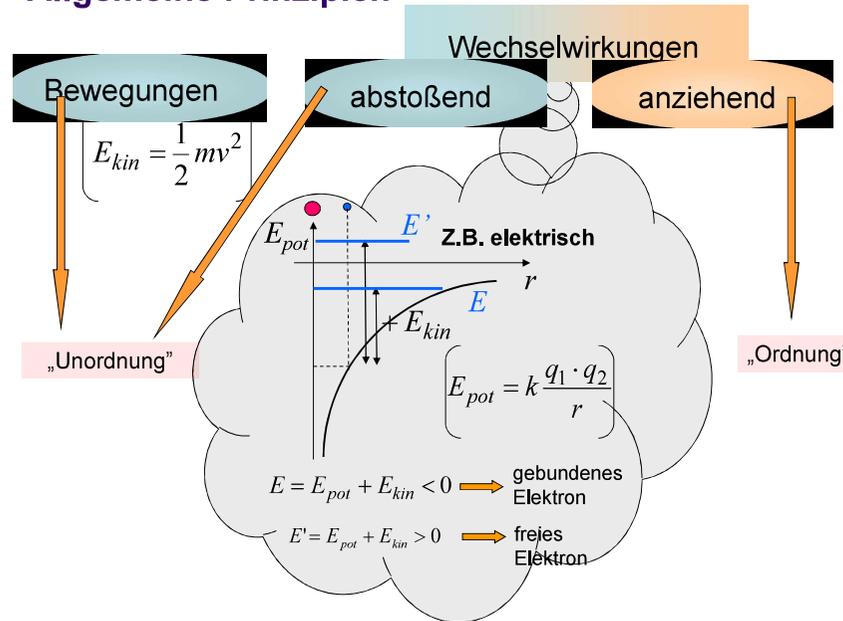


# Biophysik für Pharmazeuten I.

2018/19  
Vorlesung 4

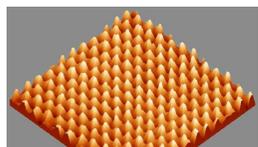
## Struktur der Materie

## Allgemeine Prinzipien

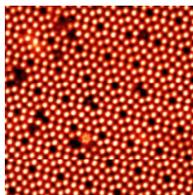


## Atomarer Aufbau der Materie

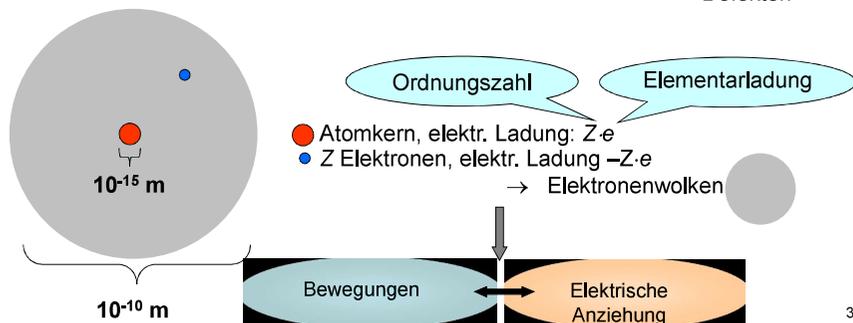
- Demokritos 5. Jht v. Chr.
- Daltonsches Gesetz 1803
- Moderne Mikroskope:



Graphit

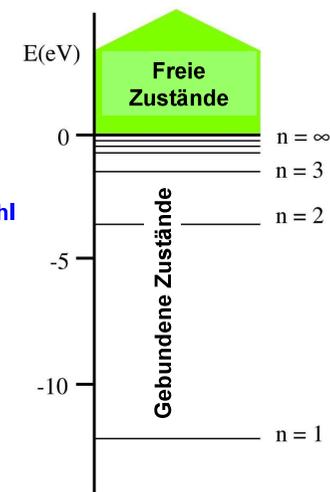
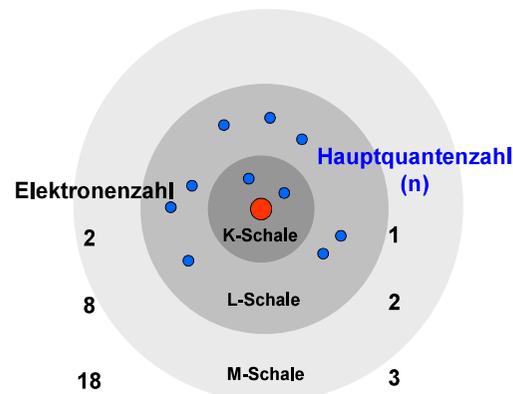


