

Anyagszerkezet, kölcsonhatások, AFM

Orvosi Biofizika I. 2024. október 1.

Kellermayer Miklós

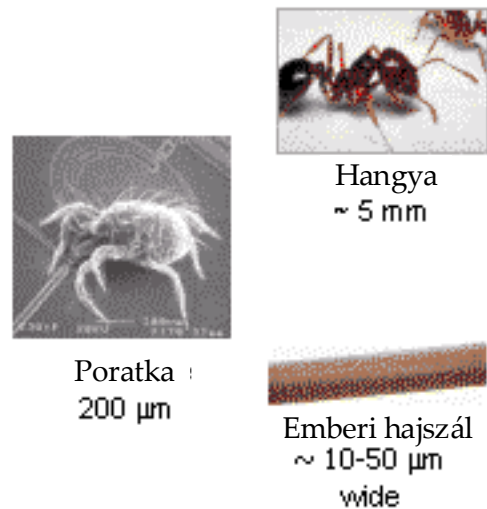
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet



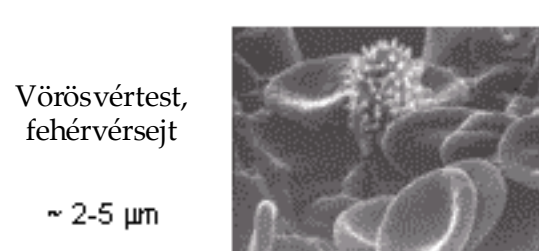
SEMMELWEIS
EGYETEM 1769

Biomolekuláris rendszerek méretskálája

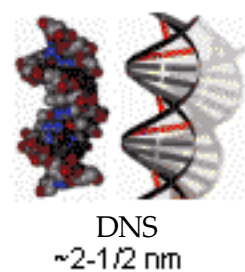
Termodinamika



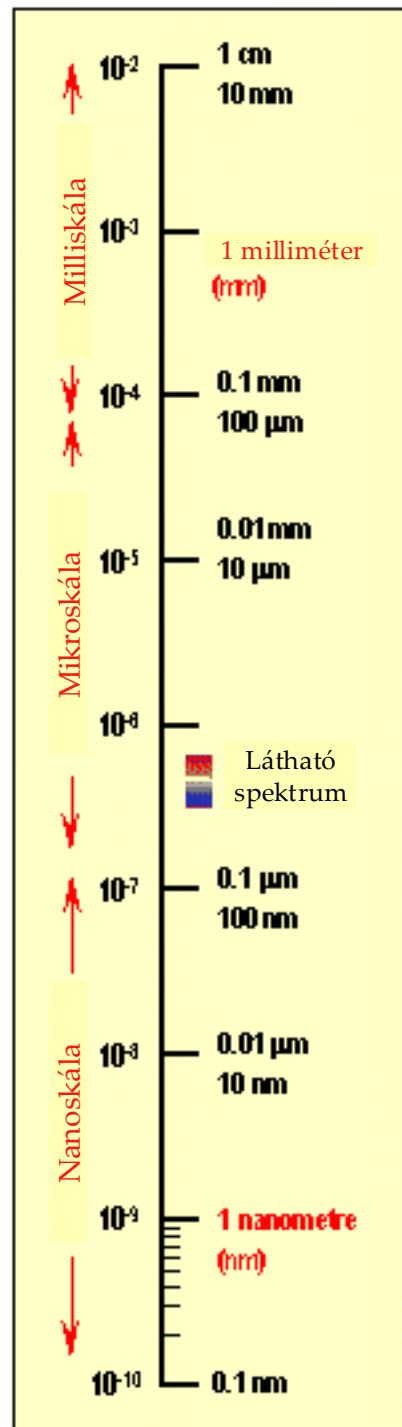
Mezoscála



Kvantumkémia



Kvantumfizika



10²³ Atom

10¹⁰ Atom

10³ Atom

10¹ Atom

10⁰ Atom

“Ha egy világhátrófa következtében minden tudományos ismeretanyag megsemmisülne és csak egyetlen mondat maradna örökségül a következő civilizációra, mi lenne az a mondat, amely a legtömörebb megfogalmazásban a legtöbb információt sűrítene magában? Úgy vélem ennek a mondatnak az **atomok hipotézisét** (vagy ha úgy tetszik, az atomok létezésének **tényét**) kellene tartalmaznia: azt, hogy **minden dolog atomokból épül fel - állandóan mozgó kis részecskékből, amelyek vonzzák egymást ha kis távolságra vannak, és taszítják egymást, ha egyiket a másikba préselik.** ...ez a megállapítás hihetetlen mennyiségű információt tartalmaz a világról, csupán egy kis logika és fantázia kell hozzá.”

(Richard P. Feynman, Nobel-díjas fizikus)

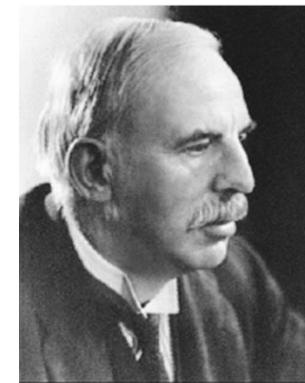
Korai atomelméletek



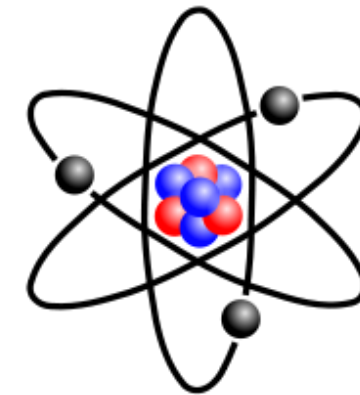
Démokritosz (Kr. e. 460-370)
Anyagi világ oszthatatlan részecskékből (atomos) áll.



Joseph John Thomson (1856-1940)
Az elektron felfedezője.



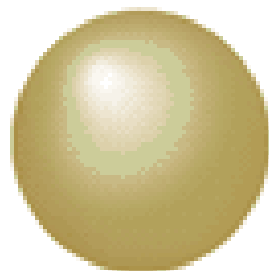
Ernest Rutherford (1871-1937)



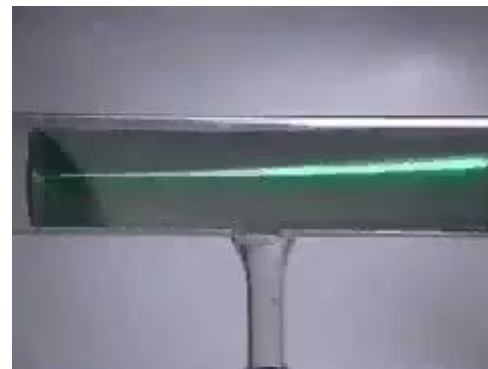
Rutherford-féle atommodell: parányi naprendszer



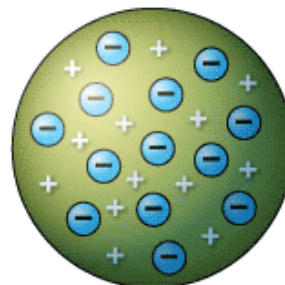
John Dalton (1766-1844)
Egy-egy elem azonos atomokból.



Dalton atomja

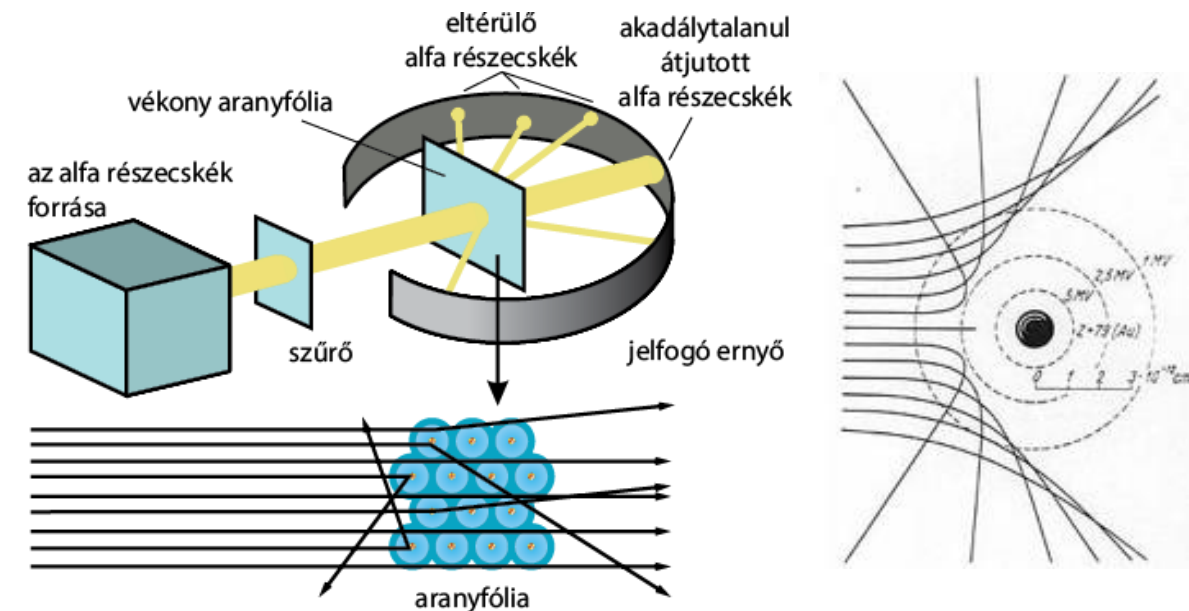


Katódsugár (elektronnyaláb) vákuumcsőben.



“Mazsoláspuding” atommodell

Rutherford-féle kísérlet
Az atommag átmérője az atomátmérő ~százezred része!



Probléma:
-instabil atom
-elektronok: centripetális gyorsulás - sugárzás - energiavesztés - atommagba zuhanás

