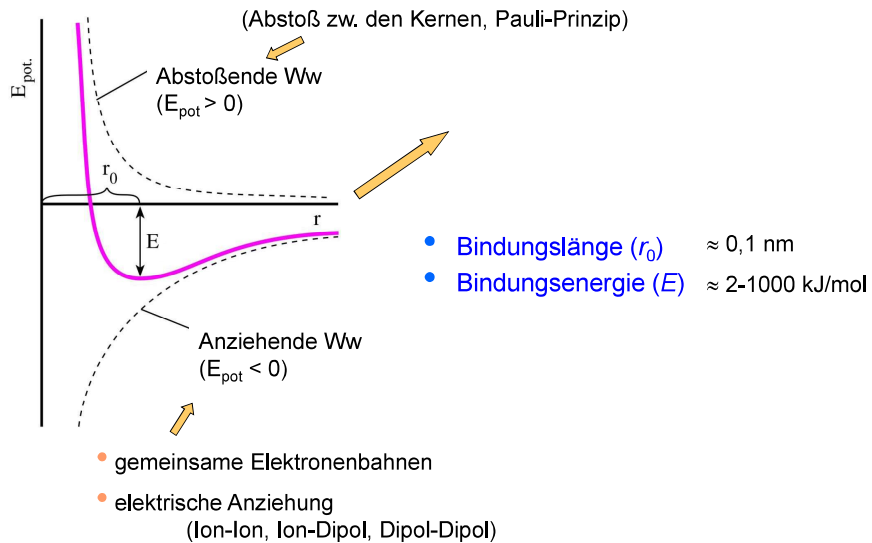
- Energieminimum
- Diskrete Energiezustände
- Pauli-Prinzip

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



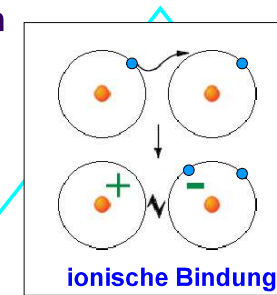
4

## Atomare Wechselwirkungen

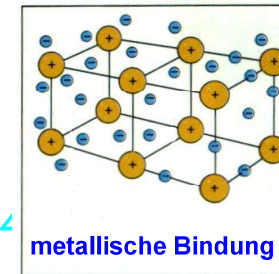


## Bindungstypen

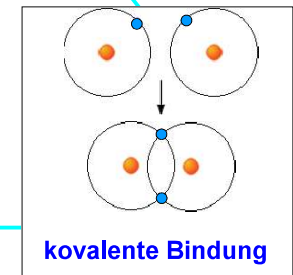
- primäre  
 $\approx 100 \text{ kJ/mol}$ 
  - kovalente
  - metallische
  - ionische



Z.B. NaCl

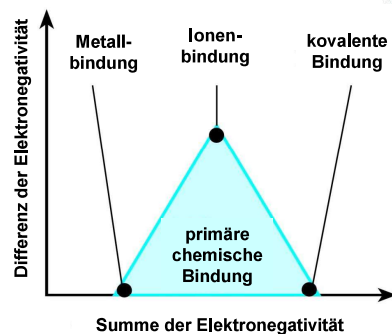
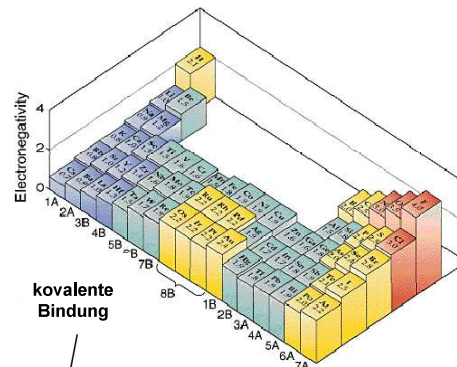


Z.B. Na



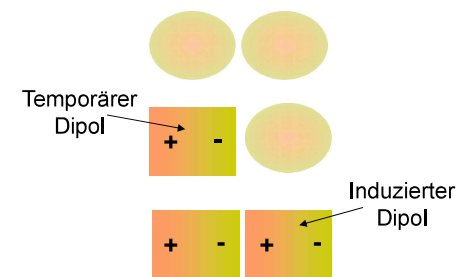
Z.B. H<sub>2</sub>

6



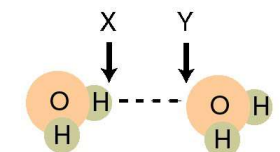
- sekundäre  $\approx 10 \text{ kJ/mol}$ 
  - van der Waals (Orientierung, Induktion, Dispersion)
  - H-Brückenbindung

