



UNIVERSITÄTS-
BIBLIOTHEK
PADERBORN

Universitätsbibliothek Paderborn

Forschungsbericht

Universität Paderborn

Paderborn, 1979/81(1982) - 1990/92(1993)

"Zwischenmolekulare Wechselwirkung in anisotroper Materie"

urn:nbn:de:hbz:466:1-29485

In der Arbeitsgruppe "Theoretische Physik" wurde ein mikroskopisches Modell des Carriertransportes bzw. des Transportes durch Poren behandelt. Ein einzelner Carrier, der an zwei große Außensysteme gekoppelt ist, läßt sich quantenmechanisch im Rahmen der Vielteilchentheorie behandeln. Aus Gründen der leichteren Durchführbarkeit der sehr aufwendigen Rechnungen wurde nur eine transportierte Teilchensorte berücksichtigt. Das Resultat dieser Überlegungen ist ein Satz von gekoppelten Transportgleichungen, die das makroskopische Verhalten von carrier-bestückten Membranen beschreiben. Dieses Modell beschreibt noch nicht den Transport durch die Mitochondrienmembranen, aber es besteht begründete Hoffnung, daß es so ausgebaut werden kann, daß damit auch dieses System mathematisch erfaßbar wird.

In einem anderen theoretischen Ansatz werden biologische Membranen von vornherein phänomenologisch makroskopisch betrachtet. Da biologische Membranen im Verhältnis zu den Ausdehnungen der Außenphasen sehr dünn sind, wurde eine Thermodynamik der Oberflächen entwickelt. Diese Theorie gestattet u. a. die Beschreibung von Einflüssen der geometrischen Struktur der Membranen auf das Transportverhalten. Diese sehr allgemeine Theorie ist allerdings bisher nur zu einem sehr kleinen Teil für biologische Probleme nutzbar gemacht worden.

Die gemeinsame Zielsetzung des Forschungsschwerpunktes "Zwischenmolekulare Wechselwirkungen in anisotroper Materie" wurde im Berichtszeitraum weiterverfolgt. Im Mittelpunkt stehen Probleme der Wechselwirkungskräfte zwischen den molekularen Bausteinen hochgeordneter Systeme, die von reinen und gestörten kristallinen Festkörpern bis zu flüssigen Kristallen reichen. Allen untersuchten Systemen ist gemeinsam, daß die Teilchenorientierung durch nicht-statistische Verteilungsfunktionen zu beschreiben ist. Daraus resultiert eine starke Anisotropie der zwischenmolekularen Wechselwirkungskräfte, wodurch wiederum eine Vielzahl physikalischer und physikalisch-chemischer Eigenschaften der Materie anisotropes

Verhalten zeigen. Die dadurch bedingte Arbeitsmethodik und Experimentiertechnik ist daher in den einzelnen Forschungsgruppen sehr verwandt.

Im einzelnen kann über folgende Entwicklung berichtet werden:

Projektbereich 1: a) Untersuchungen der "Elektronischen Struktur tiefer Störstellen in Halbleitern" (Arbeitsgruppe Spaeth). Im System Ni in GaP gelang es, mit Hilfe von ENDOR den Zustand des Gastes im Wirt als Ni^{3+} auf Gitterplatz zu identifizieren. Die Ergebnisse am Doppeldonator Te^+ in Si sind noch nicht verstanden und werden im Hinblick auf die Si-Technologie in stärkerem Maße bearbeitet. - b) Für den optischen Nachweis der Elektronen-Spinresonanz (ODMR) wurde eine leistungsfähige Apparatur fertiggestellt (Spaeth). Mit Hilfe von ODMR wurde die Strukturaufklärung von Laser-Zentren in Alkalihalogeniden begonnen. Die optischen Übergänge des $F_A(Tl)$ Zentrums wurden bestimmt, was für den Bau eines technisch interessanten Farbzentren-Lasers im nahen IR von Bedeutung ist. - c) Die Gast-Wirt-Wechselwirkung in Flüssigkristallen wurde mit Hilfe der Circularpolarisation der Fluoreszenz (CPF) von optisch angeregten Gastmolekülen in helicalen Matrizen studiert (Arbeitsgruppe Stegemeyer). Erstmals wurde die CPF im Resonanzfall (Helixganghöhe in der Größenordnung der Fluoreszenzwellenlänge) nachgewiesen und Größe und Vorzeichen des Anisotropiefaktors theoretisch erklärt.

Projektbereich 2: Bose-Einstein-Kondensation von Exzitonen in AgBr unter Hochanregungsbedingungen (Arbeitsgruppe von der Osten). Mit Hilfe einer im Rahmen des Projekts entwickelten kurzzeitspektroskopischen Meßapparatur gelang es, in AgBr unter Hochanregung neue Emissionsbanden zu beobachten, die sich der Rekombination eines lokalisierten und bisher nur im Halbleiter GaP beobachteten Biexzitons zuschreiben lassen. Die beobachtete Doppelstruktur dieser Bande ist auf eine starke Exziton-Intervalley-Streuung zurückzuführen. Die für das freie Exziton-Molekül entwickelte Theorie

wurde entsprechend modifiziert und gestattet nun die Bestimmung von Biexzitonradius und Bindungsenergie.

Projektbereich 4: a) Kristallstruktur und Morphologie kubischer, chiraler Flüssigkristalle (sog. Blue Phases, BPs) (Arbeitsgruppe Stegemeyer). Die in einem schmalen Temperaturbereich ($\Delta T \sim 0.5$ K) zwischen der isotropen Schmelze und der helicalen cholesterischen Flüssigkristallphase liegenden BPs sind thermodynamisch nur stabil, wenn die Helixganghöhe einen kritischen Wert P_C unterschreitet. Es gelang erstmals, flüssige Einkristalle zu züchten. Aus dem Habitus und aus optischen Messungen wurden die systemspezifischen Raumgruppen der kubisch primitiven oder raumzentrierten Gitter bestimmt. - b) Einfluß der Molekülstruktur auf flüssig-kristalline Eigenschaften (Arbeitsgruppe Sucrow). Als Bindeglied zwischen flüssigkristallinen Cholesterylestern und Bicyclohexylderivaten wurden Perhydrophenanthrene und Cyclohexyl-decaline synthetisiert, die ebenfalls mesogen sind. Die Mesogenität dieser Verbindungen kann durch die bestehenden molekular-statistischen Theorien nicht erklärt werden.

Mathematik und in zunehmendem Maße auch Informatik haben Grundlagencharakter und Zulieferfunktionen für ein breites Spektrum von Fachrichtungen, das von den Naturwissenschaften (vor allem Physikalische Chemie) über die Ingenieurwissenschaften bis zu den Wirtschaftswissenschaften reicht. Insofern haben grundlegende, d. h. eher abstrakte Untersuchungen aus Mathematik/Informatik häufig auch eine anwendungsfähige Komponente in bezug auf die genannten Fachgebiete. Die besonderen Bemühungen des Forschungsschwerpunkts "Analyse von Modellsystemen" zielen daher darauf ab, die Vorhaben der beteiligten Mathematiker/Informatiker zu koordinieren, Verfahrensweisen zu entwickeln, die für Anwendungen in anderen Fachrichtungen nutzbar sind. Entsprechend dieser Zielsetzung gliedert sich der Forschungsschwerpunkt in Teilprojekte, die ein abgestuf-