Az atom energiája kvantumokban változik

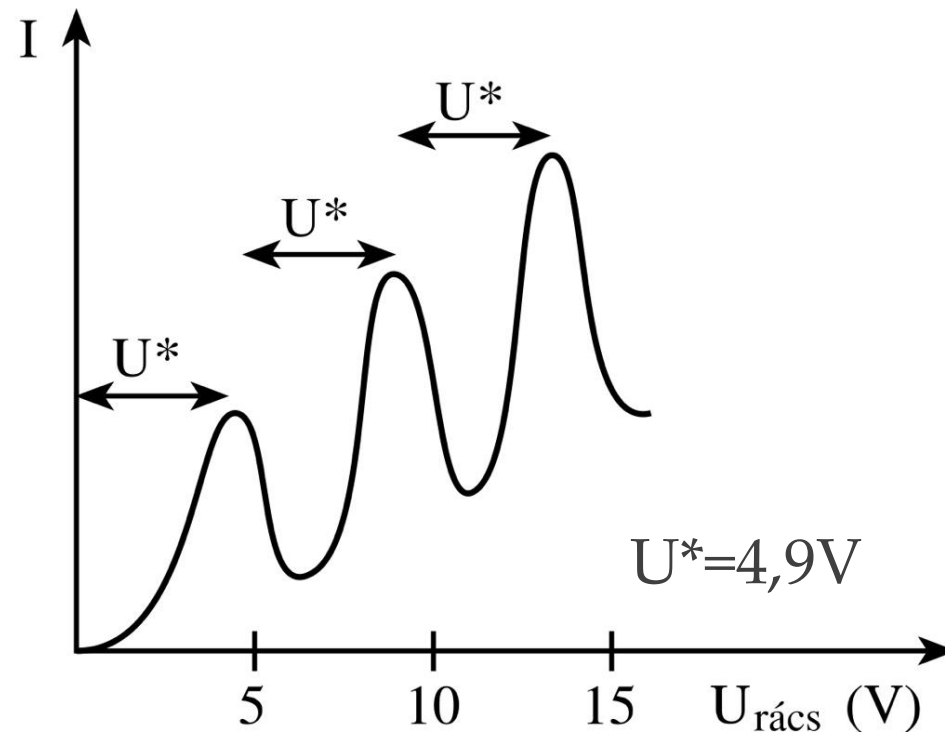
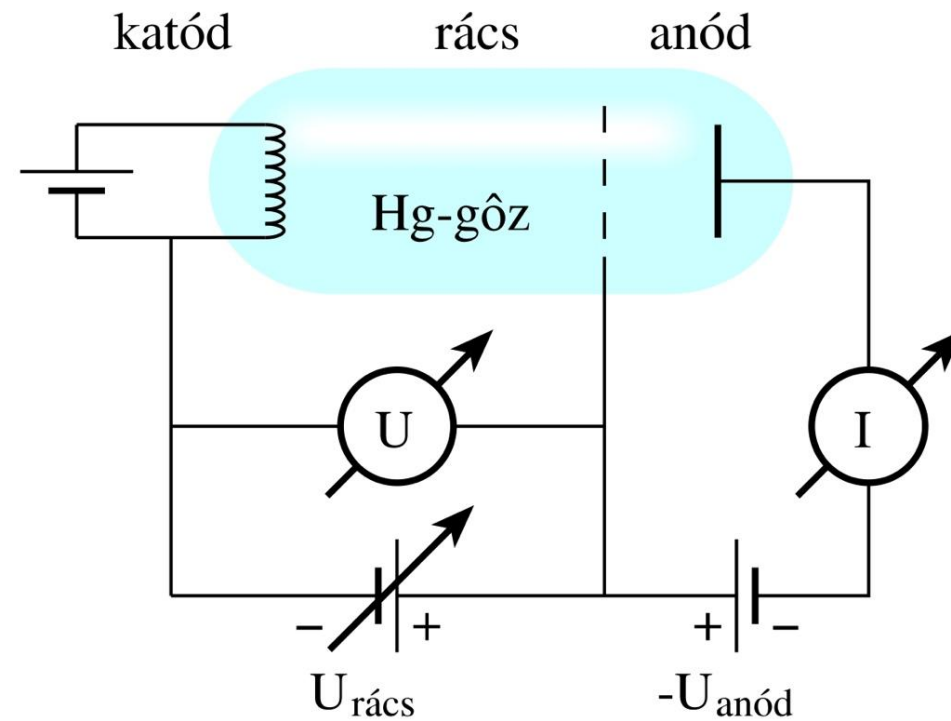
Franck-Hertz kísérlet (1914)



James Franck (1882-1964)



Gustav Ludwig Hertz (1887-1875)

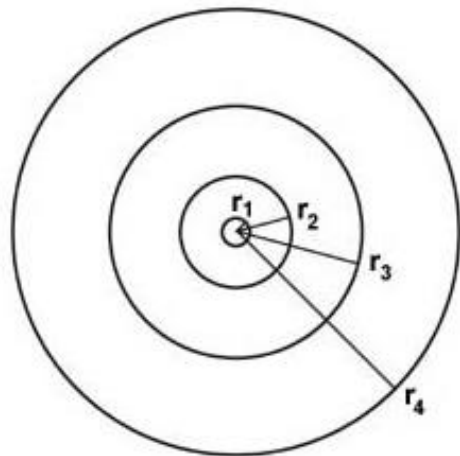


A rácsfeszültséggel felgyorsított elektronok a Hg atomokkal való rugalmatlan ütközés során mozgási energiájukat diszkrét adagokban (“kvantum”) veszítik el.

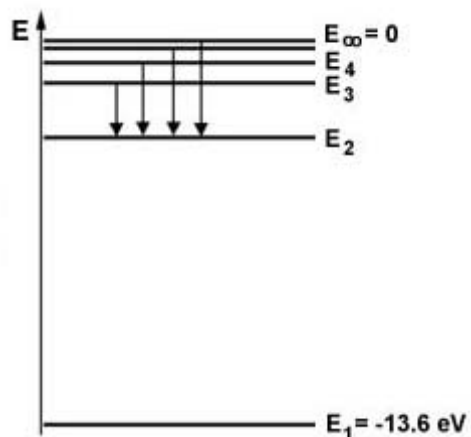
Bohr-féle atommodell



Niels Bohr (1885-1962)



A hidrogén Bohr modellje



A hidrogén energiaszintjei Bohr szerint

Bohr-féle posztulátumok

1. Kvantumfeltétel:

- Az atom elektronjai csak meghatározott pályákon keringhetnek.
- Ezen a pályákon az elektron nem sugároz, energiája állandó.
- A pályákon keringő elektron impulzusnyomatéka (perdület, L) a $h/2\pi$ egész számú többszöröse:

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

n = főkvantumszám. Az elektronpályák sugarai kiszámíthatóak. Az első pálya sugara $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m ("Bohr-rádiusz"). A további pályák sugarai:

$$r_n = n^2 r_1$$

2. Frekvenciafeltétel:

- Az atom csak akkor sugároz (i.e., fényt bocsát ki), ha az elektron az egyik pályáról a másikra ugrik.
- A kisugárzott energia nagysága a két pályaeenergia különbsége:

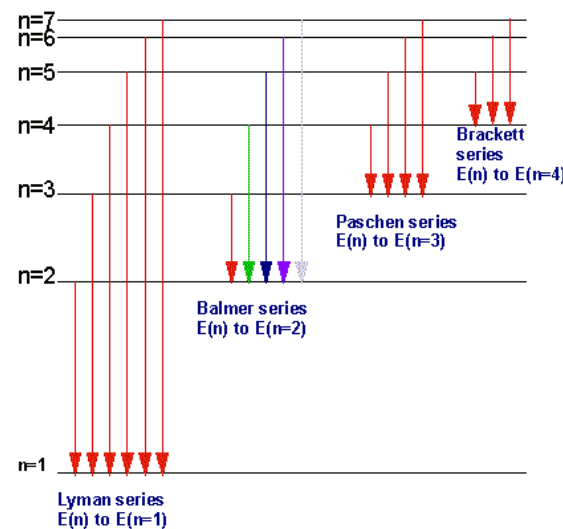
$$E_{\text{foton}} = h\nu = E_2 - E_1$$

A pályaeenergiák kiszámíthatóak. Az első pálya energiája $E_1 = -13,6$ eV. A további pályaeenergiák:

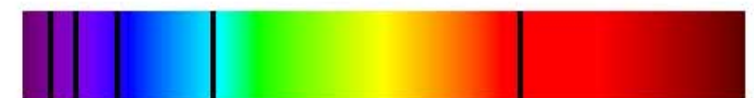
$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

Jelentőség

- Megmagyarázta a hidrogén spektrumvonalait. De csak a hidrogénét.
- Abszorpciós/emissziós spektroszkópia
- Lézerműködés



Hydrogen Absorption Spectrum

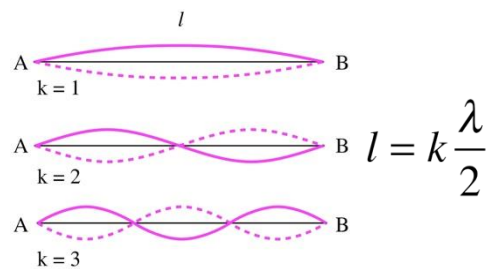


Hydrogen Emission Spectrum



Az elektron mint hullám

Kvantáltóság kifeszített húron kialakuló állóhullámokban

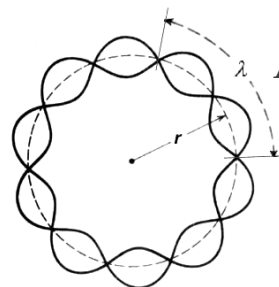


Elektron mint hullám



Louis V. de Broglie (1892-1978)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e v}$$



Atomi elektron mint állóhullám

Kvantumfeltétel:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv}$$

Elektronhullám terjedési törvénye



Erwin Schrödinger (1887-1961)

Ψ (pszi) hullámfüggvény:

- $[\Psi(x,t)]$: elektronhullám helytől (x) és időtől (t) függő amplitudóját adja meg.
- Ψ^2 : megadja az elektron találati valószínűségét.
- Ψ^2 : integrálva a teljes térre = 1 (i.e., az elektron valahol biztosan megtalálható).
- Ψ a Schrödinger egyenlet segítségével megadja az elektron energiáját.
- Szabad elektronra Ψ szinuszfüggvény: impulzus pontosan meghatározott ($p=h/\lambda$), hely (x) teljesen bizonytalan (határozatlansági reláció!)



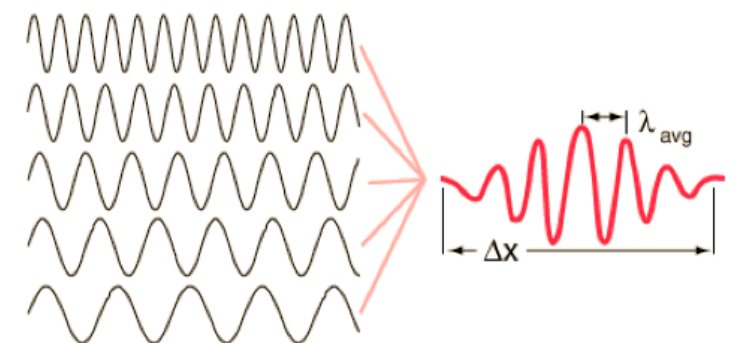
Szabadon terjedő részecske hullámfüggvénye (helyzeti energia = 0)

Határozatlansági reláció



Werner Heisenberg (1901-1976)

A helymeghatározás pontosításához különböző hosszúságú (λ) hullámokat szuperponálunk:



Minél szélesebb λ eloszlása ($\Delta\lambda$), annál pontosabb a helymeghatározás (Δx csökken), azonban annál jobban szétkenődik az impulzus (Δp nő):

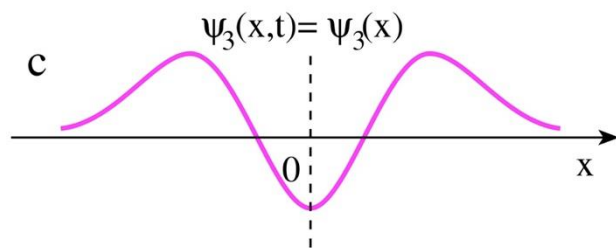
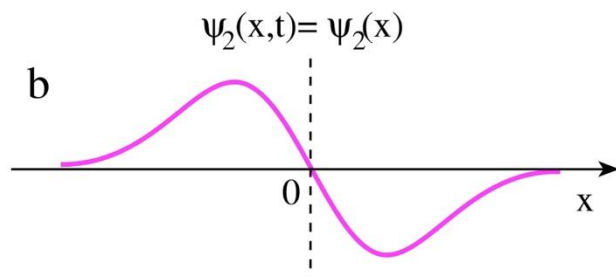
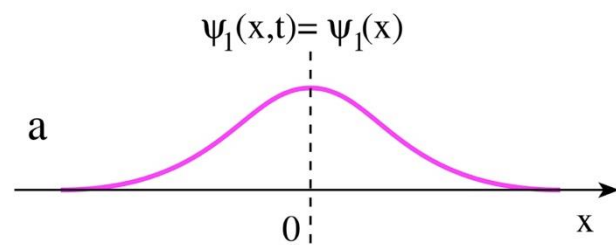
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

Kvantummechanikai atommodel

Az atomban minden elektron adott állapotban létezik, megtalálási valószínűsége a mag körül adott mintázatot alkot.

