



# Atomi, illetve molekuláris kölcsönhatások és alkalmazásai

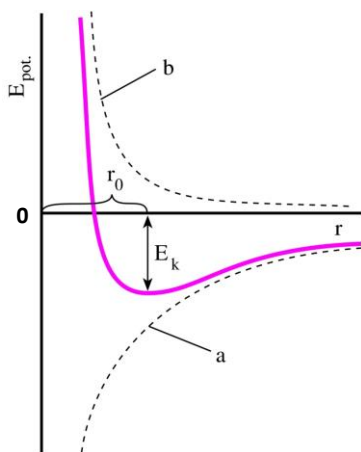
Bozó Tamás

2013. október 29.

## Atomi kölcsönhatások

Nemesgázok: atomi előfordulás (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)

Többi elem: molekulákat alkot (pl.  $\text{H}_2$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , ...)



$$E_{\text{pot.}} = E_{\text{vonzó}} + E_{\text{taszító}} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

A és B: kölcsönhatásokra jell.  
állandók  
 $n < m$

## Kötéstípusok

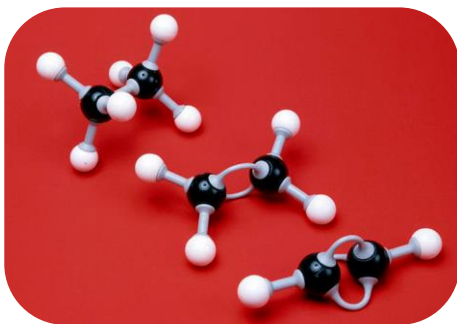
Többféle osztályozási rendszer:

- Intra/intermolekuláris
- Egyszeres/többszörös
- Kötés erőssége ( $E_k$ ) szerint:
  - Erős/gyenge
  - Elsődleges (kovalens, fémes, ionos)
  - Másodlagos (diszperziós, dipól-dipól, hidrogén)

## I. Kovalens kötés

- Atomokat közös elektronpályák tartják össze
- Vegyértékelektronok szerepe
- Elektrosztatikus komponens is jelen lehet
- Erős kötés:  $E_k > 1 \text{ eV}$

$$(1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 96 \text{ kJ/mol} \sim 100 \text{ kJ/mol})$$

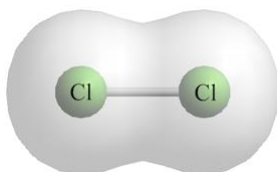


	szén-szén kötéshossz	kötési energia
$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$ etán	154 pm	-331 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$ etén (etilén)	139,9 pm	-590 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
$\text{HC}\equiv\text{CH}$ etin (acetilén)	120,3 pm	-812 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

## I. Kovalens kötés

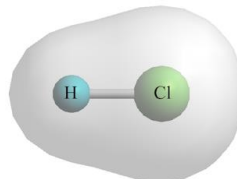
### Apoláris (homoöpoláris)

(+) és (-) töltések súlypontja egybeesik  
 kötőelektronok egyenletes eloszlása  
 „tiszta kovalens”  
*Pl.:  $H_2$ ,  $Cl_2$ ,  $O_2$*



### Poláris (heteropoláris)

töltések súlypontja eltolódik  
 polarizált elektronfelhő  
 elektromos dipólus  
 elektrosztatikus komponens megjelenik  
*Pl.:  $HCl$ ,  $HF$ ,  $H_2O$*

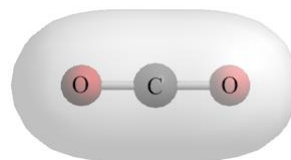
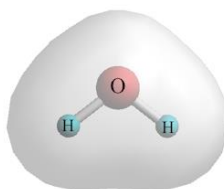
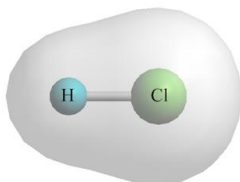


## I. Kovalens kötés

**Elektromos dipólus momentum:** a töltésszétválás mértéke. Vektor!

$$p = Qd$$

p: dipólusmomentum  
 Q: töltés értéke  
 d: töltések súlyponti távolsága  
 [D, debye] ( $1D = 3,34 \cdot 10^{-30} \text{ Cm}$ )



## I./b Fémek kötése

- Atomokat közös elektronpályák tartják össze
- Vegyértékelektronok (itt energiasávot alkotnak)
- Erős kötés:  $E_k > 1 \text{ eV}$
- Nincs értelmezve két atomra, sokatomos rendszerek