### van der Waals Bindung (Dispersionskräfte)



Z.B. Edelgas

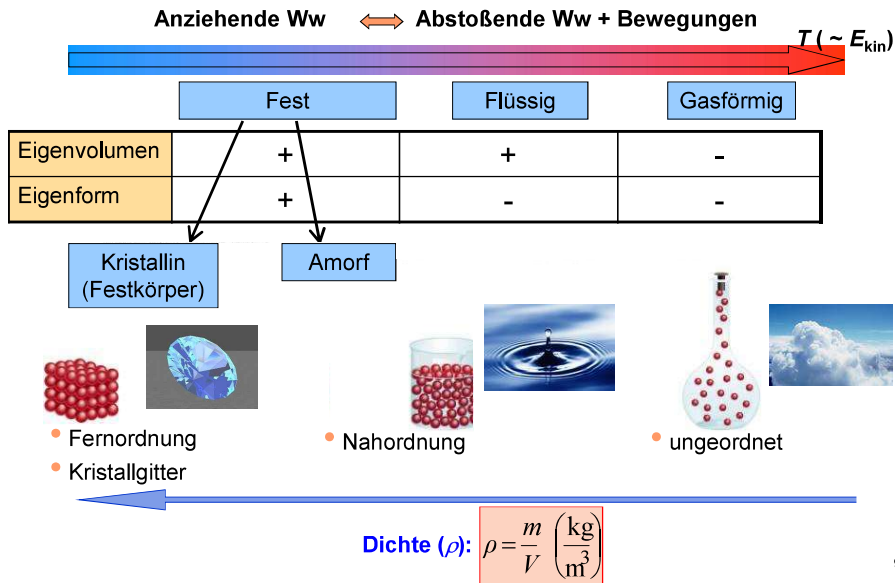
### H-Brückenbindung



Zwischen 2 Atomen von hoher Elektronegativität (Z.B. O, N, ...)

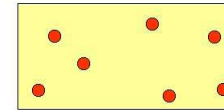
Z.B. Wasser

## Aggregatzustände



9

## Gase



Makroskopische Beschreibung:

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

Druck  $p$ , Volumen  $V$ , Stoffmenge  $\nu$ , Temperatur  $T$

$$pV = \nu RT$$

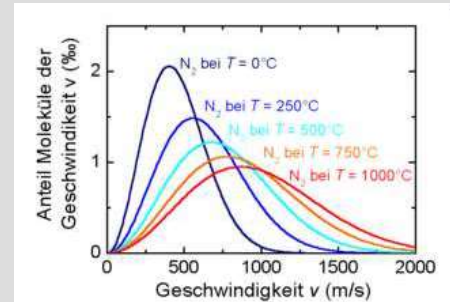
(Für ideale Gase: punktförmige Atome ohne Wechselwirkungen)

Mikroskopische Beschreibung:

- Ungeordnet
- Starke und fast freie Bewegung

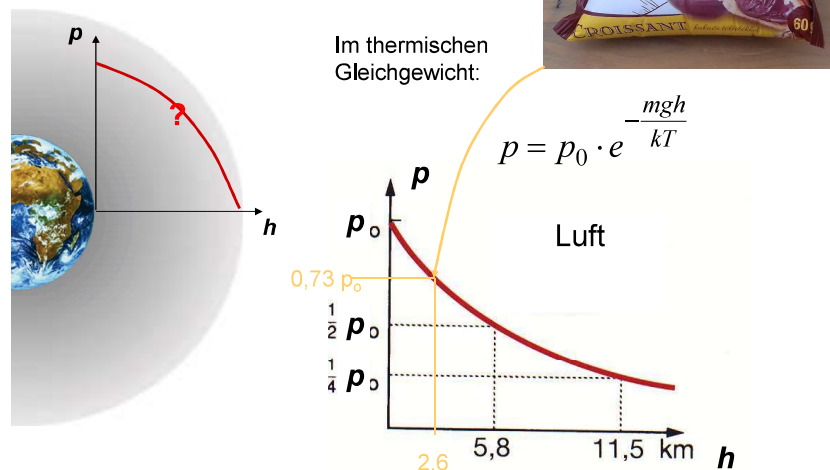
$$\frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT$$

Maxwell-Boltzmann- Verteilung



10

## Gas im Gravitationsfeld – barometrische Höhenformel:



11

## Boltzmann-Verteilung im Allgemeinen

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

$$\left. \begin{array}{l} n_i \\ n_0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} \varepsilon_i \\ \varepsilon_0 \end{array} \Delta \varepsilon \quad n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_0}{kT}}$$

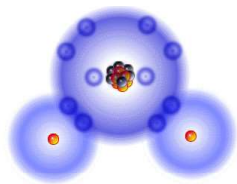
$$n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_0}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E}{RT}} \quad \left( \begin{array}{l} \Delta E = \Delta \varepsilon \cdot N_A \\ R = k \cdot N_A \end{array} \right)$$

12

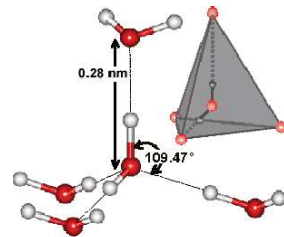
## Anwendungen:

- 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
- ...