Kvantummechanika:

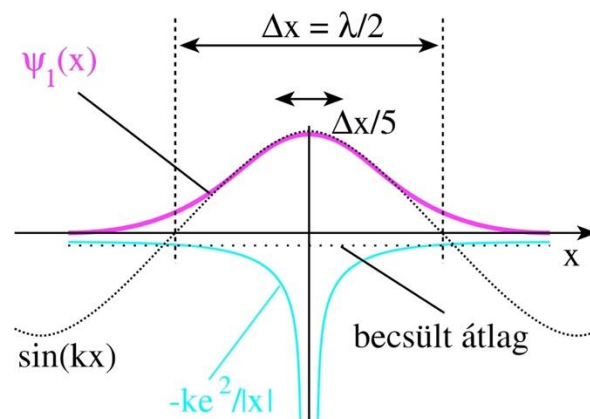
1. leírja az elektronok állapotát (egy állapot → egy hullámfüggvény, Ψ)



2. kiszámítja az elektron legvalószínűbb helyét (orbitál, r) és energiáját (E)

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r}$$

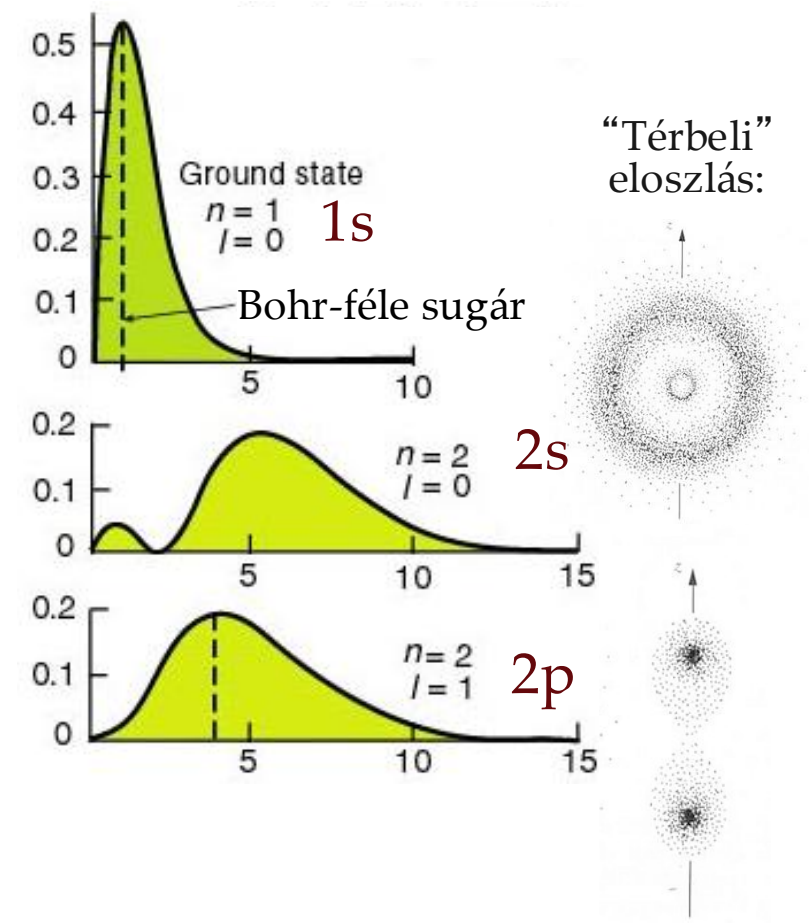
Az atomban a Coulomb vonzás határozza meg a helyzeti energiát:



Egyszerűsített Schrödinger egyenlet:

$$\left(\frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} \right) \Psi = E\Psi$$

Elektron megtalálási valószínűség eloszlása hidrogénatomban:



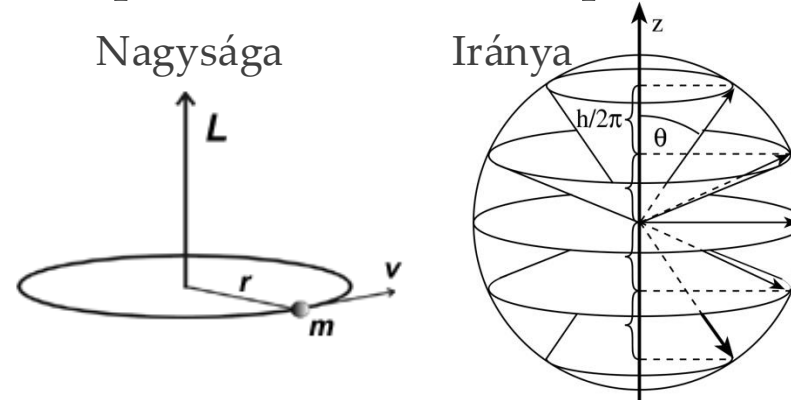
Kvantumszámok

A kvantumszámok az elektron állapotát leíró **fizikai mennyiségeket** jellemezznek:

1. Energia

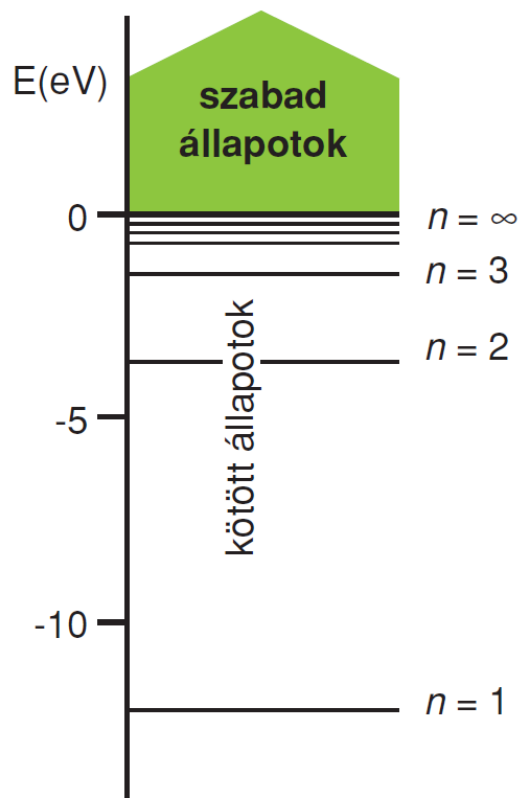
Az adott állapotban tartózkodó elektron energiája

2. Impulzusmomentum (perdület)



3. Saját perdület (spin)

Forgásból származó perdület, nagyság, irány



Kvantumszám	Jele	Kvantált mennyiség	Képlet	Lehetséges egész értékek
fő	n	energia	$E_n = \frac{E_1}{n^2}$	1, 2, 3, ...
mellék	l	perdület nagysága	$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$	0, 1, ..., $n-1$
mágneses	m	perdület iránya	$L_z = m \hbar$	$-l, \dots, 0, \dots, l$
spin	s	saját perdület nagysága	$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$	$\frac{1}{2}$
mágneses spin	m_s	saját perdület iránya	$S_z = m_s \hbar$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

Spinkvantumszám

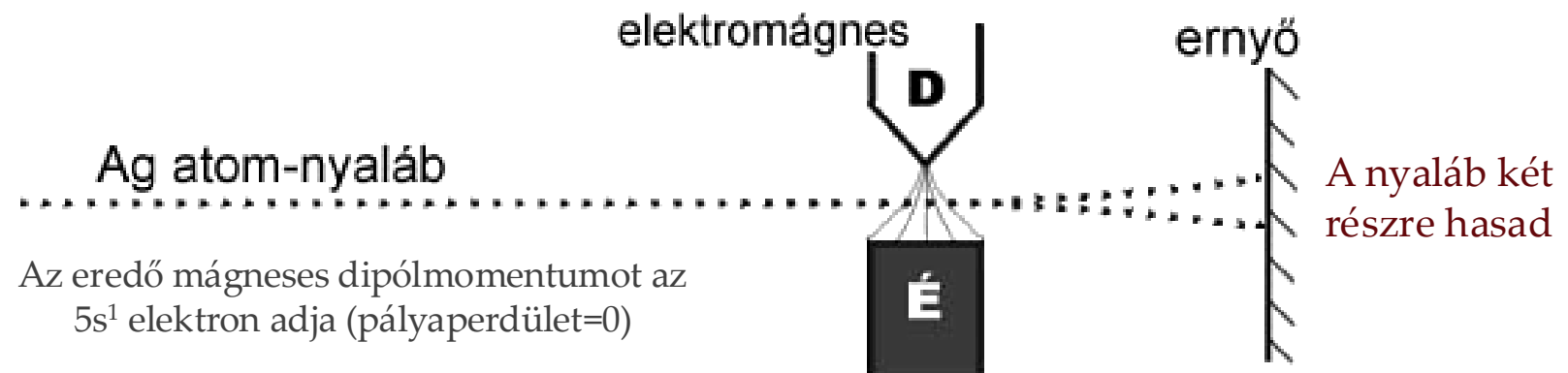
Stern-Gerlach kísérlet (1922)



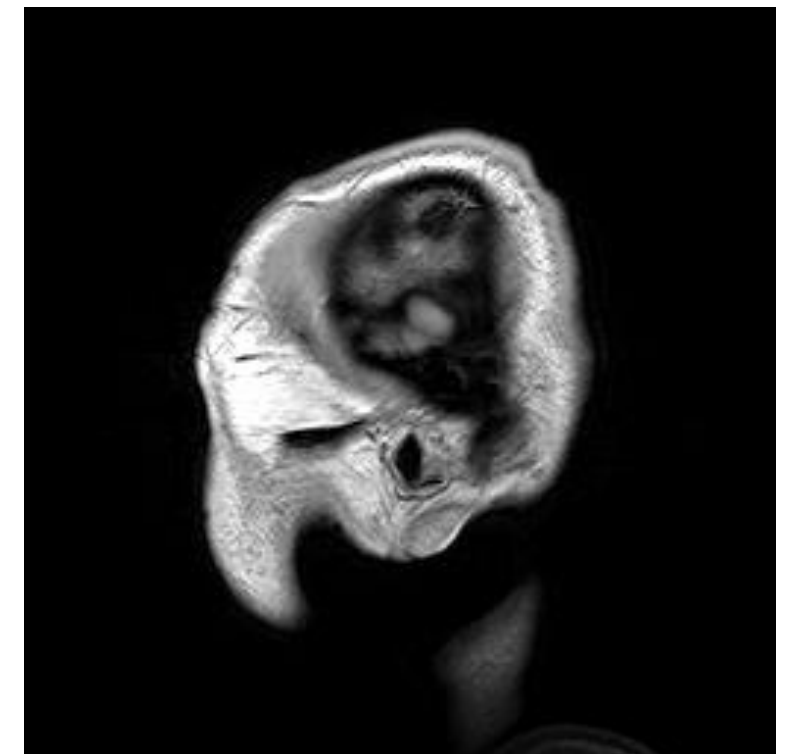
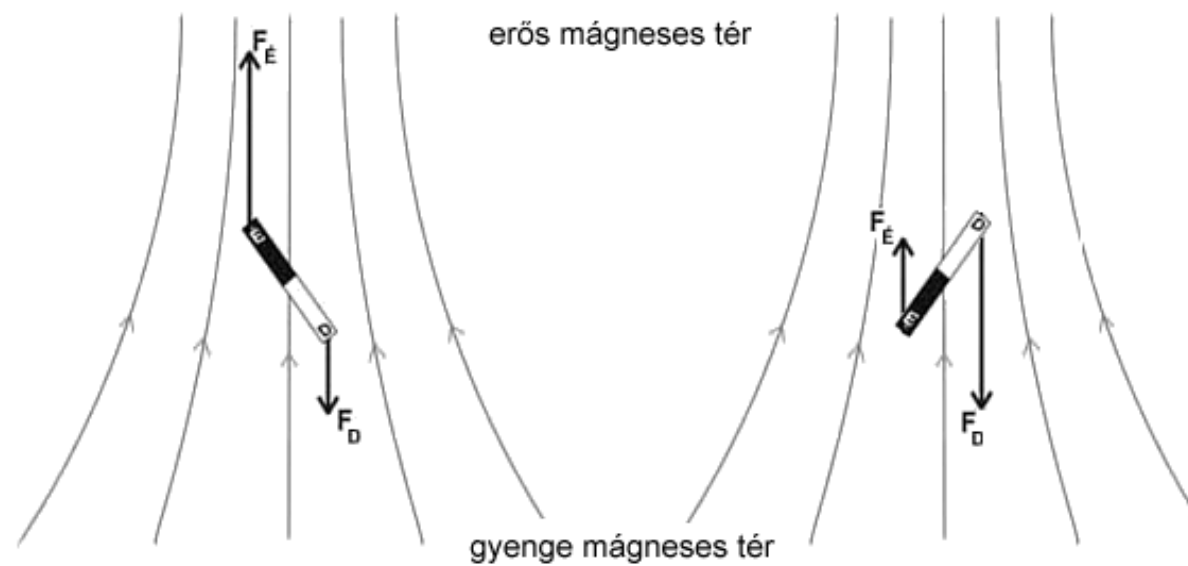
Otto Stern (1888-1969)



Walther Gerlach (1889-1979)



Inhomogén mágneses térben nemcsak forgatónyomaték, hanem eredő erő is hat a mágneses dipólra:



MRI

A spin mágneses momentum két értéket vehet fel.