# Periodic Table of the Elements

1

H

2

He

3

Li

4

Be

11

Na

12

Mg

19

K

20

Ca

21

Sc

22

Ti

23

V

24

Cr

25

Mn

26

Fe

27

Co

28

Ni

29

Cu

30

Zn

31

Ga

32

Ge

33

As

34

Se

35

Br

36

Kr

37

Rb

38

Sr

39

Y

40

Zr

41

Nb

42

Mo

43

Tc

44

Ru

45

Rh

46

Pd

47

Ag

48

Cd

49

In

50

Sn

51

Sb

52

Te

53

I

54

Xe

55

Cs

56

Ba

57

La

58

Ce

59

Pr

60

Nd

61

Pm

62

Sm

63

Eu

64

Gd

65

Tb

66

Dy

67

Ho

68

Er

69

Tm

70

Yb

71

Lu

87

Fr

88

Ra

89

Ac

90

Th

91

Pa

92

U

93

Np

94

Pu

95

Am

96

Cm

97

Bk

98

Cf

99

Es

100

Fm

101

Md

102

No

103

Lr

hydrogen

alkali metals

alkali earth metals

transition metals

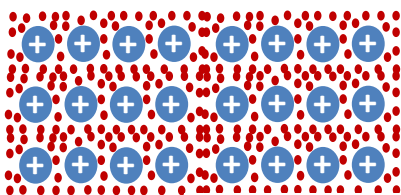
poor metals

nonmetals

noble gases

rare earth metals

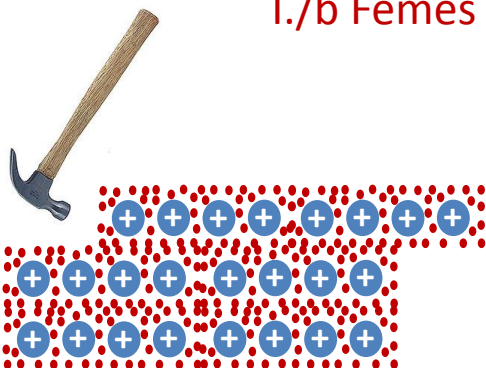
## I./b Fémek kötése



**Fémrács:** pozitív fémionok kristályos rendben, körülöttük közös pályát kialakító, delokalizált elektronrendszer.



## I./b Fémek kötése



### Fizikai tulajdonságok:

fémes szín  
nyújthatóság, alakíthatóság  
elektromos vezetés  
hővezetés

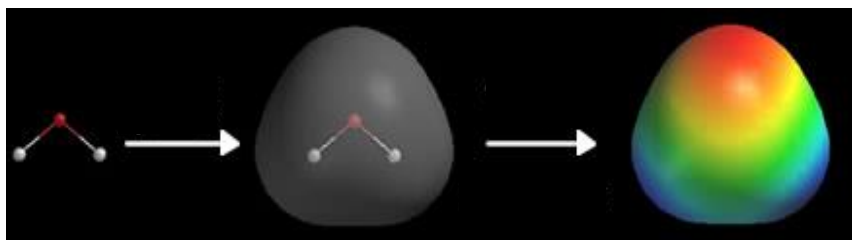
## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

### Elektronegativitás fogalma

Meghatározza, milyen erővel vonzza az atom a (kovalens) kötésben lévő elektronokat.

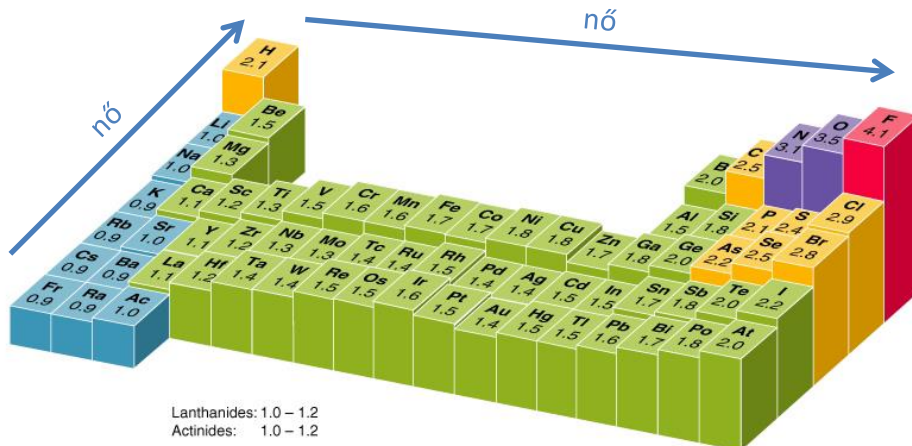
Kb. a szabad atom ionizációs energiája és elektronegativitása abszolút értékének összegével arányos.