Si Kristall mit Defekten

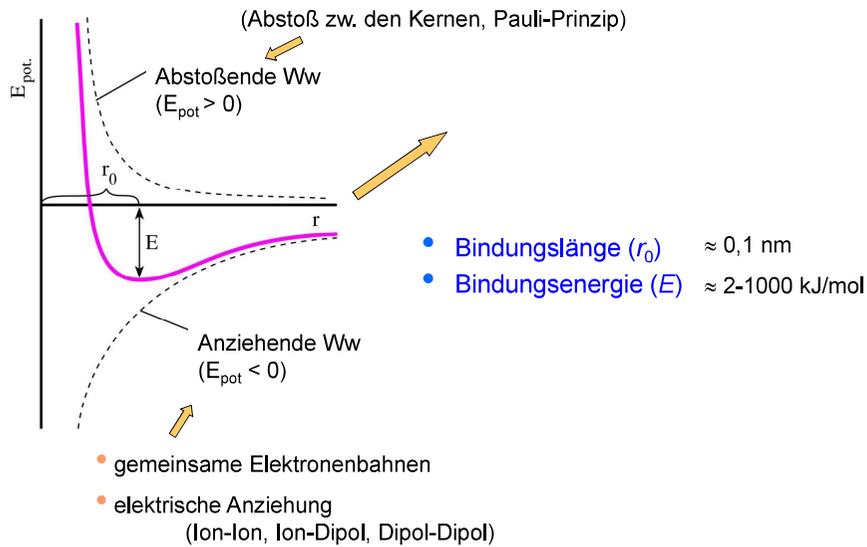


- Energieminimum
- Diskrete Energiezustände
- Pauli-Prinzip

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

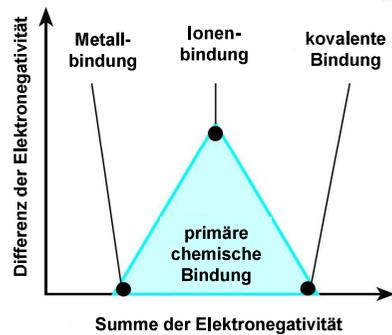
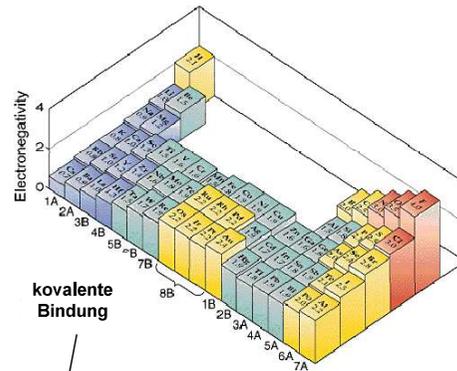
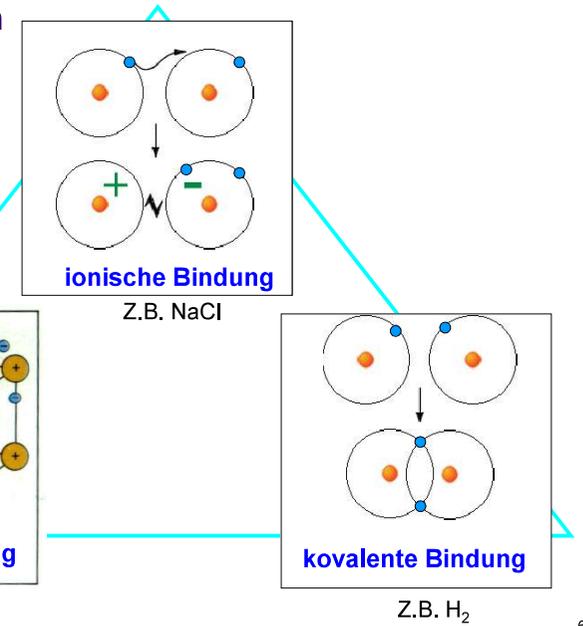