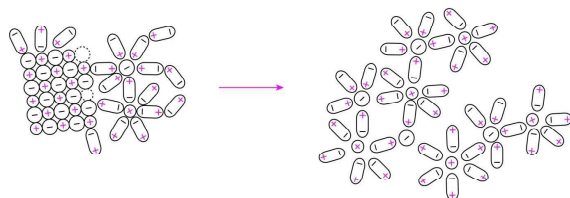
## Wasser



Dipol

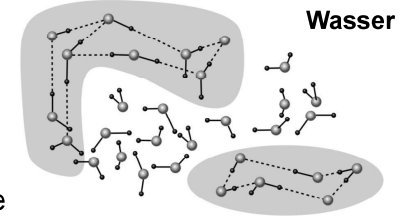


- hohe spezifische Wärmekapazität, Schmelzwärme und Verdampfungswärme
- hohe Oberflächenspannung
- gutes Lösungsmittel



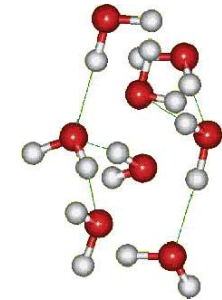
15

## Flüssigkeiten



Wasser

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



14

## Feste Körper

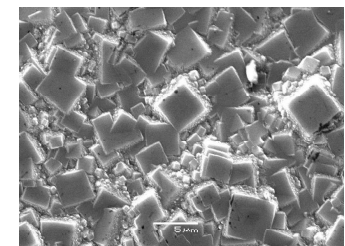
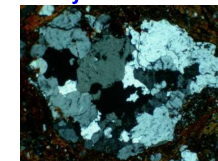
(Kristall = Festkörper)

Kristalline  
Stoffe

Amorphe  
Stoffe

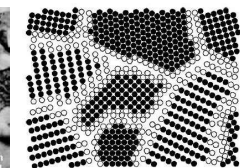
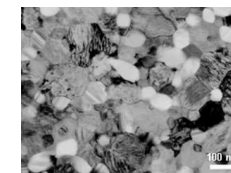
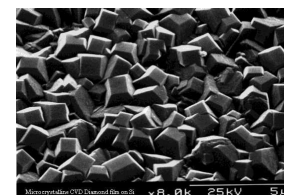
Einkristalle

Polykristalle



Mikrokristalline  
Stoffe

Nanokristalline  
Stoffe

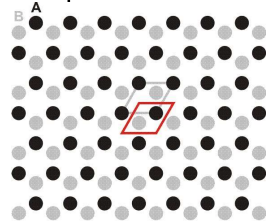


16



## Festkörper (Kristalle)

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



Kristallgitter  
(Raumgitter)

↓

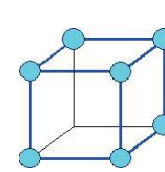
Elementarzelle



17

## Raumgitter (Kristallklassen)

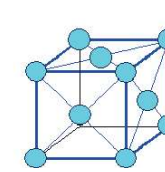
kubisch



einfach

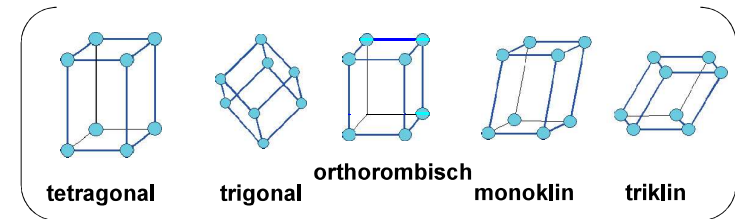
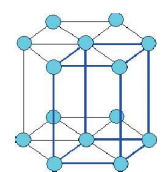


raumzentriert



flächenzentriert

hexagonal



18



19

## Kristalltypen

- Atomkristall



Diamant



Si

- Ionenkristall



Salz



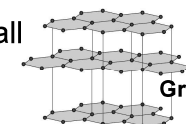
Apatit

- Metallkristall



Gold

- Molekülkristall

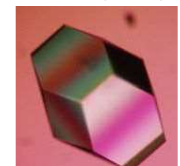


Graphit



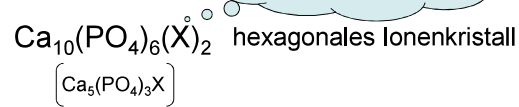
Eis

Eiweiß (Lysozym)