A periódusos rendszer felépülése

Kötött atomi elektronállapot egyértelmű jellemzése: n, l, m_l, m_s kvantumszámokkal

$n \rightarrow$ elektronhéj
 $n, l \rightarrow$ elektron-alhég
 $n, l, m_l \rightarrow$ elektronpálya

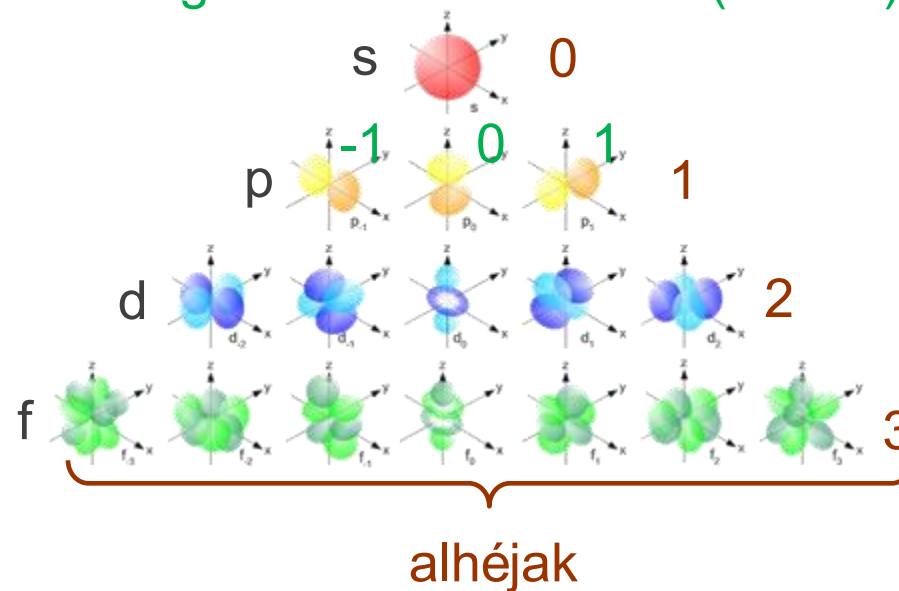


Wolfgang Pauli (1900-1958)

Pauli-elv:

- Minden kvantumállapotot csak egyetlen elektron tölthet be.
- Egy atomon belül nem létezhet két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik.

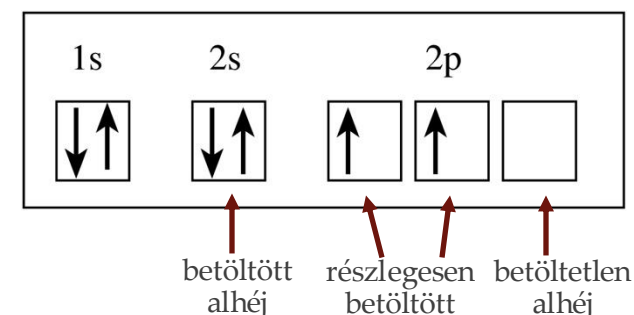
l : mellékkvantumszám ($n-1$)
 m : mágneses kvantumszám ($-l \rightarrow +l$)



Friedrich Hermann Hund (1896-1997)

Hund-szabály:

- Kvantumállapotok betöltésének sorrendje.
- Az az állapot rendelkezik a legalacsonyabb energiával, amelynek eredő spinértéke a legnagyobb.

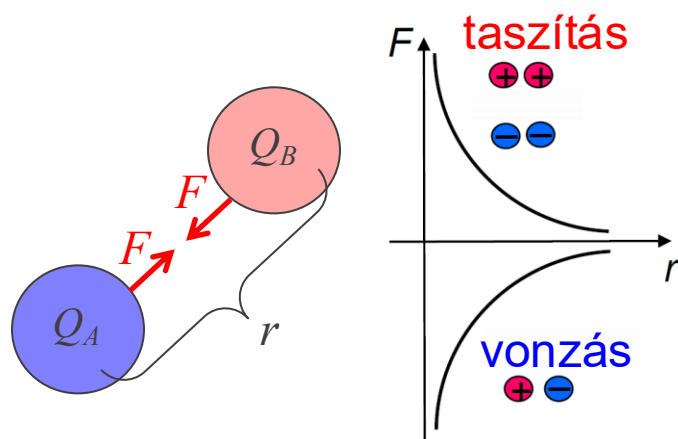


C atom elektronkonfigurációja
 s: "sharp", p: "principal", d:
 "deformed/diffuse" (spektroszkópiai
 jelölések)

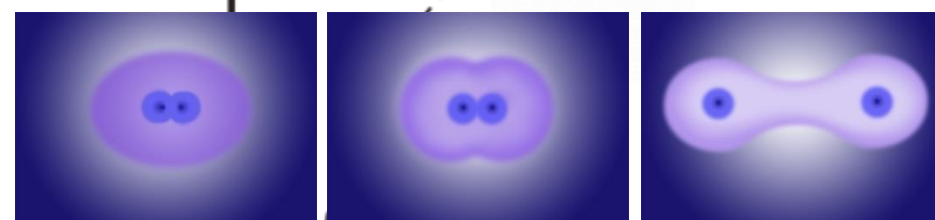
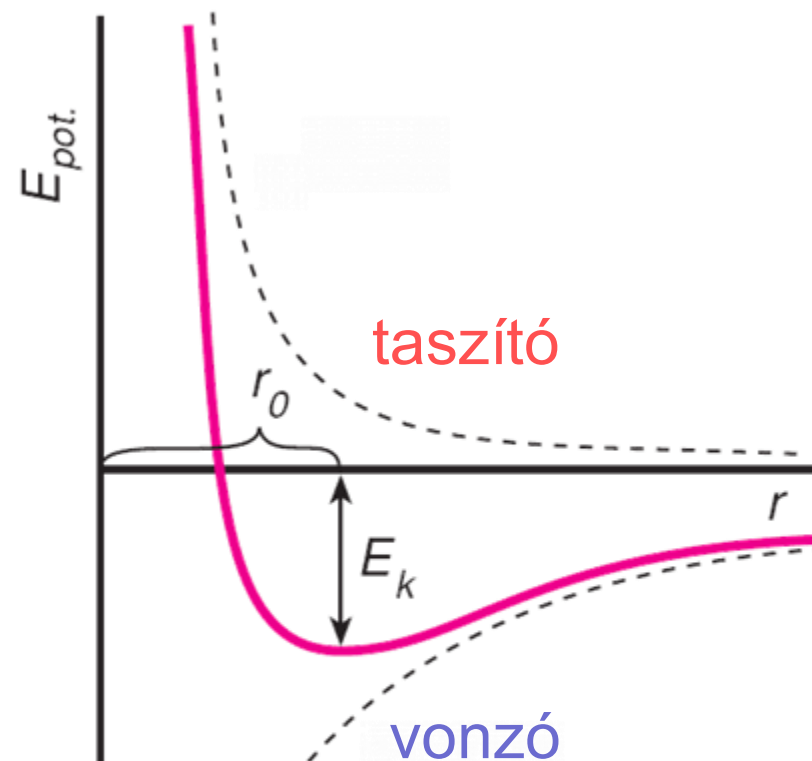
Kölcsönhatások

Kölcsönhatás	Mire hat?	Hatótávolság (m)	Relatív erősség
gravitáció	minden részecskére	végtelen ($\sim 1/r^2$)	10^{-40}
elektrosztatikus (Coulomb)	elektromosan töltött részecskékre	végtelen ($\sim 1/r^2$)	10^{-2}
erős nukleáris	nukleonok	10^{-15}	1
gyenge nukleáris	minden részecskére	10^{-18}	10^{-13}

Coulomb-kölcsönhatás



$$F_C = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r^2}$$



taszítás

egyensúly

vonzás

$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító}$$

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

A, B: kölcsönhatásra jellemző
állandók (atomtól függ)
 n (vonzó) < m (taszító)

r_0 : kötéstávolság

E_k : kötési energia

Elsődleges kötése

intramolekuláris

intermolekuláris

erős
elsődleges

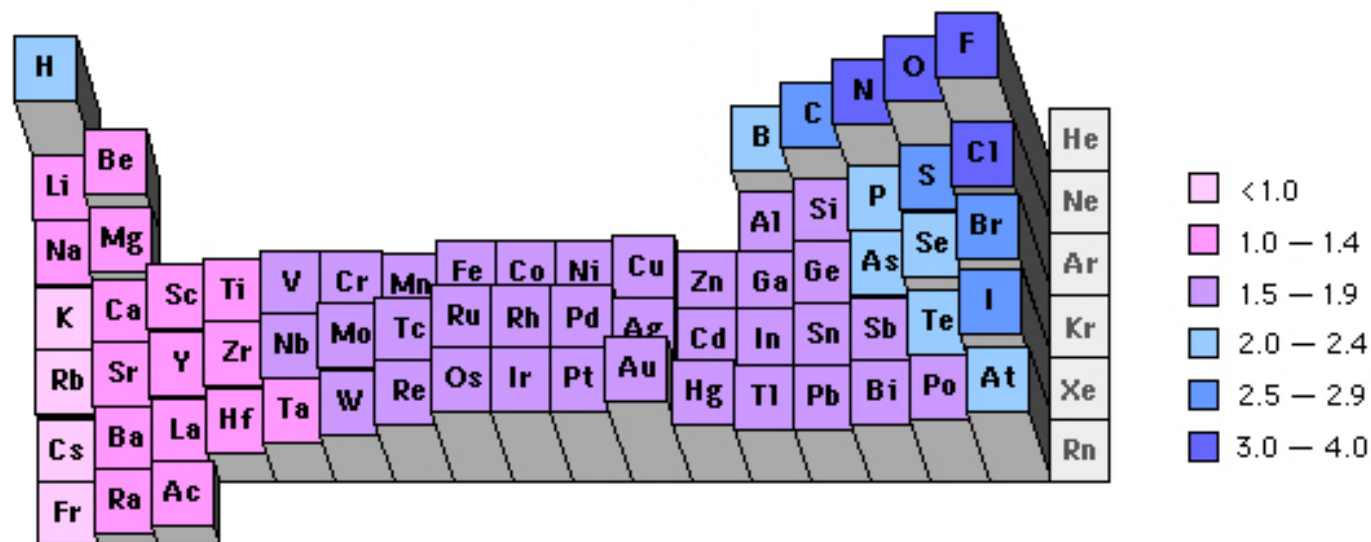


gyenge
másodlagos

- **kovalens:** közös elektronpályák a részt vevő atommagok körül, erős: $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$
- **fémek kötése:** sokatomos rendszer, $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$
- **ionos kötés:** Coulomb-erők az ionok között, $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$