# Atomare Wechselwirkungen



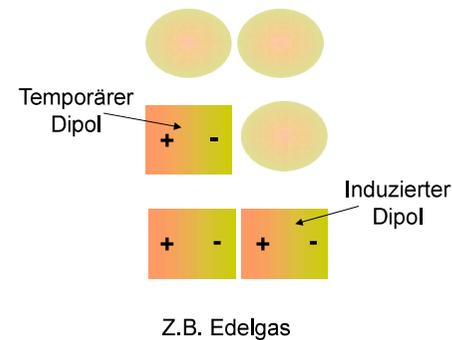
# Bindungstypen

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

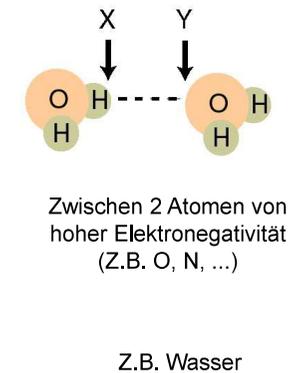


- sekundäre  $\approx 10$  kJ/mol
  - van der Waals (Orientierung, Induktion, Dispersion)
  - H-Brückenbindung

## van der Waals Bindung (Dispersionskräfte)



## H-Brückenbindung



# Aggregatzustände

Anziehende Ww  $\longleftrightarrow$  Abstoßende Ww + Bewegungen  $T (\sim E_{kin})$

|              |      |         |           |
|--------------|------|---------|-----------|
|              | Fest | Flüssig | Gasförmig |
| Eigenvolumen | +    | +       | -         |
| Eigenform    | +    | -       | -         |

Kristallin (Festkörper)

- Fernordnung
- Kristallgitter

Amorf

- Nahordnung

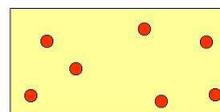
Gasförmig

- ungeordnet

Dichte ( $\rho$ ):  $\rho = \frac{m}{V} \left( \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right)$

9

# Gase



Makroskopische Beschreibung:

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

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

$$pV = \nu RT$$

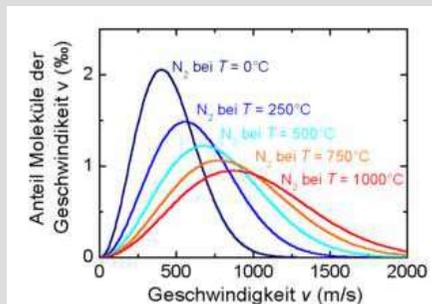
(Für ideale Gase: punktförmige Atome ohne Wechselwirkungen)

Mikroskopische Beschreibung:

- Ungeordnet
- Starke und fast freie Bewegung

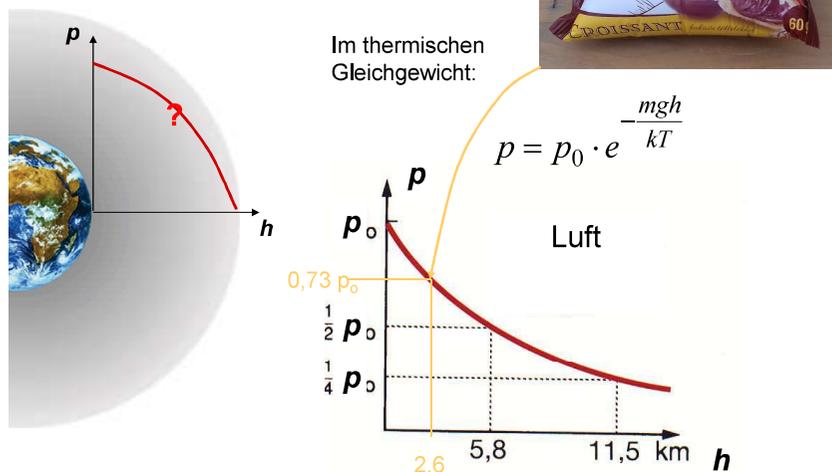
$$\frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT$$

