



Atomi, illetve molekuláris köölcsönhatások és alkalmazásaik

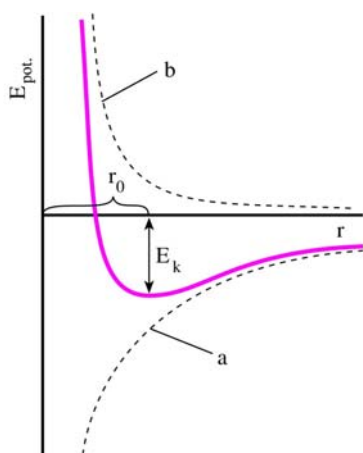
Bozó Tamás

2012. október 16.

Atomi kölcsönhatások

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

Többi elem: molekulákat alkot (pl. H₂, HCl, H₂O, ...)



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

A és B: kölcsönhatásokra jellemző

állandók

$n < m$

Kötéstípusok

Többféle osztályozási rendszer:

- Intra/intermolekuláris
- 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
- Erős kötés: $E_k > 1 \text{ eV}$
- $(1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 96 \text{ kJ/mol} \sim 100 \text{ kJ/mol})$

Apoláris (homoöpoláris)

(+) és (-) töltések súlypontja egybeesik
 „tisztá kovalens”
Pl.: H_2 , Cl_2 , O_2

Poláris (heteropoláris)

Töltések súlypontja eltolódik
 Elektromos dipólus
 Elektrosztatikus komponens is
Pl.: HCl , H_2O

$$p = Qd$$

p: dipólusmomentum
 Q: töltés értéke
 d: távolság a molekulában
 [D, debye]

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

hydrogen

alkali metals

alkali earth metals

transition metals

poor metals

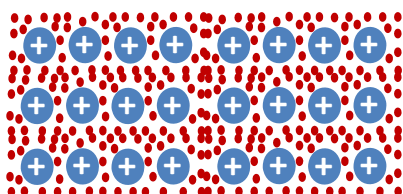
nonmetals

noble gases

rare earth metals

1 H																	He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
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	

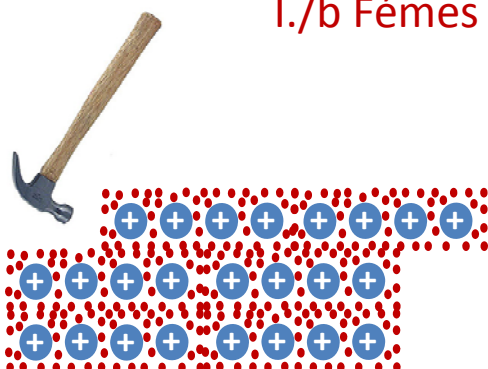
I./b Fémek kötése



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



I./b Fémes kötés



Fizikai tulajdonságok:

fémes szín
nyújthatóság, alakíthatóság
elektromos vezetés
hővezetés

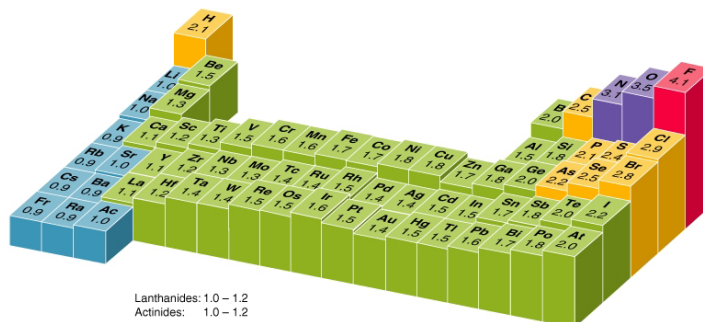
II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

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.