Egysége önkényes (*Pauling, Mulliken, Sanderson és más skálák*)



## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

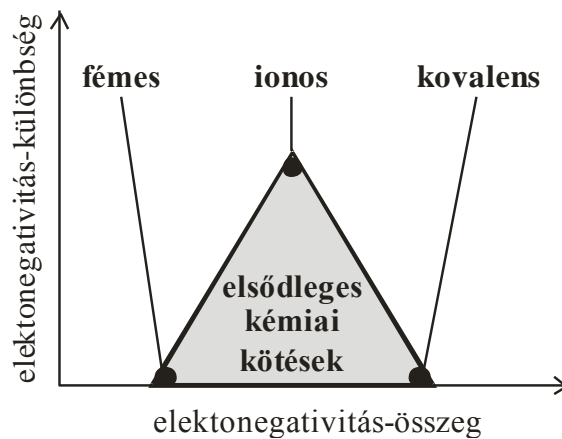
**Elektronegativitás** L. Pauling szerint (relatív egységekben)



## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

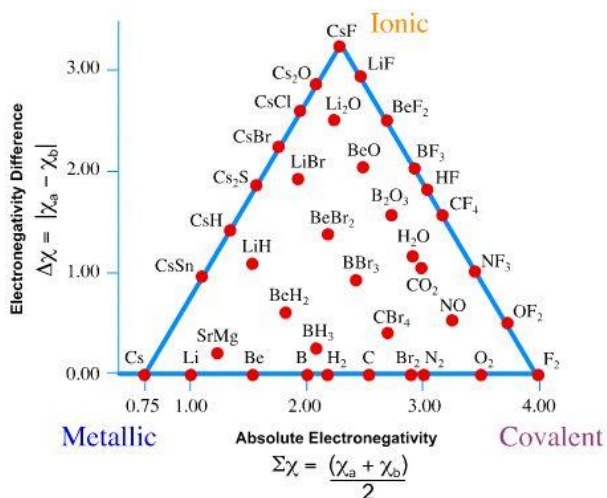
**Elektronegativitás különbség:**

$< 0,6$  (apoláris kovalens)  $0,6 - 2,1$  (poláris kovalens)  $2,1 <$  (ionos)



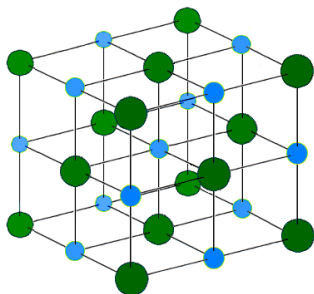
## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

Ez a modell (N. C. Norman) nem a Pauling skála szerinti EN értékeket használja!



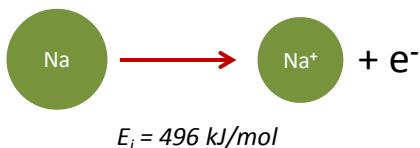
### II./a Ionos kötés

- (+) és (-) ponttöltések között Coulomb erők
- Heteropoláris kötések „határesetek”
- Nagy EN különbségű atomok között (pl.  $\text{NaCl}$ ,  $\Delta\text{EN}=3-0,9=2,1$ )
- Általában sokatomos kristályok, de értelmezhető két atomra is
- Hosszú hatótávú kh., de ez a közegtől is függ (ld. hidratáció)
- Erős kölcsönhatás ( $E_k > 1 \text{ eV}$ )

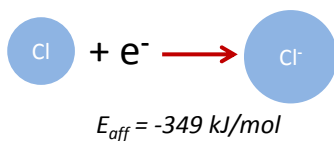


**Ionrács:** a pozitív és negatív ionok kristályos rendben helyezkednek el sztöchiometriai arányú halmazban.

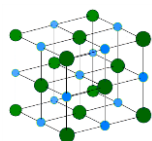
## II./a Ionos kötés



**Ionizációs energia:** kationok létrehozásához (elektronok kiszakításához) befektetendő energia.



**Elektronaffinitás:** anionok képződése (elektronfelvétel) során történő energiafelszabadulás. (Olykor E befektetést igényel)



$$E_{\text{rács}} = -788 \text{ kJ/mol}$$

**Rácsenergia:** az ellentétes töltésű ionok kristálysírácsba rendeződésekor felszabaduló energia. ( $E_{\text{pot}}$  csökken)

## II./b Dipól-dipól kölcsönhatás

- (+) és (-) atomcsoportok/molekularészek között Coulomb erők
- Permanens dipólus jellegű töltéeloszlás
- Intra/intermolekuláris kölcsönhatás
- Gyenge kölcsönhatás ( $E_k = 0,003\text{-}0,02 \text{ eV}$ )
- A dipólusok közti vonzás és taszítás:

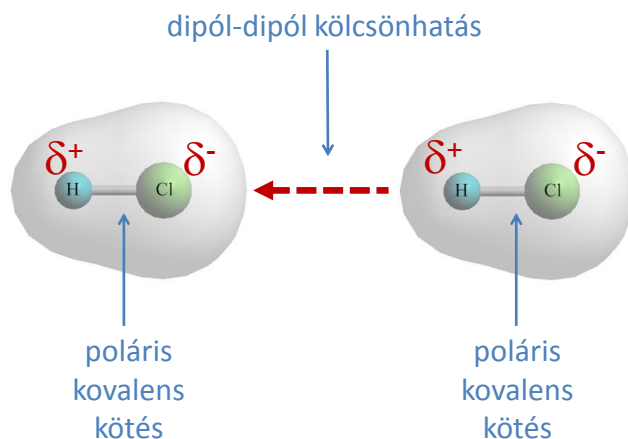
$$E_{\text{vonzó}} = p E$$

p: dipólusmomentum  
E: környező partnerek által keltett elektromos térerősség

$E_{\text{taszító}}$ : partnerek elektronfelhőjének taszítása

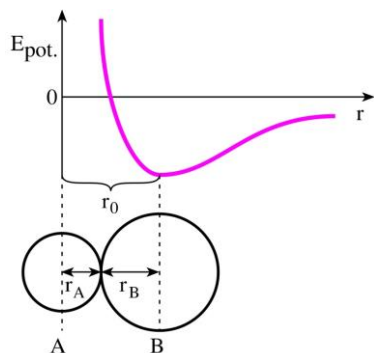


## II./b Dipól-dipól kölcsönhatás



## III. Van der Waals-kölcsönhatások

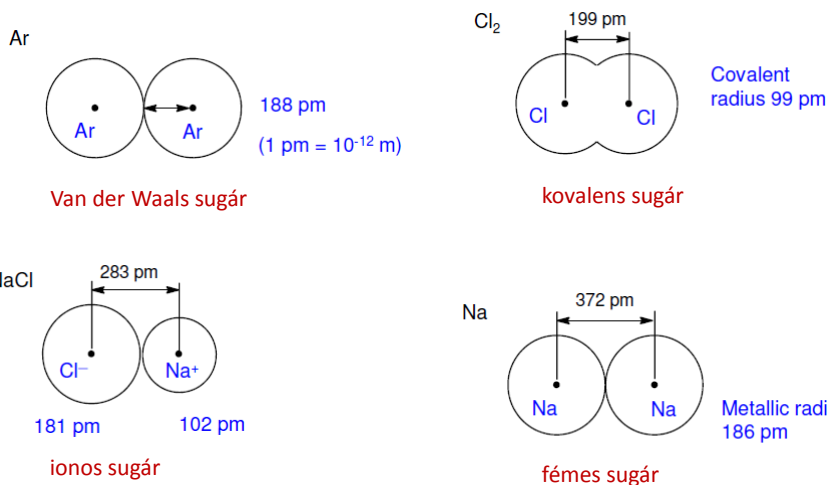
- Apoláris molekulákban/molekularészekben időlegesen kialakuló dipólus egy másik apoláris molekulában dipólust indukál
- Köztük vonzó (diszperziós, vagy London-féle) erők lépnek fel
- Inter/intramolekuláris kölcsönhatás
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Gyenge kölcsönhatás ( $E_k \sim 0,02$  eV)



$r_0$  : kötéshossz

$r_A$  és  $r_B$  : az A és B atom  
Van der Waals sugara

## Atomi méretek

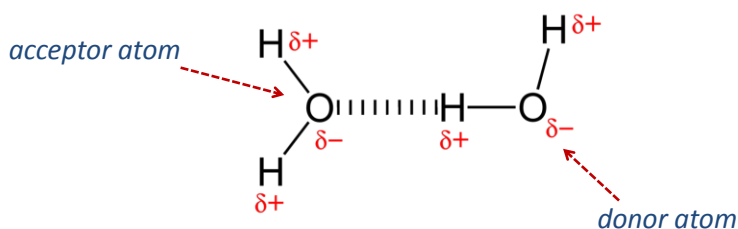


## Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

Kölcsönhatás	$E_{\text{pot}}$ távolságfüggése	$E_k$
Ion-ion	$1/r$	2-3 eV
Ion-dipólus	$1/r^2$	0,1-0,2 eV
Dipólus-dipólus (rögzített partnerek)	$1/r^3$	0,02 eV
Dipólus-dipólus (hőmozgás mellett)	$1/r^6$	0,003 eV
Diszperziós	$1/r^6$	0,02 eV

## IV. Hidrogénkötés

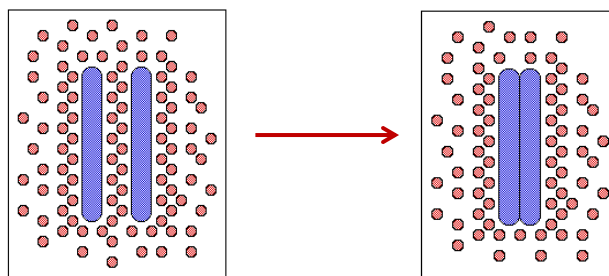
- Két nagy elektronegativitású atom között létrejövő H-híd
- Általában **F, N, O** atomok között
- Intermolekuláris kölcsönhatás
- Kötéstáv ált.: 0,23 – 0,35 nm
- A kötés térben irányított
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Közepes erősségű kölcsönhatás ( $E_k \sim 0,2$  eV)