kialakulásuk az **elektronegativitás (EN)** függvénye

EN: kötésben lévő atom elektronvonzó képessége

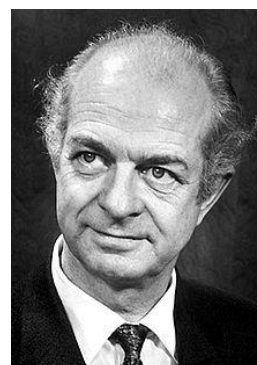


$$EN = |E_i| + |E_{ea}|$$

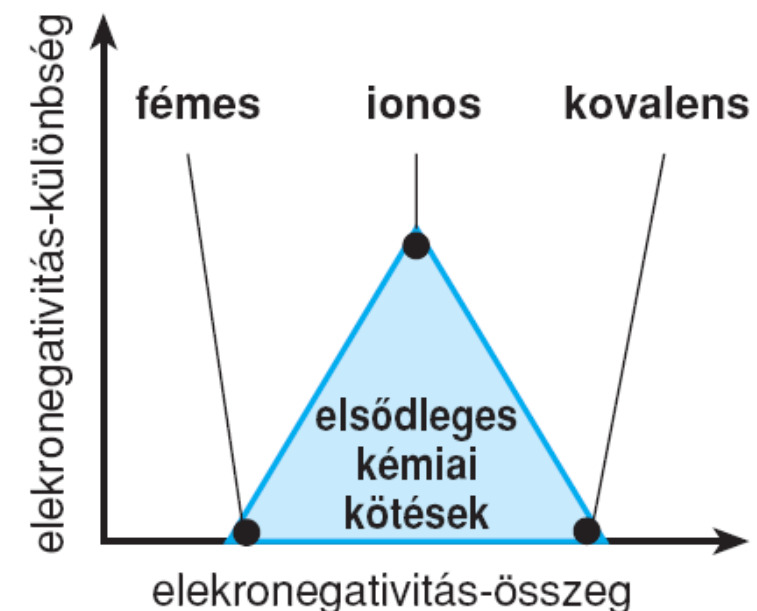
ionizációs energia

elektron-
affinitás

EN értékek Linus Pauling szerint

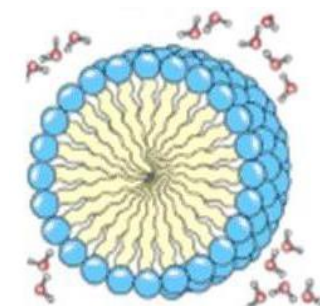
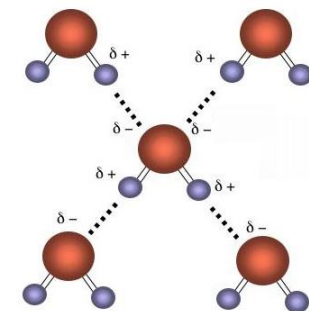
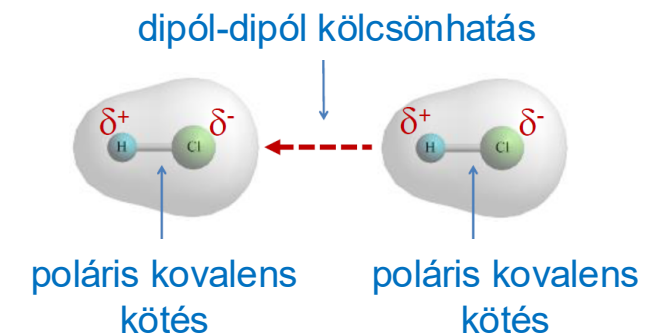
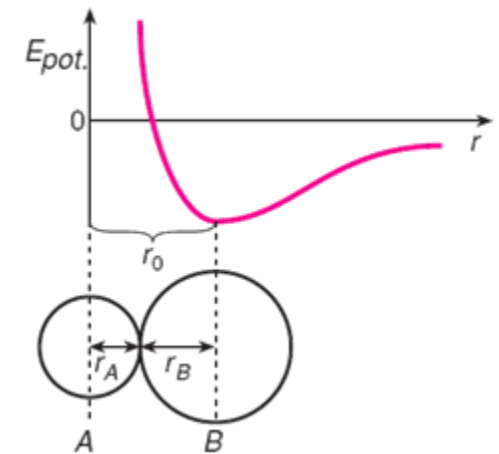


Linus Pauling
(1901-1994)

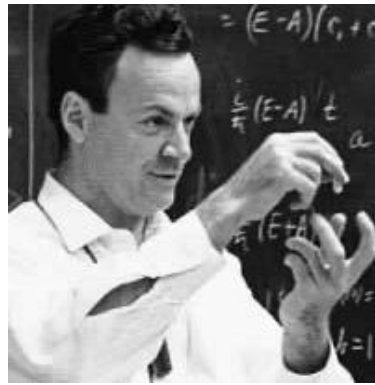


Másodlagos kötések

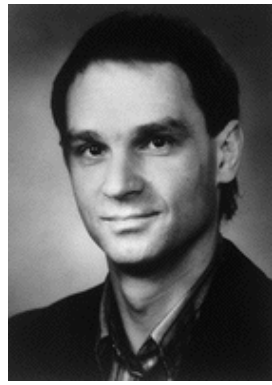
- **Van der Waals:** apoláris atomok között (állandó dipólusmomentum nélkül) ahol egy átmenetileg kialakuló dipólus hat egy apoláris molekulára vagy atomra, melyben polarizációt indukál (indukált dipólus)
 - Van der Waals sugár: $r_0 = r_A + r_B$
 - Intermolekuláris vagy intramolekuláris
 - Fontos biológiai funkció: szerves anyagok/szerkezetek kialakítása
 - Gyenge: ($E_{\text{köt}} \sim 0,02 \text{ eV}$)
- **Dipól-dipól kölcsönhatás:** A molekulában (vagy egy részében) állandó töltésmegoszlás van jelen.
 - Polarizált (+) és (-) töltésű molekularészeket elektrosztatikus kölcsönhatás (Coulomb-erő) tart össze.
 - Intra/intermolekuláris,
 - Gyenge kölcsönhatás ($E_{\text{köt}} = 0,003-0,02 \text{ eV}$).
- **H-kötés:** a H-atom két másik nagy elektronegativitású (F, O, N) atom között létesít kapcsolatot
 - $r \sim 0,23 - 0,35 \text{ nm}$
 - $E \sim 0,2 \text{ eV}$
- **Hidrofób kölcsönhatás:** gyenge Van der Waals kölcsönhatás lehetne ($E_{\text{köt}} = 0,003-0,02 \text{ eV}$), de ezt a hőmozgás felszakítaná ($kT \sim 0,025 \text{ eV}$)!
 - rendezett vízmolekulák az apoláris molekula körül (minimális határfelület)



Képkötés kölcsönhatások alapján: Atomi erőmikroszkópia (AFM)



Richard P. Feynman (1959)

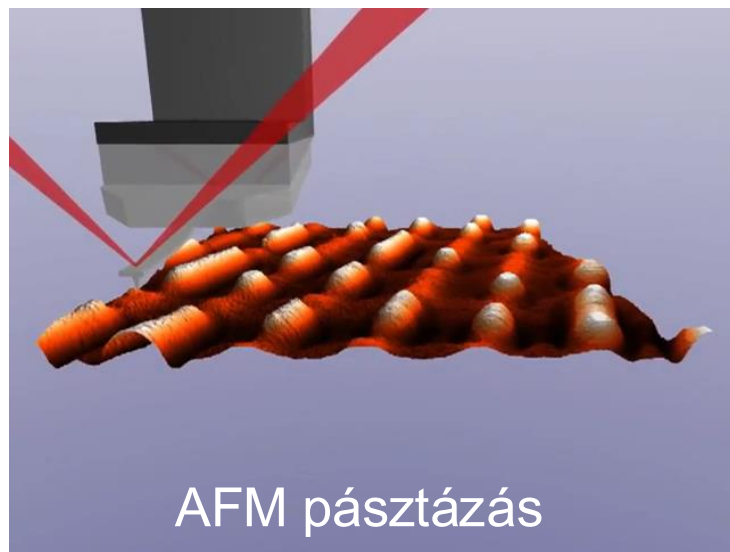
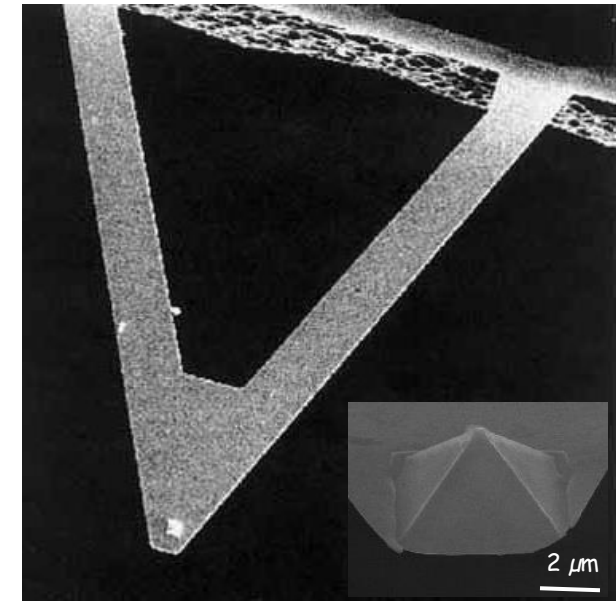
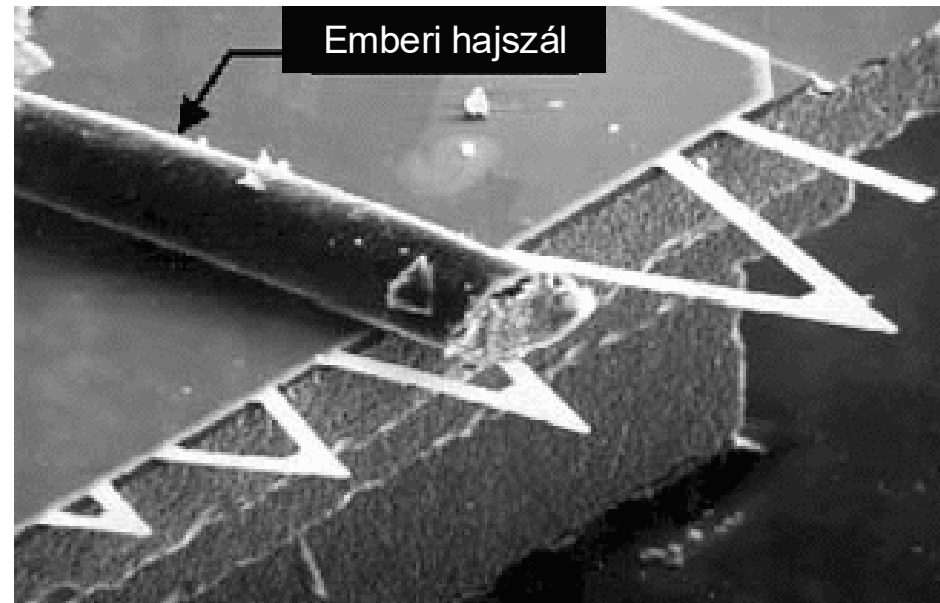