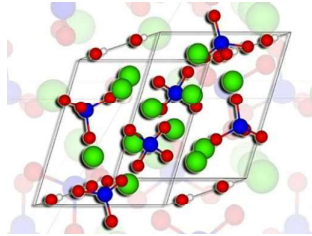
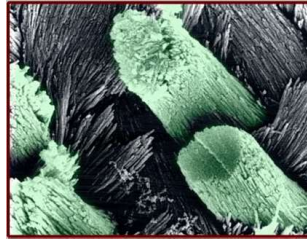


20

## Apatit



OH : Hydroxiapatit  
F : Fluorapatit



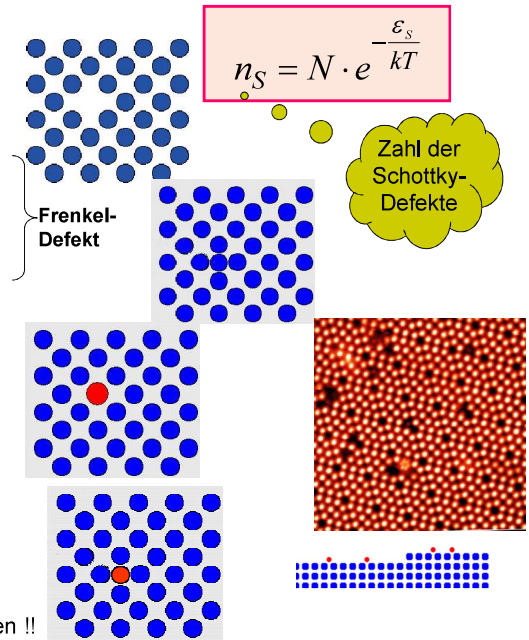
Dentin, Knochen: 20-60 nm x 6 nm große Kristalle  
Zahnschmelz: 500-1000 nm x 30 nm große Kristalle

21

## Gitterdefekte

### • Punktdefekte

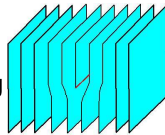
- thermisch
  - Vakanz/Leerstelle (Schottky-Defekt)
  - Interstitielles Atom (Zwischengitteratom)
- Fremdatom
  - An einer Gitterstelle (Substitutionsatom)
  - An einer Zwischengitterstelle (interstitielles Atom)



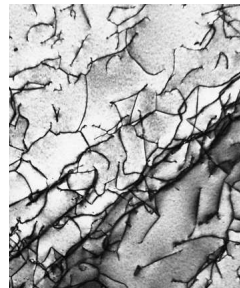
22

### • Versetzungen

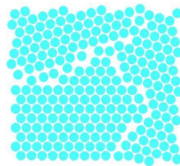
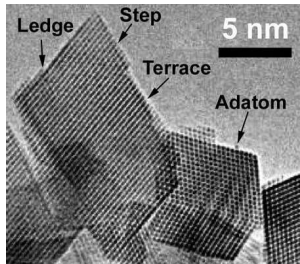
- Stufenversetzung
- Schraubenversetzung



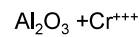
Versetzungen in einer Ti-Legierung



### • Korngrenzen



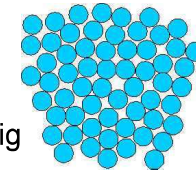
Gitterdefekte  $\Rightarrow$  Eigenschaften!!



23

## Amorphe (feste) Körper

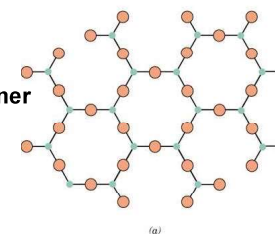
- Eigenvolumen
- Mechanisch hart
- Keine Eigenform/flüssig  
sehr hohe Viskosität;  
„gefrorene Flüssigkeit“
- Nahordnung
- Viele Defekte
- Isotrop



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

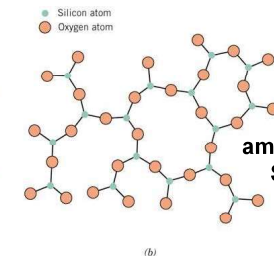


kristalliner  $\text{SiO}_2$



(a)

amorpher  $\text{SiO}_2$



(b)