## V. Hidrofób kölcsönhatás

- Vizes közegben értelmezhető (pl. biológiai rendszerek)
- Hidrofób molekulák/molekularészek asszociációja, cél a víz kiszorítása
- Nem csak Van der Waals alapú, hajtóereje a apoláros rész - víz határfelület csökkentése, ezzel a vízmolekulák rendezettségének csökkentése (Isd. entrópiánövekedés elve)
- Intra/intermolekuláris kölcsönhatás
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Gyenge kölcsönhatás

## V. Hidrofób kölcsönhatás



## Pásztázó próbamikroszkópia

### **SPM: Scanning Probe Microscopy**

Változatos szerkezetvizsgáló eljárások, melyek egy vékony szonda és valamely felület között létrejövő atomi szintű kölcsönhatások detektálásán alapulnak.

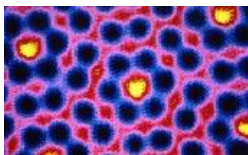
Egy felületet tapogatunk le pontról-pontra, akár atomról-atomra.

Nem diffrakció-limitált módszerek

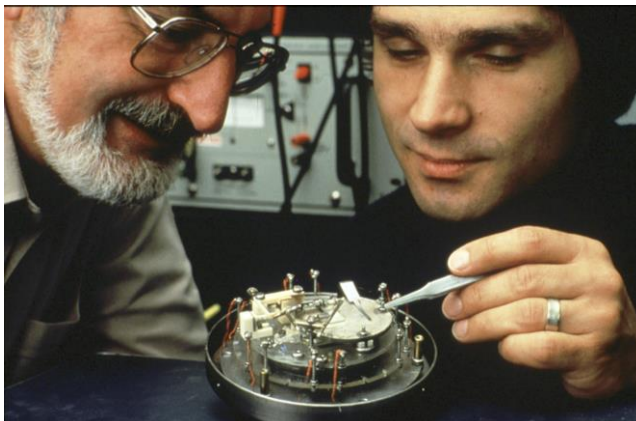
Néhány pm-es pásztázási pontosság

## Scanning Tunneling Microscope (STM) 1981

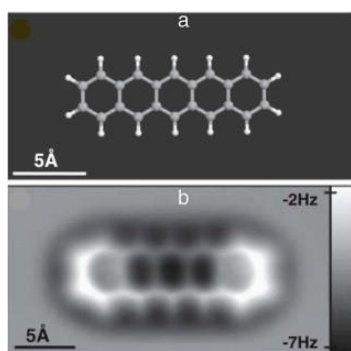
### Pásztázó alagút-mikroszkóp



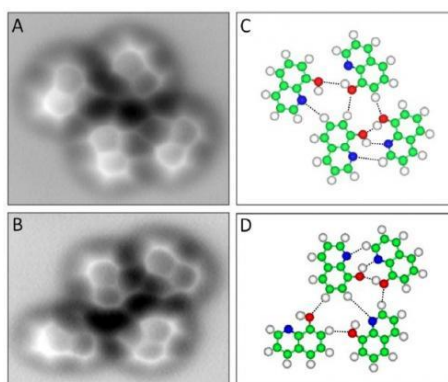
Atomok egy  
szilíciumlapkán



Heinrich ROHRER és Gerd BINNING  
Nobel díj: 1986

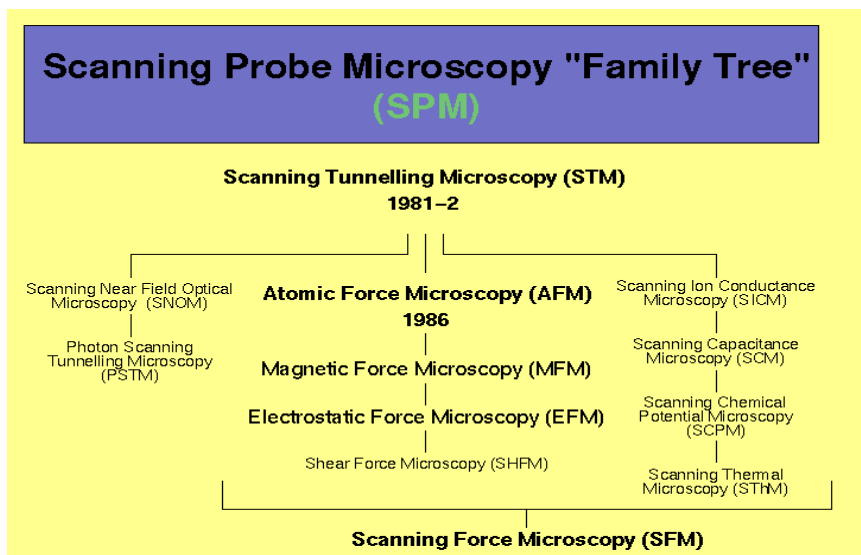


Pentacén molekula  
AFM képe



Hidrogénkötések 8-hidroxiquinolin  
molekulák között (AFM felvétel)