Maxwell-Boltzmann-Verteilung



10

## Gas im Gravitationsfeld – barometrische Höhenformel:



11

## Boltzmann-Verteilung im Allgemeinen

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

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

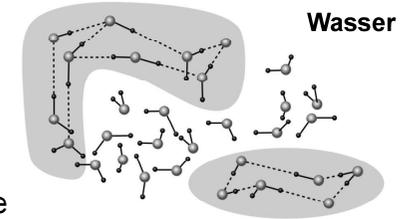
$$n_i = n_0 \cdot e^{-\frac{\epsilon_i - \epsilon_0}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta\epsilon}{kT}} = n_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E}{RT}} \quad \left( \begin{array}{l} \Delta E = \Delta\epsilon \cdot N_A \\ R = k \cdot N_A \end{array} \right)$$

12

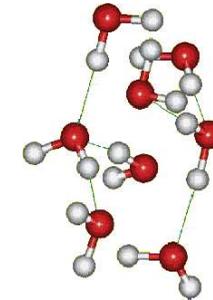
### Anwendungen:

- 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
- ...

## Flüssigkeiten

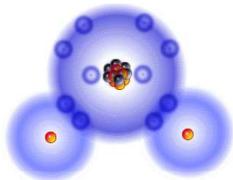


- Eigenvolumen
- Keine Eigenform/flüssig – keine innere Scherkräfte
- Nahordnung  
einige nm große geordnete dynamische Bereiche
- Viele Strukturdefekte
- mittelstarke Bewegungen
- Isotrop

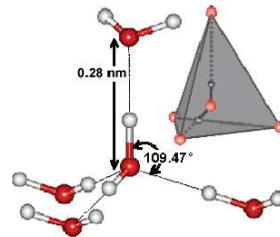


14

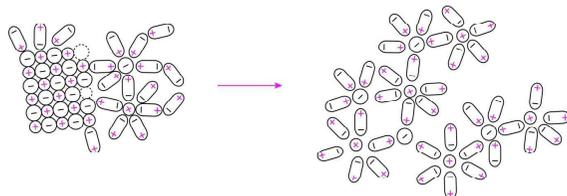
## Wasser



Dipol



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



15

## Feste Körper

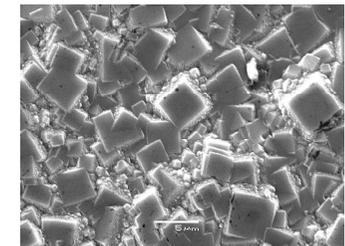
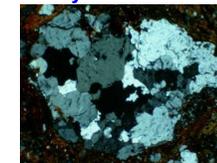
(Kristall = Festkörper)

Kristalline Stoffe

Amorphe Stoffe

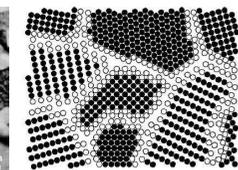
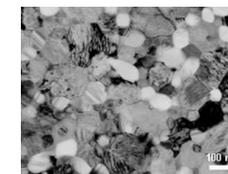
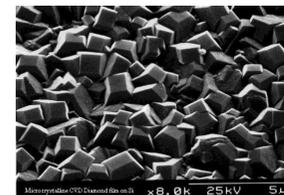
Einkristalle

Polykristalle



Mikrokristalline Stoffe

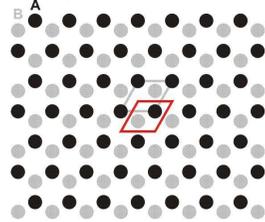
Nanokristalline Stoffe



16

## Festkörper (Kristalle)

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



Kristallgitter  
(Raumgitter)