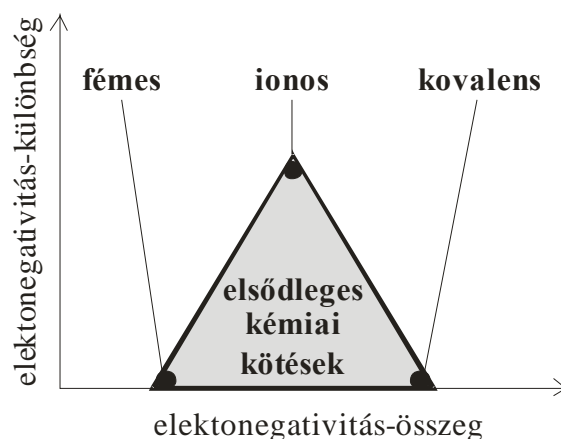
Egysége dimenzió nélküli (Pauling, és más skálák)



II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

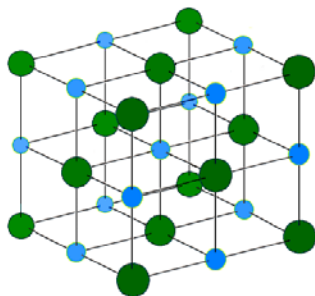
Elektronegativitás különbség:

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



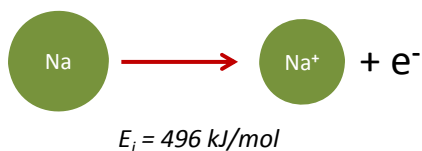
II./a Ionos kötés

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

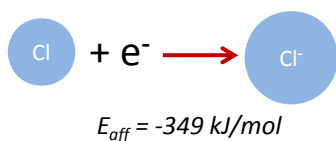


Ionrács: a pozitív és negatív ionok kristályos rendben helyezkednek el sztöchiometriai arányú halmazban.

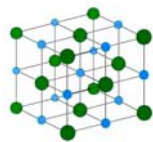
II./a Ionos kötés



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



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

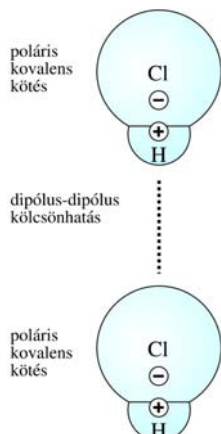


$E_{\text{rács}} = -788 \text{ kJ/mol}$

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

II./b Dipól-dipól kölcsönhatás

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



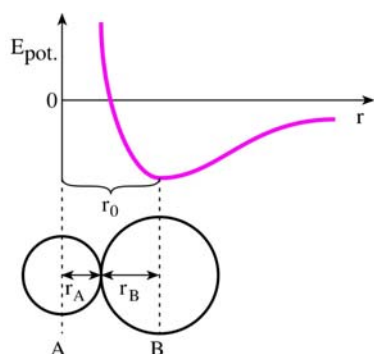
$E_{\text{vonzó}} = p E$

p : dipólusmomentum
 E : környező partnerek által keltett elektromos térerősség

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

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)

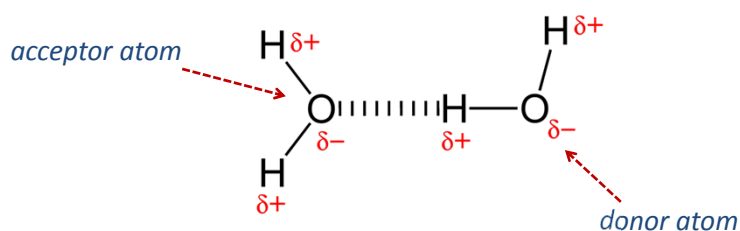


r_0 : kötéshossz

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

IV. Hidrogénkötés

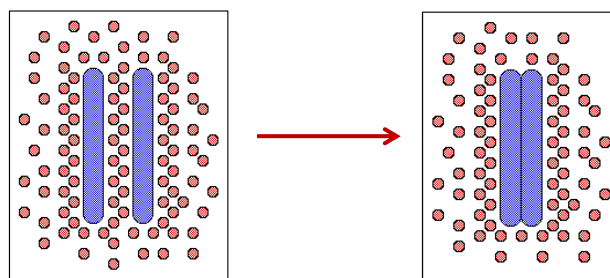
- Két nagy elektronegativitású atom között létrejövő H-híd
- Általában **F, N, O** atomok között
- Intermolekuláris kölcsönhatás
- Kötéstáv ált.: 0,23 – 0,35 nm
- A kötés térben irányított
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Közepes erősségű kölcsönhatás ($E_k \sim 0,2$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

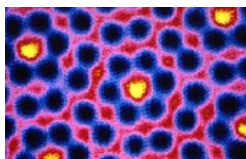
Egy felületet tapogatunk le pontról-pontra, akár atomról-atomra.