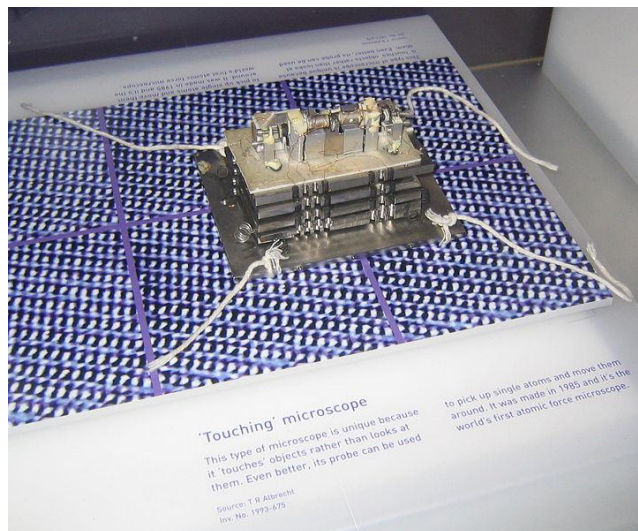
## Az SPM családfája



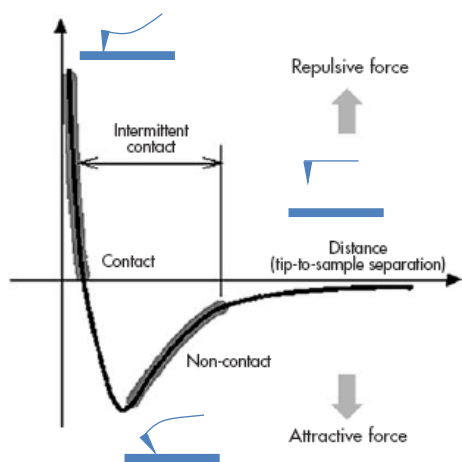
## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

- A szonda egy rugalmas, mikroszkópikus méretű laprugóra szerkesztett parányi tű
- A tűhegy atomjai és a minta felületének atomjai között taszító-vonzó kölcsönhatások a rugólapka elhajlását okozzák
- X-Y irányban vonalanként pásztázzuk a felületet
- Vertikális felbontóképesség akár 10 pm , a horizontális ennél rosszabb.
- Levegőben és folyadékban (fiziológiás közeg) is működőképes
- Szinte mindenféle felületen alkalmazhatók.
- nm-µm nagyságú objektumok szkennelhetők
- Nem kíván fixálást, festést vagy jelölést

## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



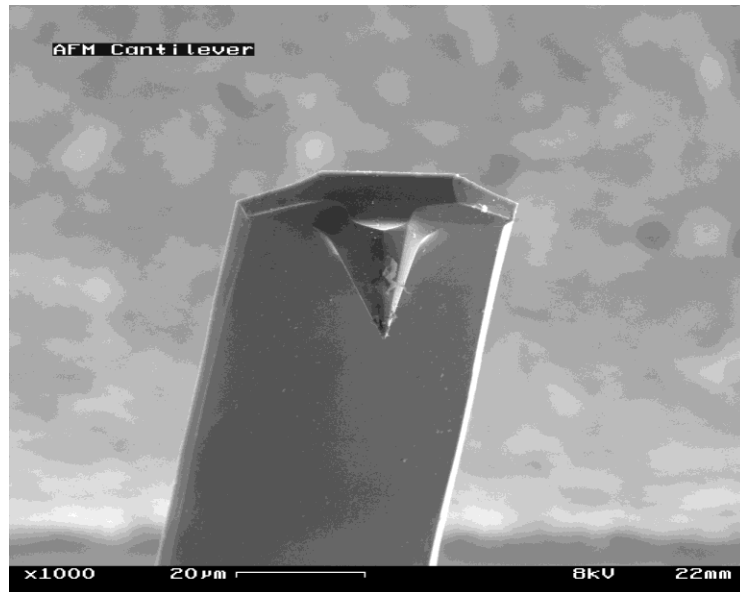
## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