Gerd Binnig

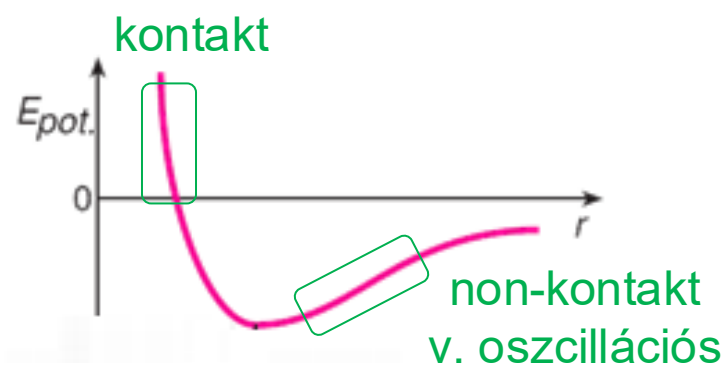


Heinrich Rohrer

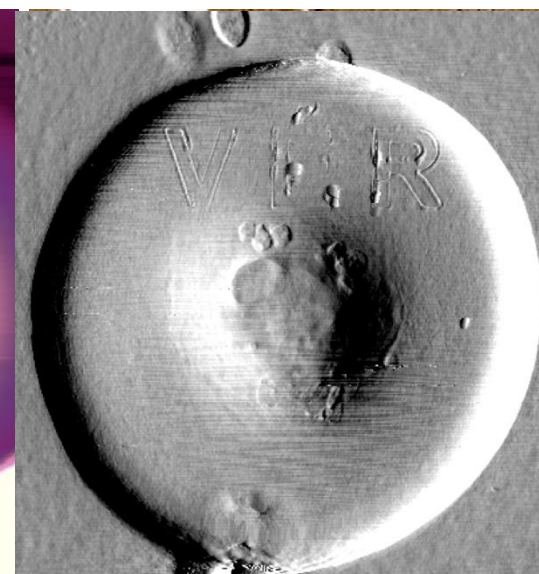
Nobel-díj 1986



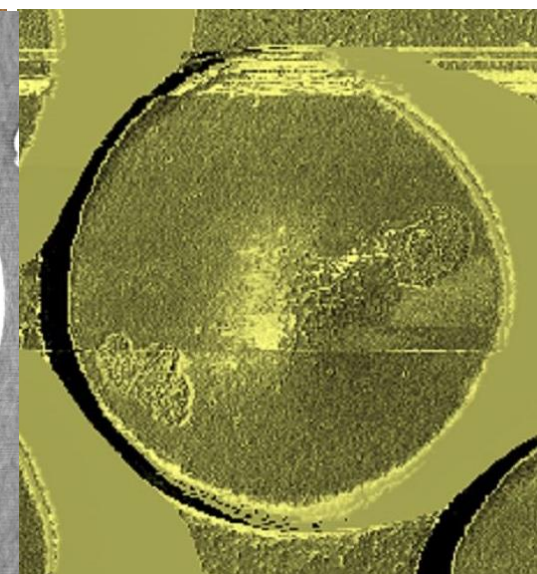
Az AFM feloldóképessége a tű görbületi sugarától függ.



Magasság kontraszt

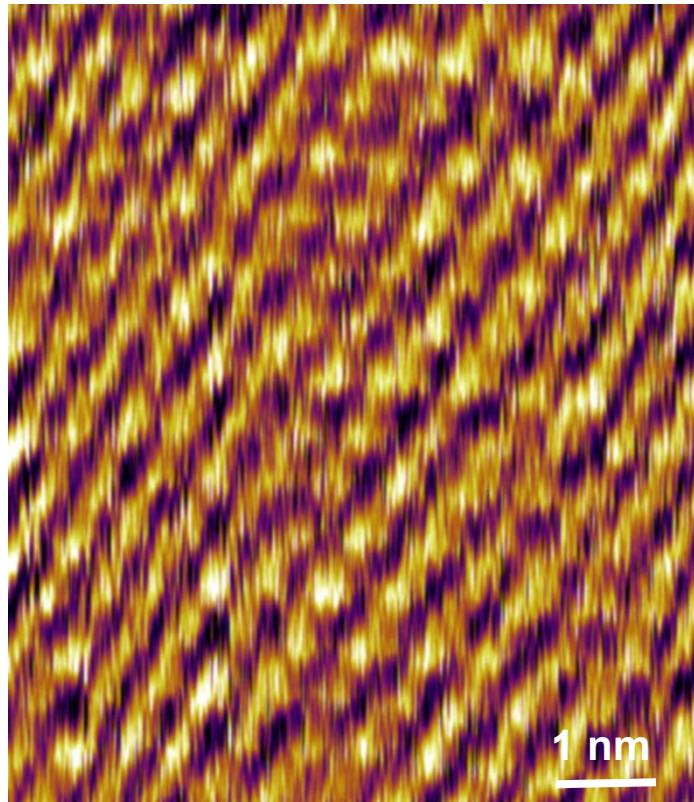


Amplitudó kontraszt

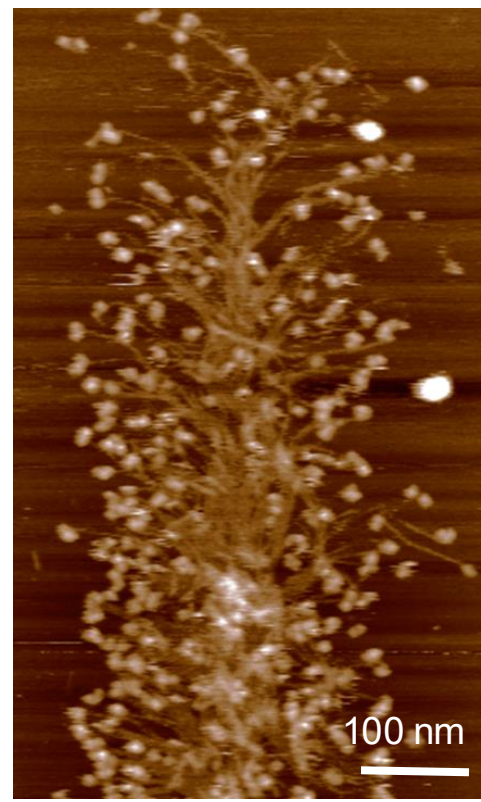


Fázis kontraszt

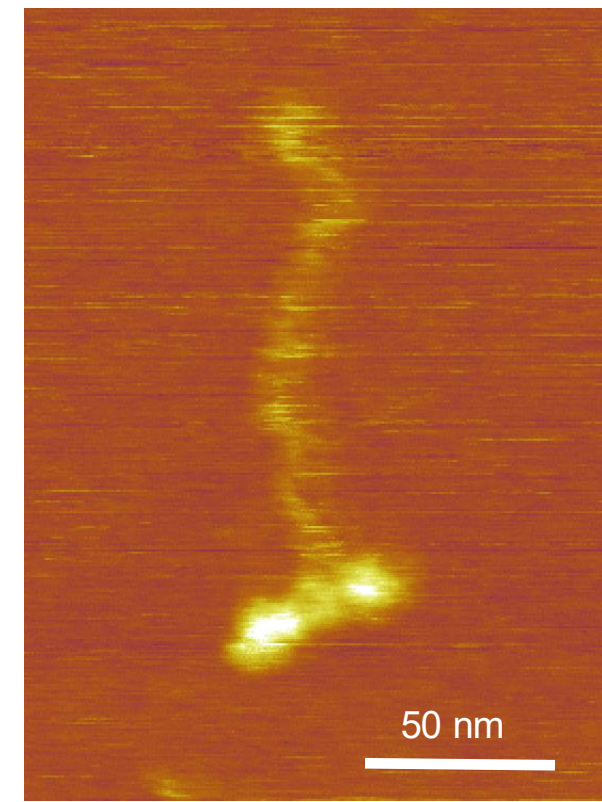
Az AFM atomi-molekuláris felbontással rendelkezik