Nem diffrakció-limitált módszerek

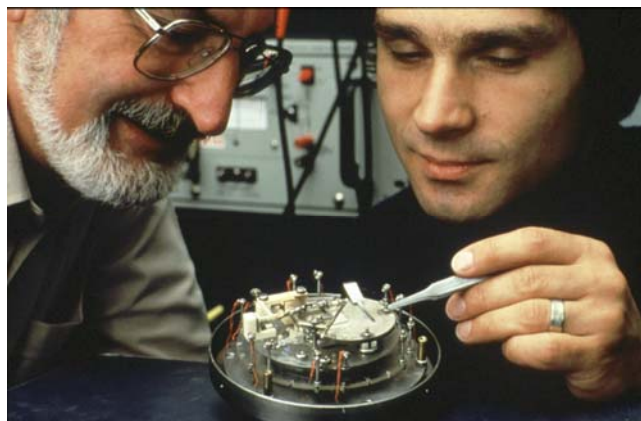
Néhány pm-es pásztázási pontosság

Scanning Tunneling Microscope (STM) 1981

Pásztázó alagút-mikroszkóp

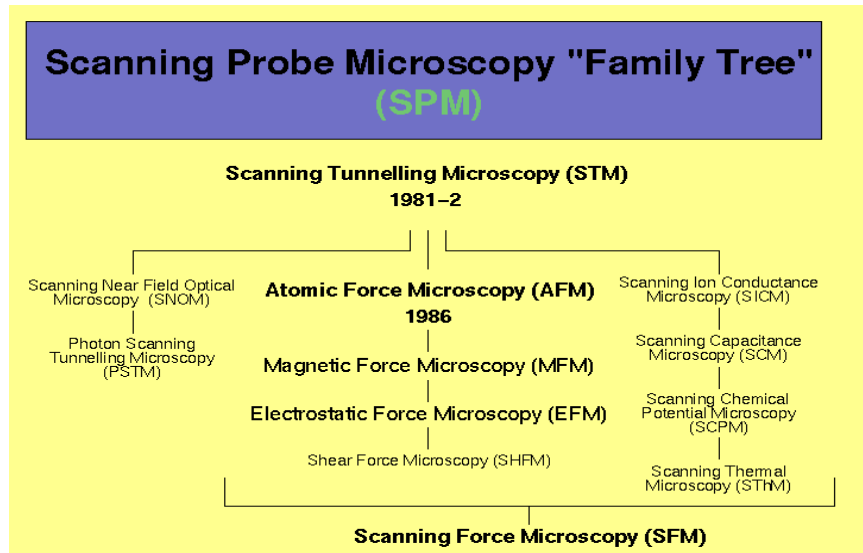


Atomok egy
szilíciumlapkán



Heinrich ROHRER és Gerd BINNING
Nobel díj: 1986

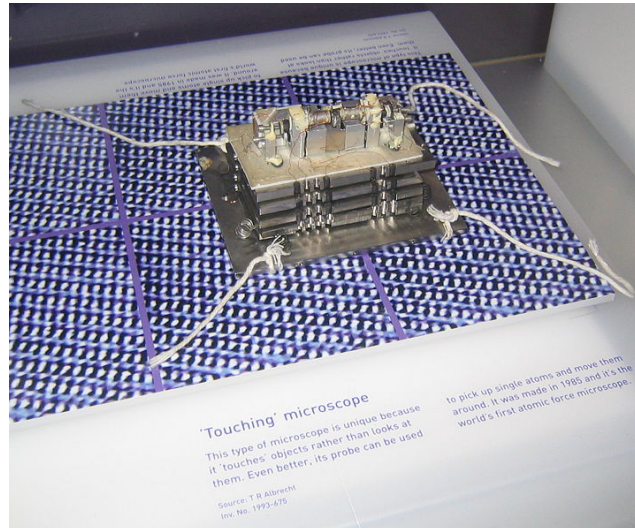