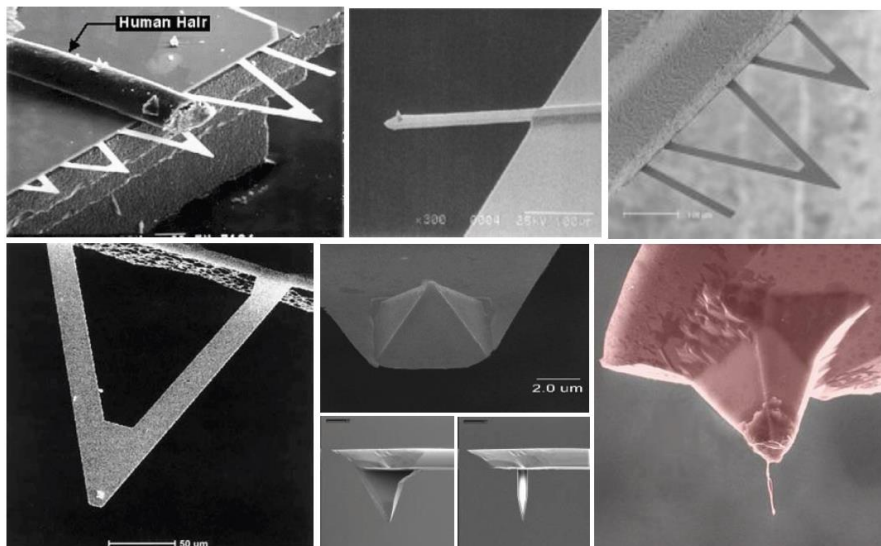
### Atomi kölcsönhatások a tűhegy és a minta között:

- Vonzás és taszítás
- Eredőjük távolságfüggő
- Nagyobb távolságoknál: vonzás
- Közel érve: taszítás

Atomic Force Microscopy (AFM),  
Atomi erő mikroszkópia

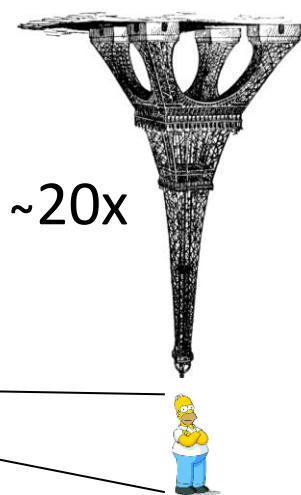
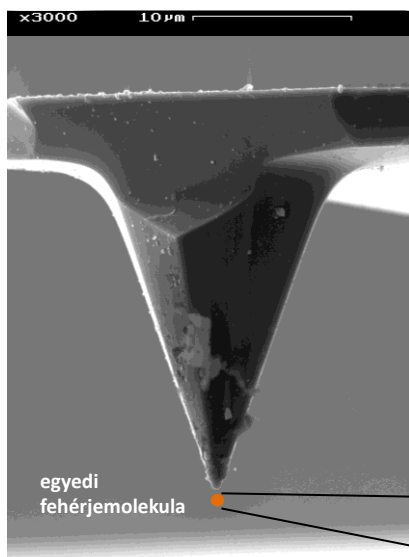


Atomic Force Microscopy (AFM),  
Atomi erő mikroszkópia

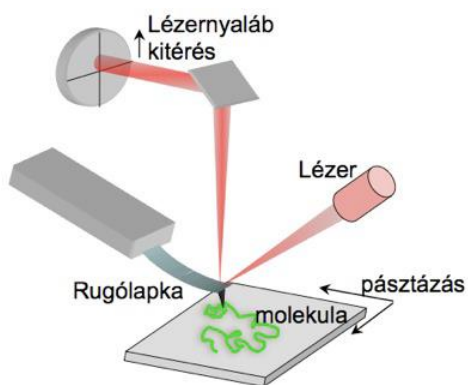




## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



Pásztázás alapja:

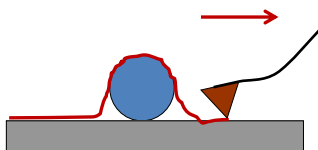
Piezoelektromos effektus:  
Bizonyos anyagokban (pl. kvartz)  
deformáció hatására feszültség lép  
fel.

**Inverz piezoelektromos hatás:**  
Feszültség hatására deformáció  
jelentkezik (~1nm/Volt)

## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

### **Kontakt mód:** (Contact mode)

- A tű folyamatos kapcsolatban van a felszínnel.
- A felszínre kifejtett erőt (a rugólapka elhajlását) konstans értéken tartjuk a tű és a felszín távolságának szabályozásával (feedback rendszer)
- Pontról pontra regisztráljuk az ehhez szükséges Z irányú elmozdulást.

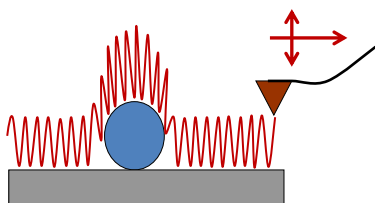


**Hátrány:** jelentős perturbáció vertikális és horizontális irányban.

## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

### **Oscilláló mód:** (Tapping mode, Non-contact mode)

- A tűt a rezonanciafrekvenciájához közeli frekvencián rezegtetjük.
- A felszínnel való kölcsönhatás miatt a rezgés amplitúdója megváltozhat.
- Az amplitúdót a tű és a felszín távolságának szabályozásával tartjuk állandó értéken.
- Pontról pontra regisztráljuk az ehhez szükséges Z irányú elmozdulást.