Csillám atomi szerkezete



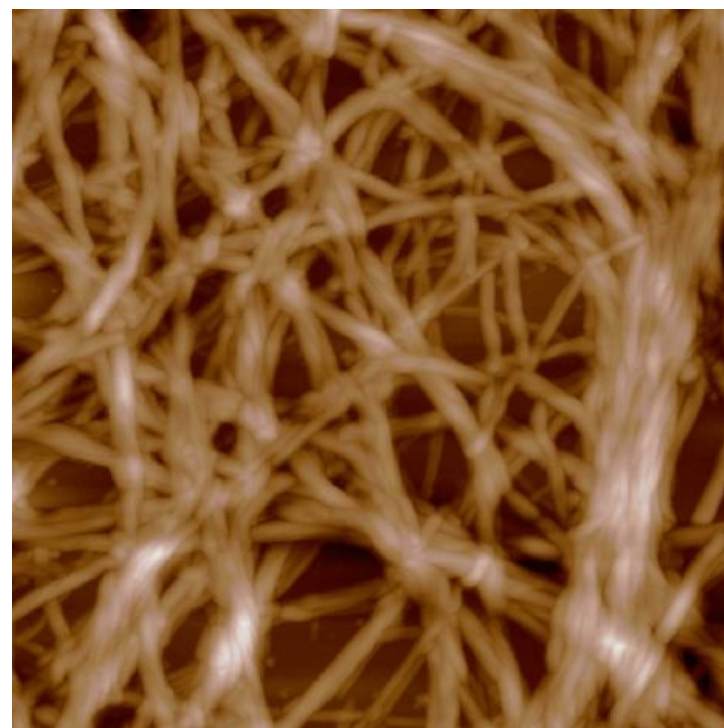
Miozin filamentum



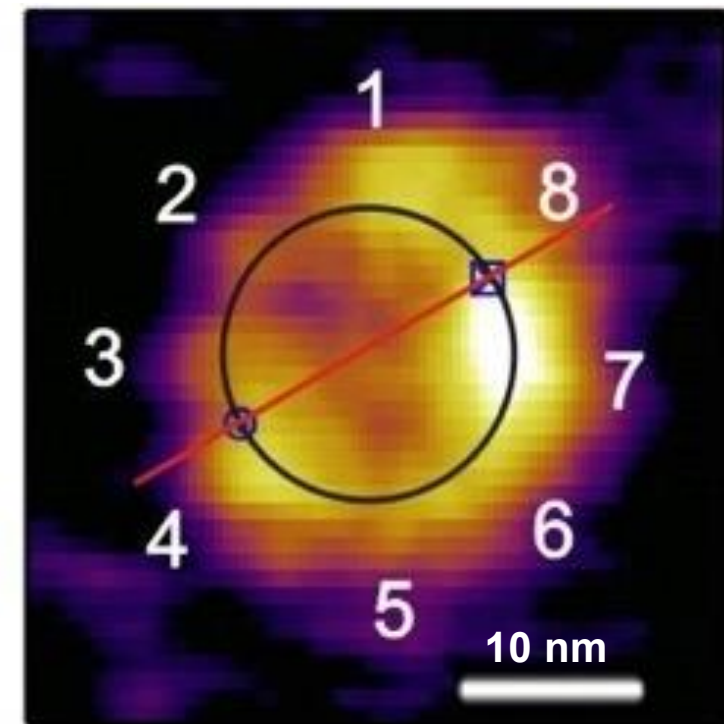
Miozinmolekula



Dezmin filamentum

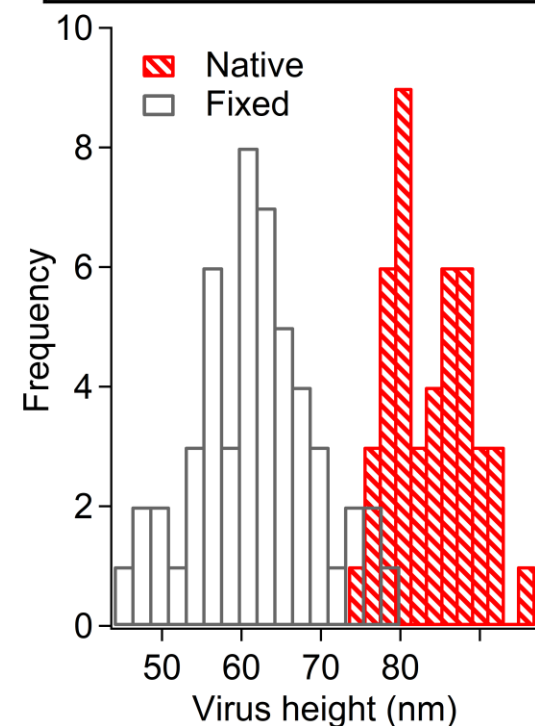
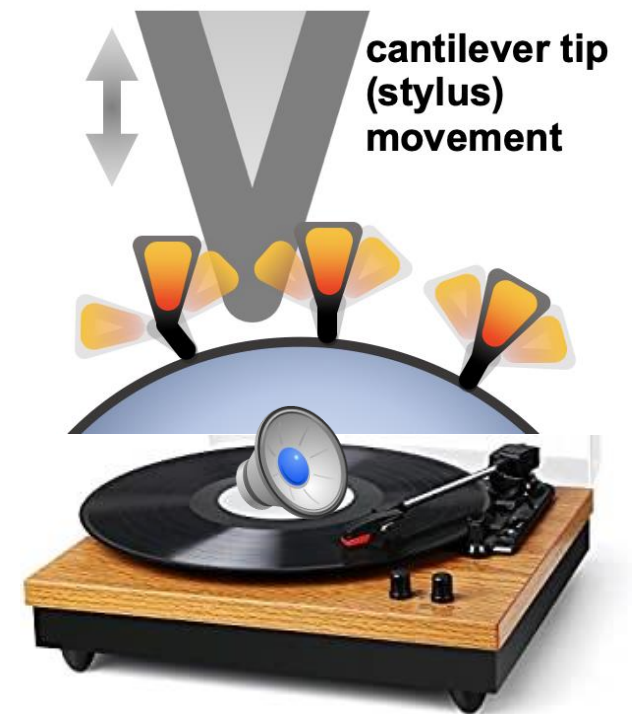
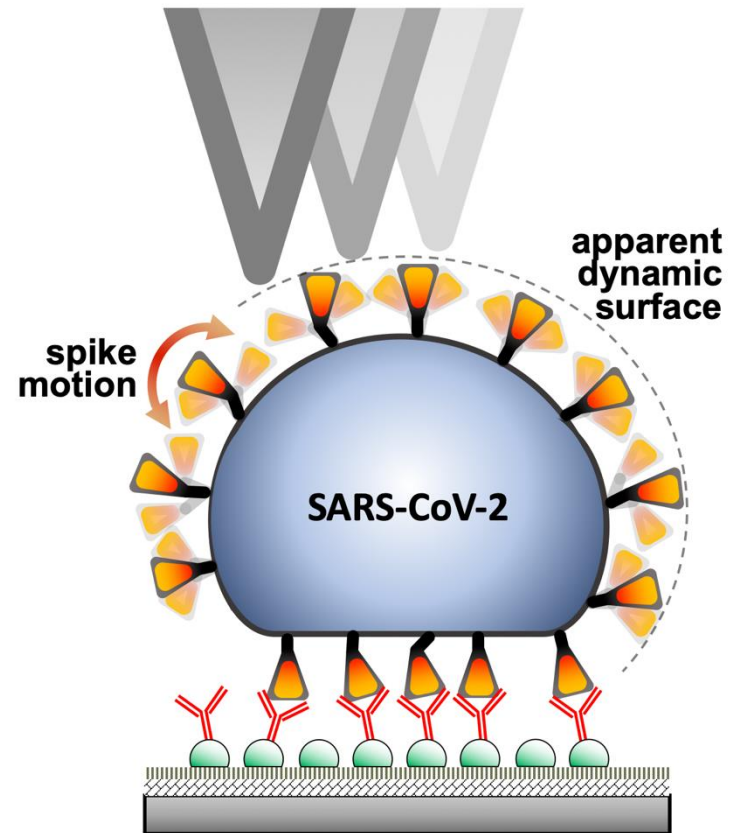
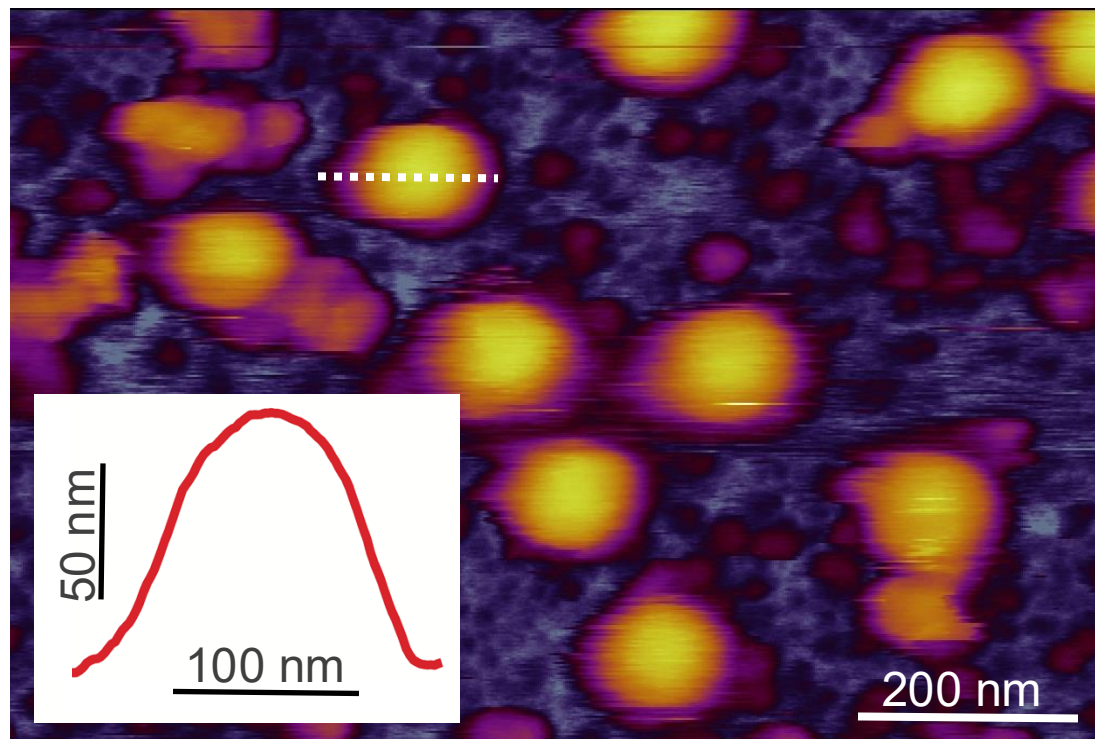
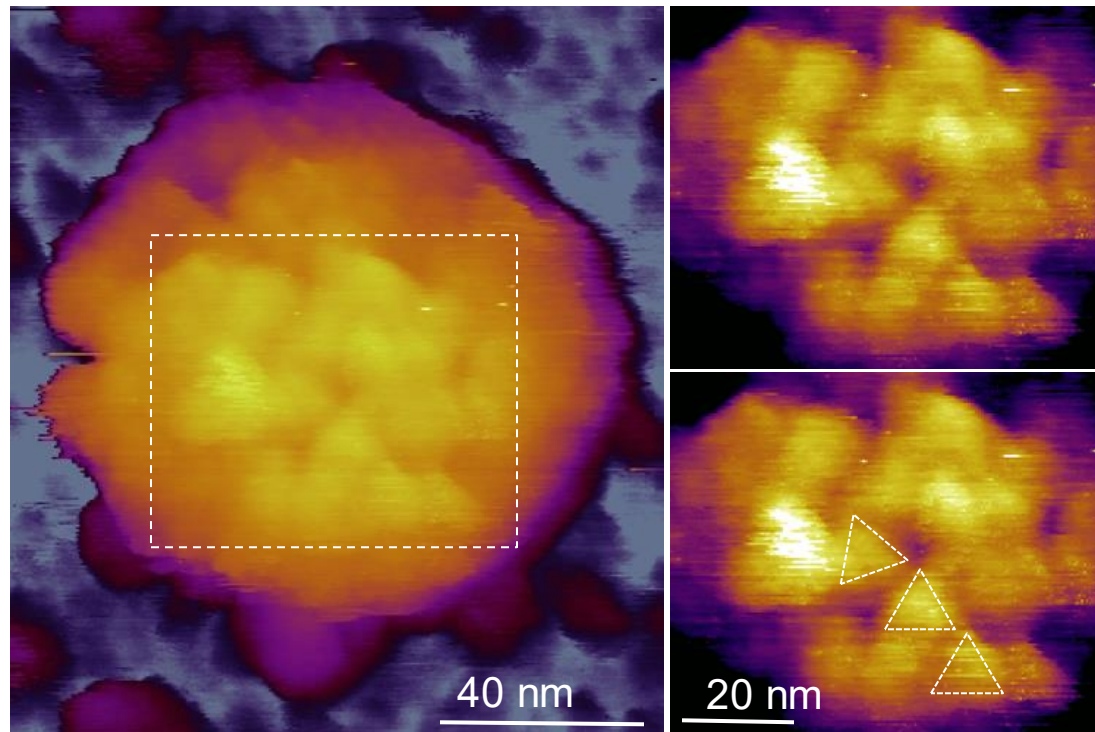