↓

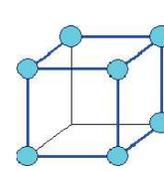
Elementarzelle



17

## Raumgitter (Kristallklassen)

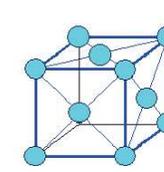
kubisch



einfach

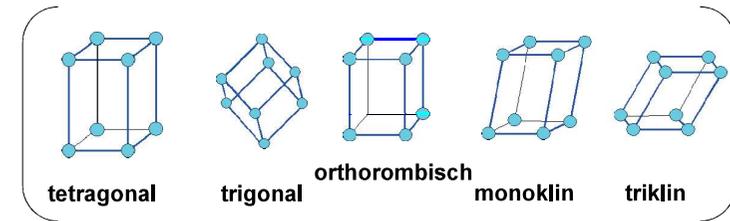
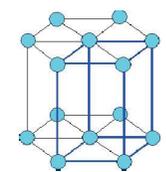


raumzentriert



flächenzentriert

hexagonal



18



19

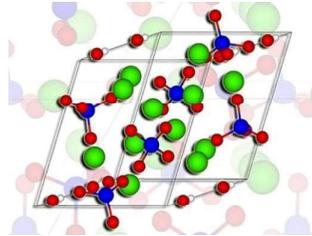
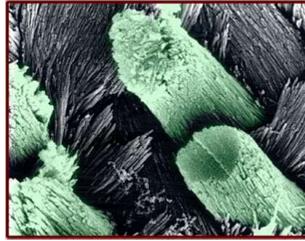
## Kristalltypen

- Atomkristall  
 Diamant  
 Si
- Ionenkristall  
 Salz  
 Apatit
- Metallkristall  
 Gold
- Molekülkristall  
 Graphit  
 Eis  
 Eiweiß (Lysozym)

20

# Apatit

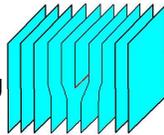
OH : Hydroxiapatit  
F : Fluorapatit



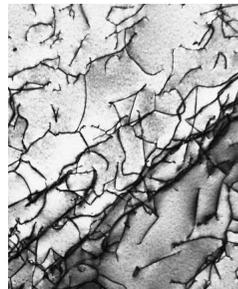
Dentin, Knochen: 20-60 nm x 6 nm große Kristalle  
Zahnschmelz: 500-1000 nm x 30 nm große Kristalle

## Versetzungen

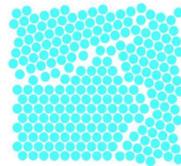
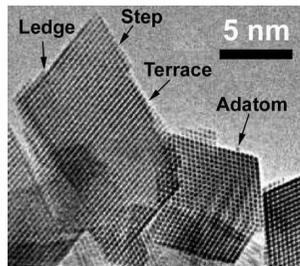
- Stufenversetzung
- Schraubenversetzung



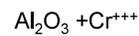
Versetzungen in einer Ti-Legierung



## Korngrenzen



Gitterdefekte  $\Rightarrow$  Eigenschaften!!



# Gitterdefekte

## Punktdefekte

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

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

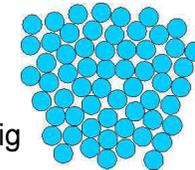
Zahl der Schottky-Defekte

Frenkel-Defekt

s. Legierungen !!

# Amorphe (feste) Körper

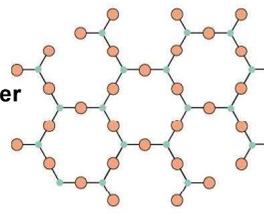
- Eigenvolumen
- Mechanisch hart
- Keine Eigenform/flüssig  
sehr hohe Viskosität;  
„gefrorene Flüssigkeit“
- Nahordnung
- Viele Defekte
- Isotrop



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

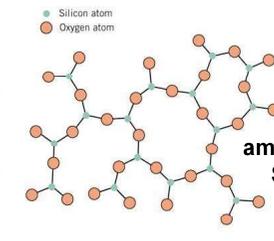


kristalliner  $SiO_2$



(a)