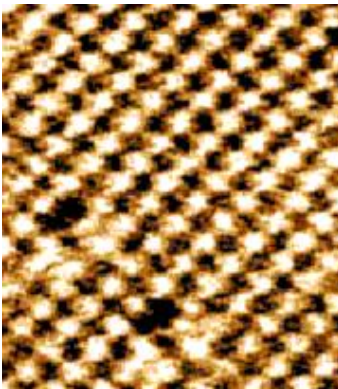


**Előnye:** elvileg kiküszöbölt laterális erő kifejtés, érzékeny minták vizsgálatára is alkalmas.

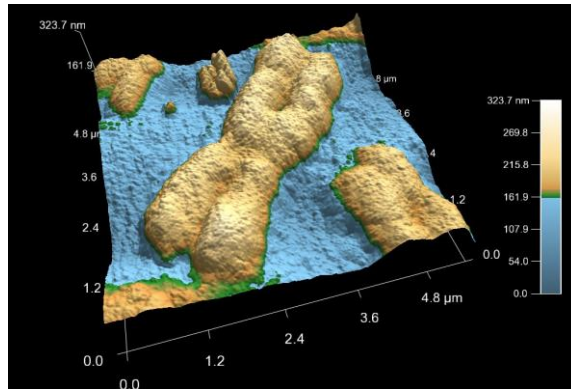
## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

<http://www.youtube.com/watch?v=BrsoS5e39H8>

## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

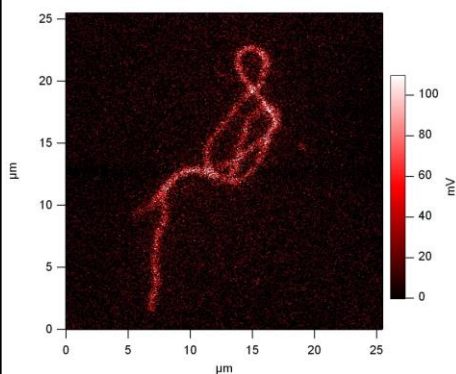


NaCl kristály AFM képe

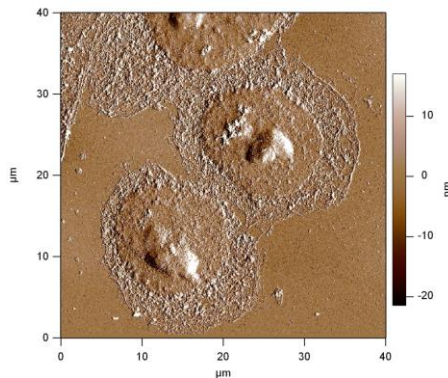


Humán metafázisos kromoszóma AFM képe

## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



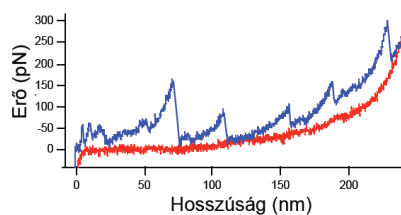
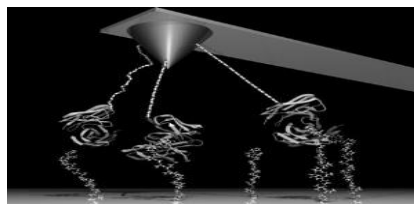
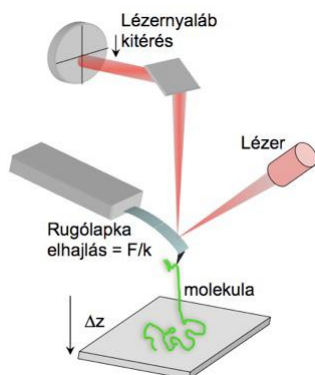
Egyedi aktinpolimer AFM képe



HeLa sejtek AFM képe

## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

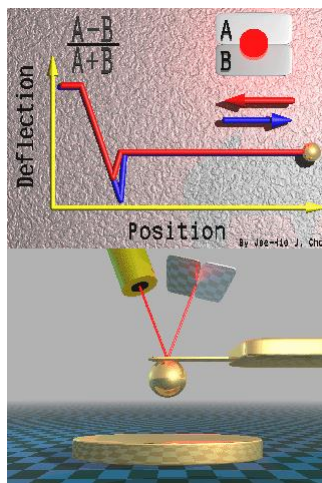
**Erőspektroszkópia:** a mintát érő nyomási és húzási ciklusok során regisztrált erőválaszok. (erő – távolság függvény)  
~10 pN érzékenység



## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

**Erőspektroszkópia:** a mintát érő nyomási és húzási ciklusok során regisztrált erőválaszok. (erő – távolság függvény)

~10 pN érzékenység



Köszönöm a figyelmet!