Amiloid β 1-40 fibrillumok

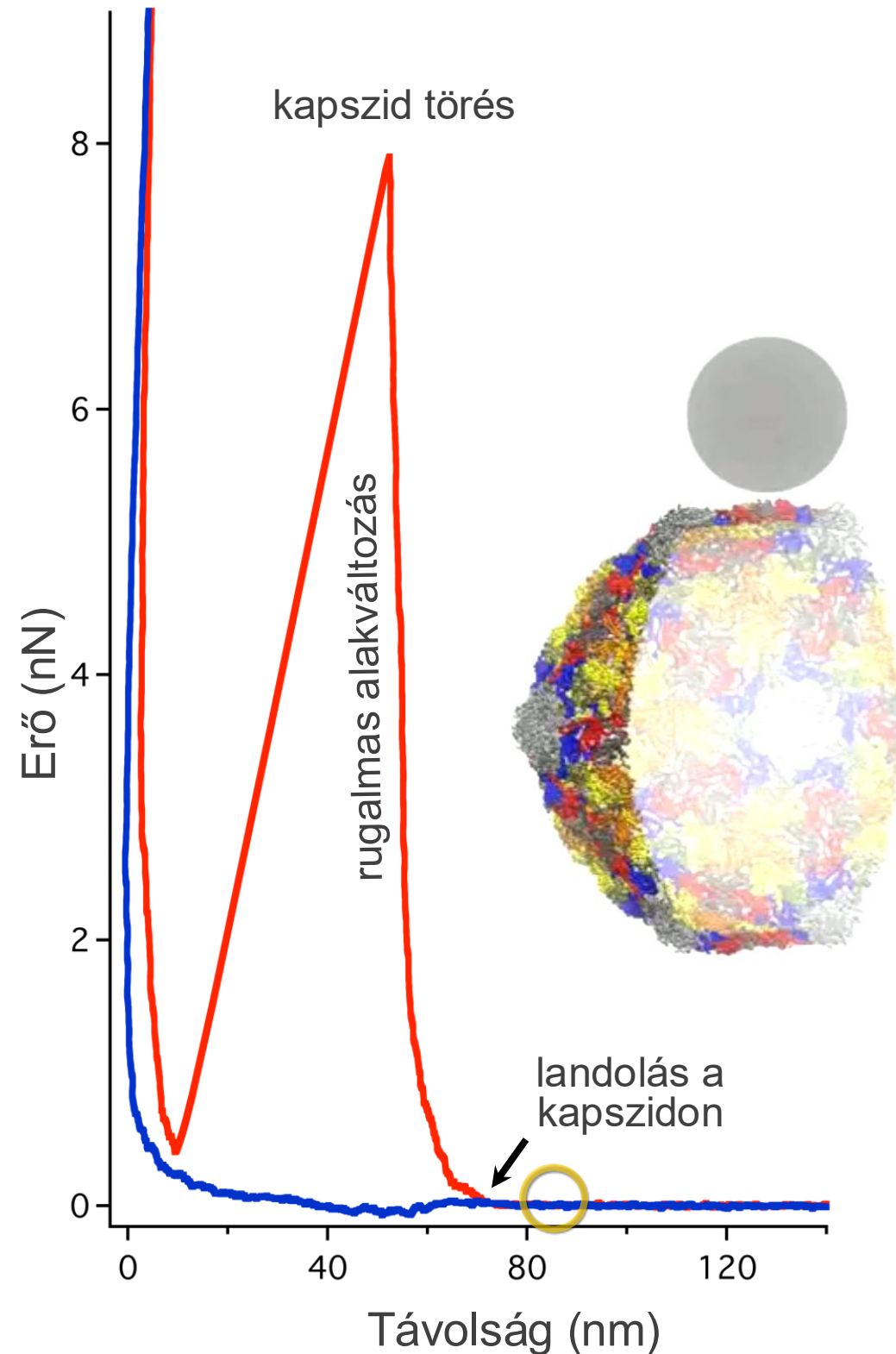


TTR gyűrű oligomer

Az AFM alkalmas a vírusszerkezet mérésére

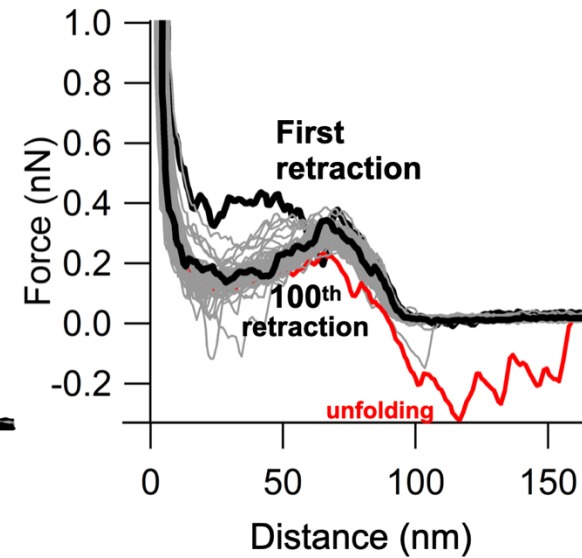
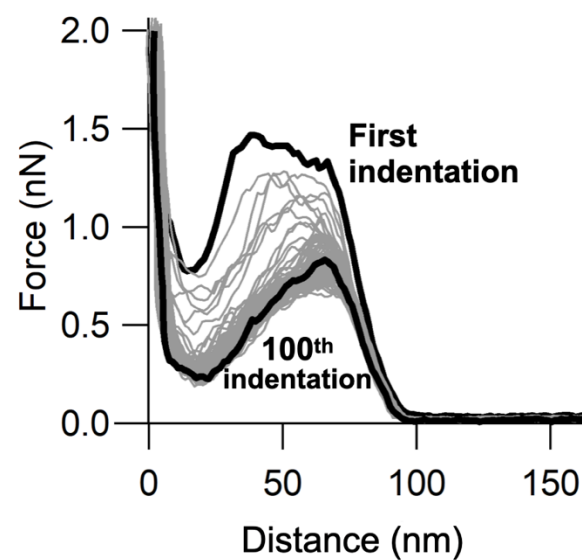
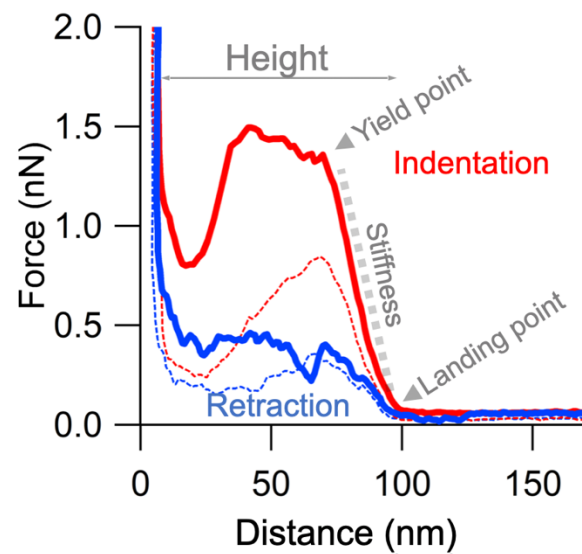
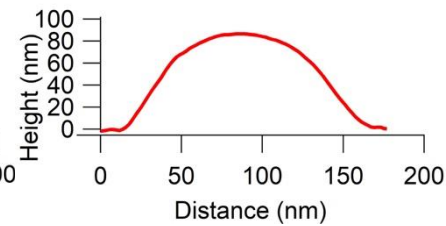
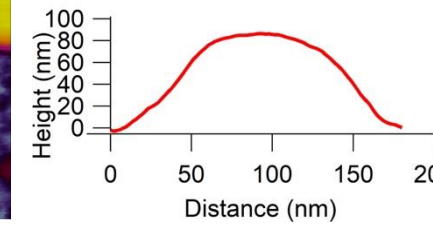
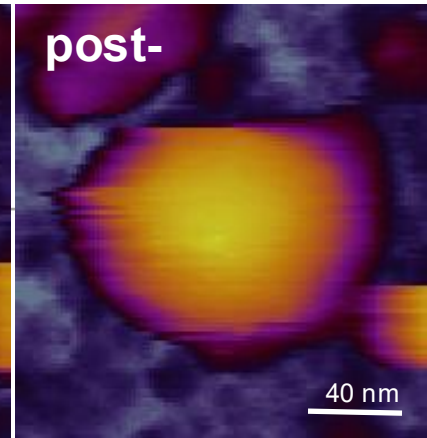
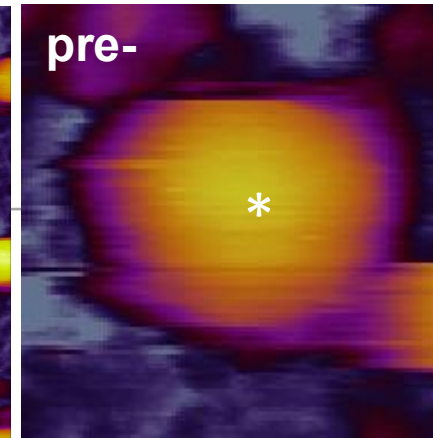
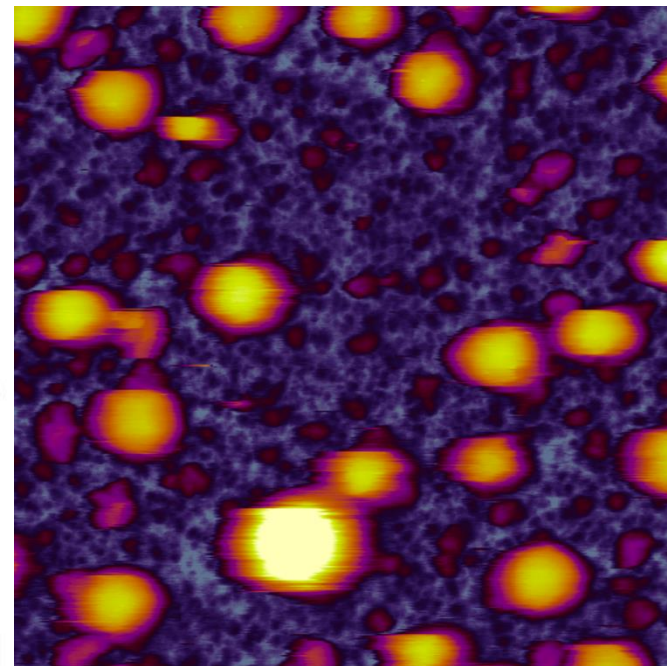
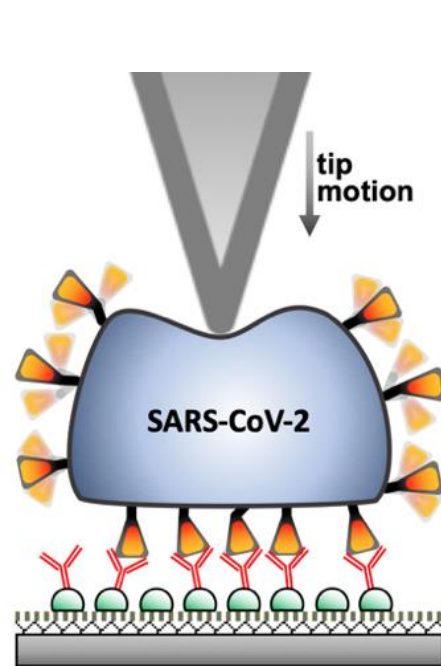
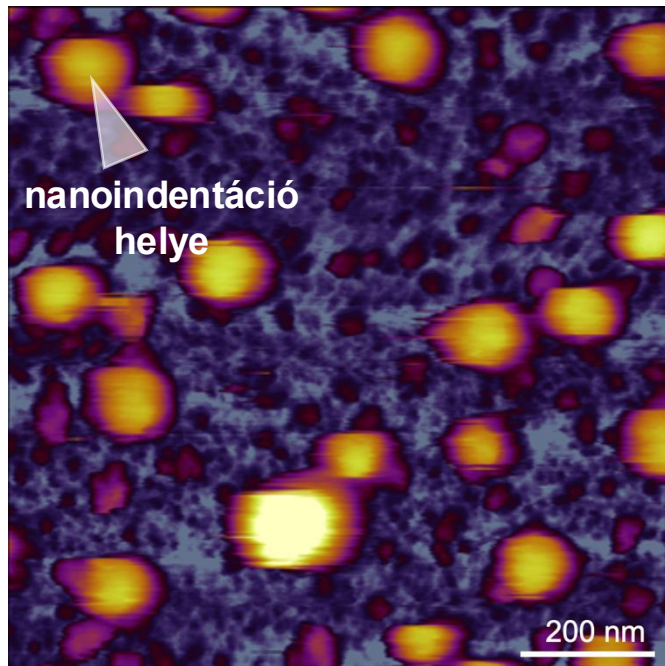


Vírus mechanika feltárható AFM nanoindentációval

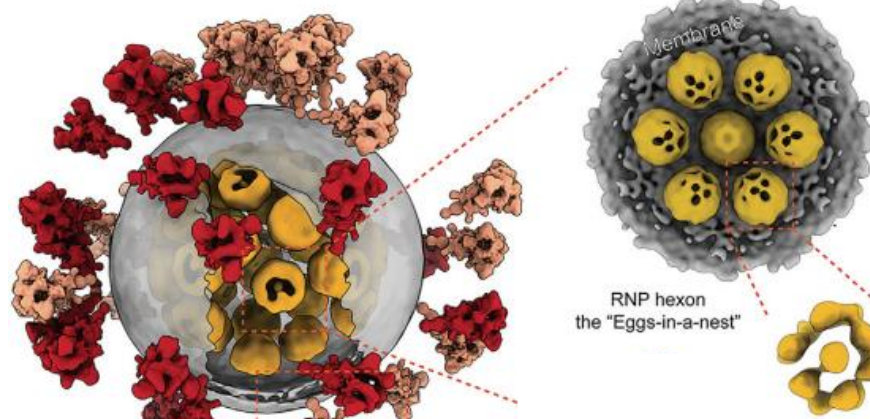
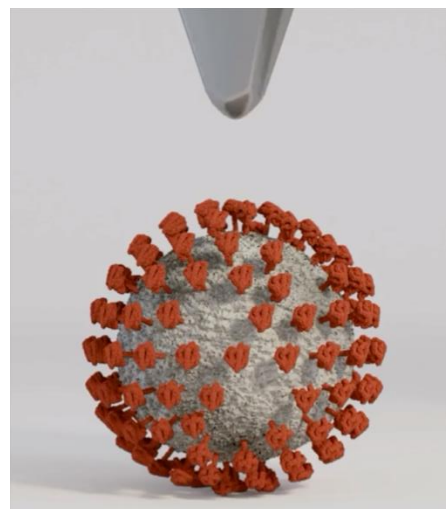


T7 bakteriofág nanoindentációs erőgörbéje

Koronavírus nanomechanika



Gumilabda-szerű viselkedés



Yao, et al. Cell, 2020

Az RNP fészekszerű elrendeződése a SARS-CoV-2 virionban ellenállhat a nanoindentációnak

OMHV



<https://feedback.semmelweis.hu/feedback/index.php?feedback-qr=VBXEA3OW5KXJ6KUD>