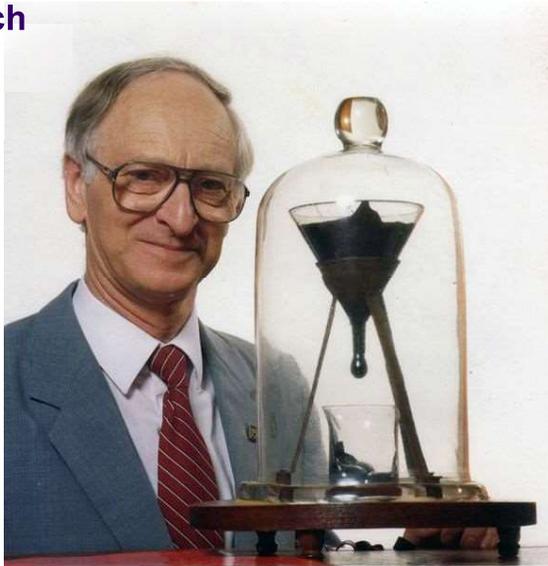
amorpher  $SiO_2$



(b)

## Längster Versuch der Welt

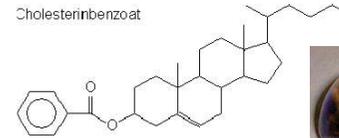
- Pechtropfen-Experiment
- In 1927 gestartet
- 9 Tropfen  
(in 1938, 1947, 1954, 1962, 1970, 1979, 1988, 2000 und 2014)



<https://de.wikipedia.org/wiki/Pechtropfenexperiment>  
<http://www.nature.com/news/world-s-slowest-moving-drop-caught-on-camera-at-last-1.13418>

## Flüssigkristalle

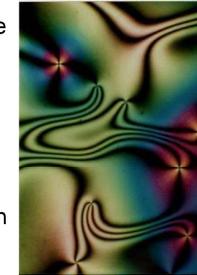
Cholesterinbenzoat



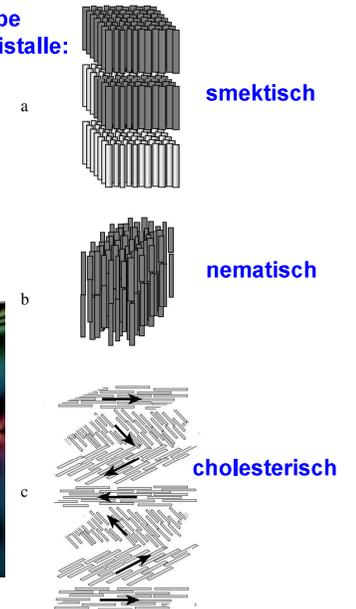
1883 Reinitzer



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



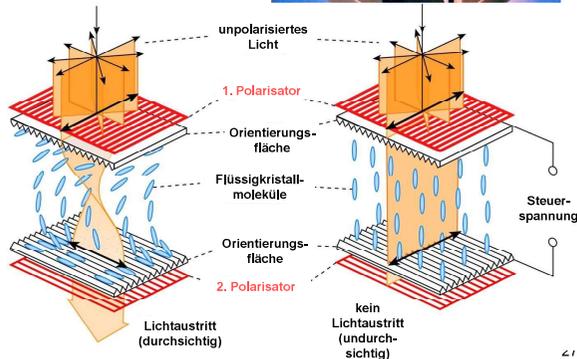
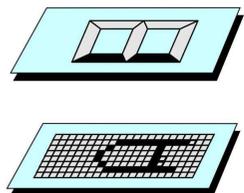
### Termotrope Flüssigkristalle:



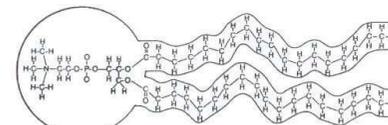
## Kontaktthermographie/Plattenthermographie (thermo-optisches Phänomen)



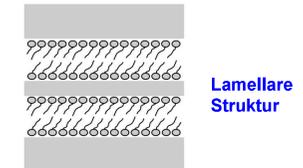
## LCD (elektro-optisches Phänomen)



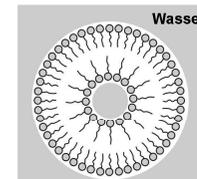
## Lyotrope Flüssigkristalle:



hydrophil hydrophob  
Phospholipidmolekül



Lamellare Struktur



Wasser  
Liposom