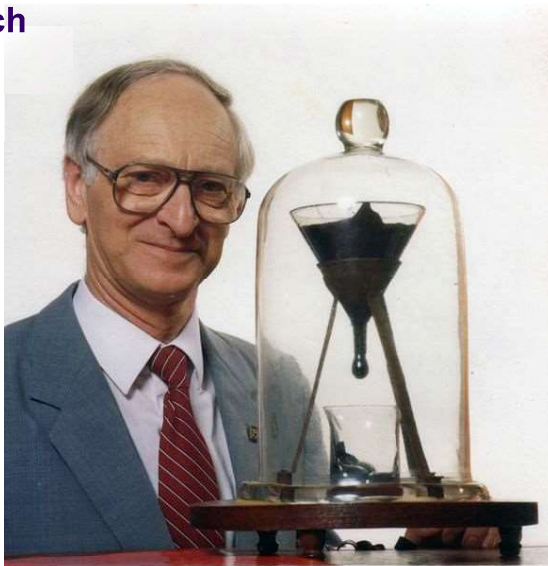
24



## Längster Versuch der Welt

- Pechtropfen-Experiment
- In 1927 gestartet
- 9 Tropfen

(in 1938, 1947, 1954, 1962, 1970, 1979, 1988, 2000 und 2014)

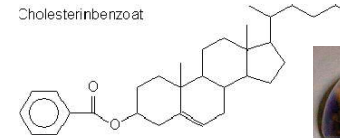


<https://de.wikipedia.org/wiki/Pechtropfenexperiment>

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

## Flüssigkristalle

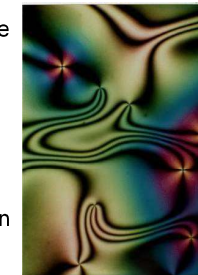
Cholesterinbenzoat



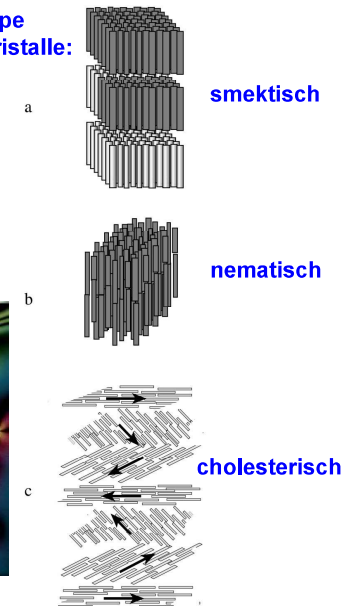
1883 Reinitzer



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



Termotrope Flüssigkristalle:

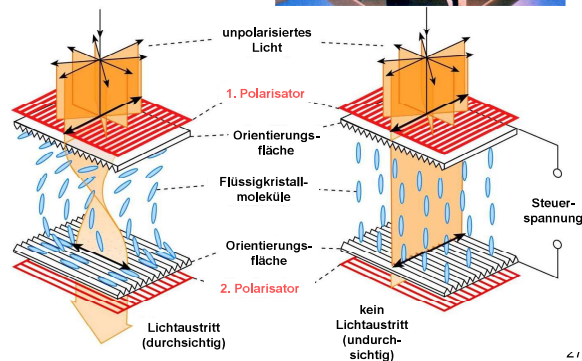
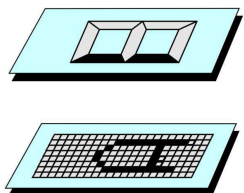


26

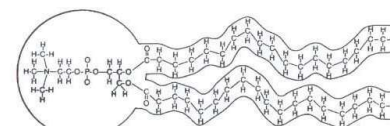
## Kontaktthermographie/Plattenthermographie (thermo-optisches Phänomen)



## LCD (elektro-optisches Phänomen)



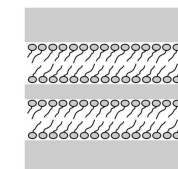
## Lyotrope Flüssigkristalle:



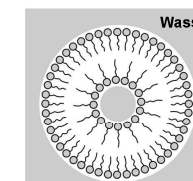
hydrophil

hydrophob

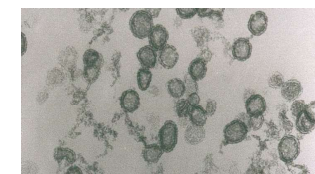
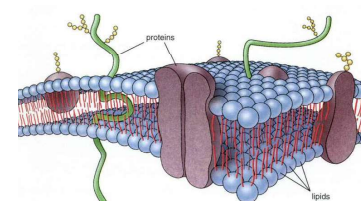
Phospholipidmolekül



Lamellare Struktur



Liposom



28