Az SPM családfája



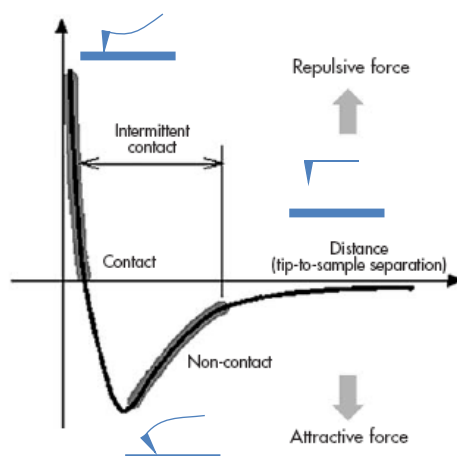
Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

- 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



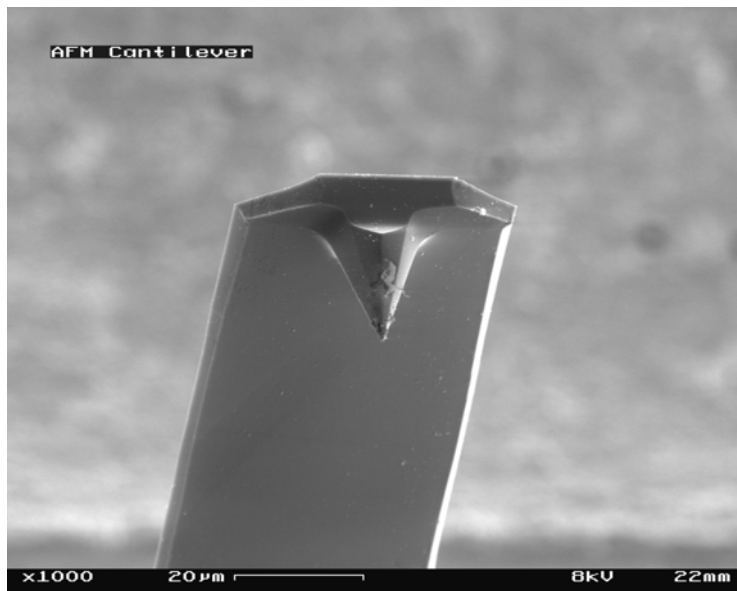
Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



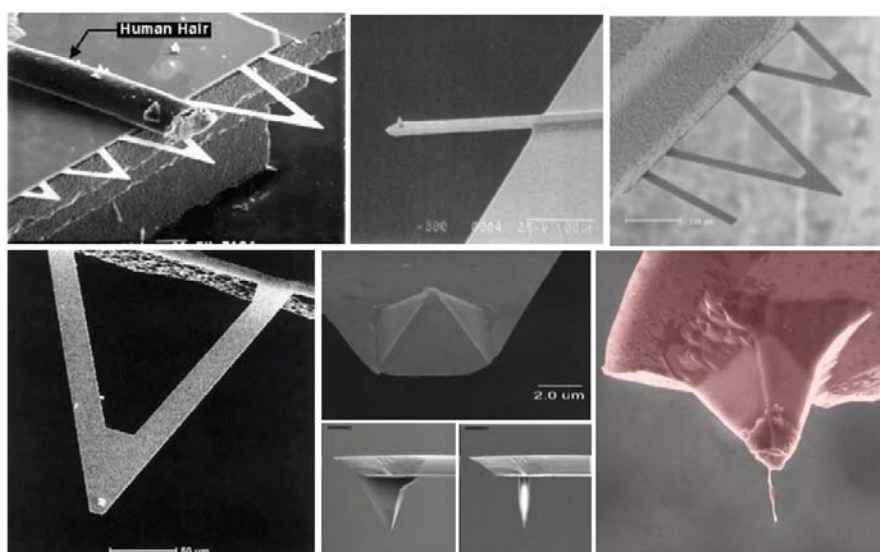
Atomi kölcsönhatások a tűhegy és a minta között:

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

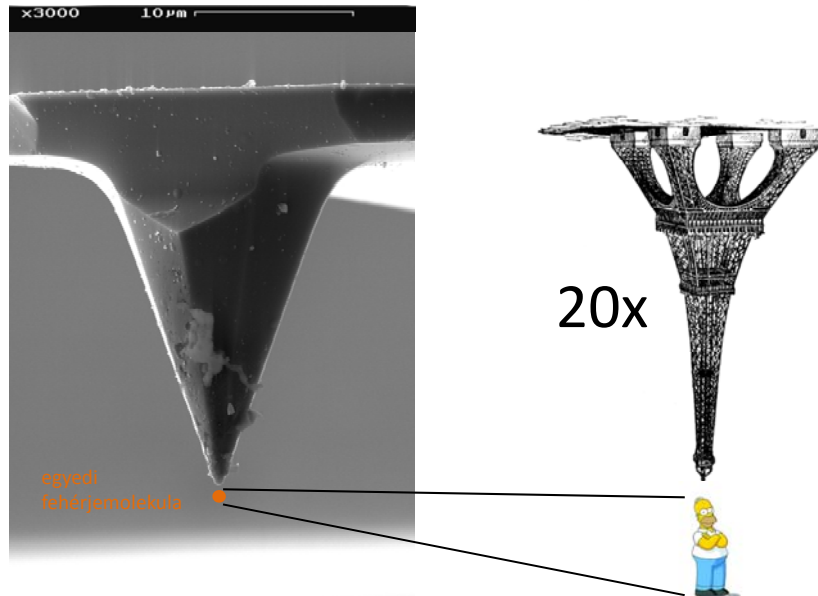
Atomic Force Microscopy (AFM),
Atomi erő mikroszkópia



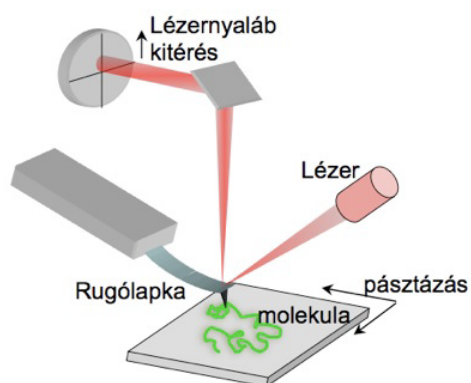
Atomic Force Microscopy (AFM),
Atomi erő mikroszkópia



Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



Pásztázás technikai alapja:

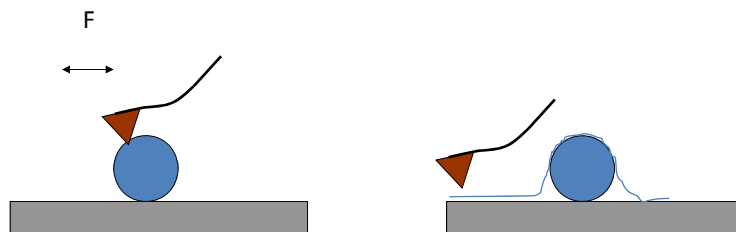
Piezoelektromos effektus:
Bizonyos anyagokban (pl. kvartz)
deformáció hatására feszültség lép
fel.

Inverz piezoelektromos hatás:
Feszültség hatására deformáció
jelentkezik ($\sim 1\text{nm/Volt}$)

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

Oszcilláló mód: (Tapping mode, Non-contact mode)

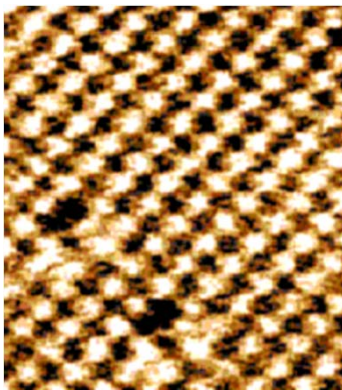
- A tűt a rezonanciafrekvenciájához közeli frekvencián rezegtetjük.
- A felszínnel való kölcsönhatás miatt a rezgés amplitúdója megváltozhat.
- Az amplitúdót a tű és a felszín távolságának szabályozásával tartjuk állandó értéken.
- Pontról pontra regisztráljuk az ehhez szükséges Z irányú elmozdulást.
- Előnye: elvileg kiküszöbölt laterális erő kifejtés, érzékeny minták vizsgálatára is alkalmas.



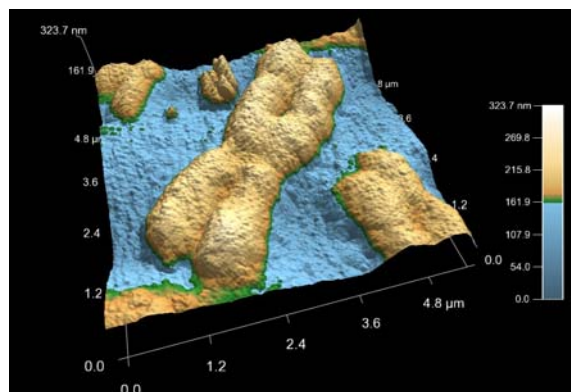
Atomic Force Microscopy (AFM),
Atomi erő mikroszkópia

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

Atomic Force Microscopy (AFM),
Atomi erő mikroszkópia

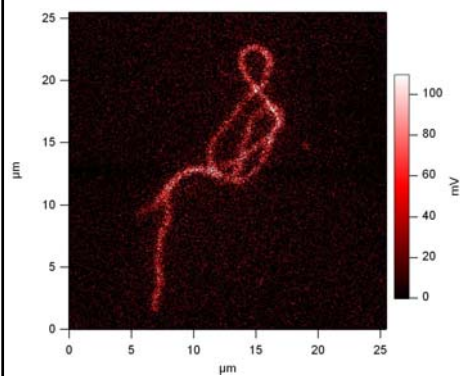


NaCl kristály AFM képe

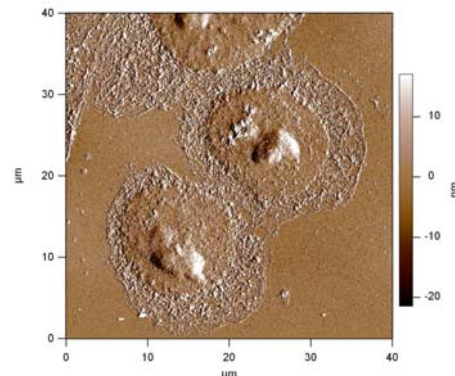


Humán metafázisos kromoszóma AFM képe

Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



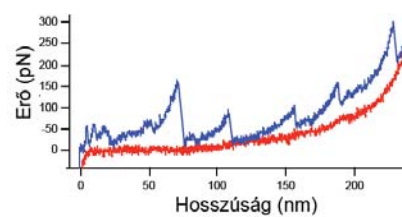
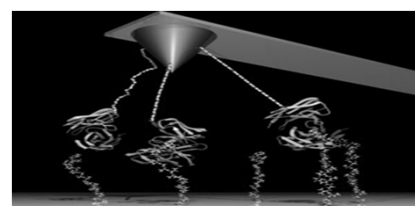
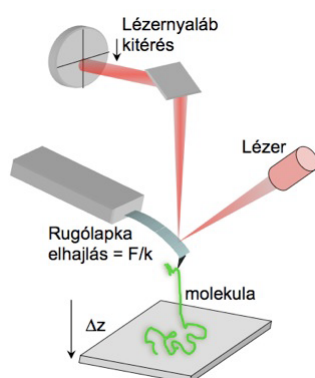
Egyedi aktinpolimer AFM képe



HeLa sejtek AFM képe

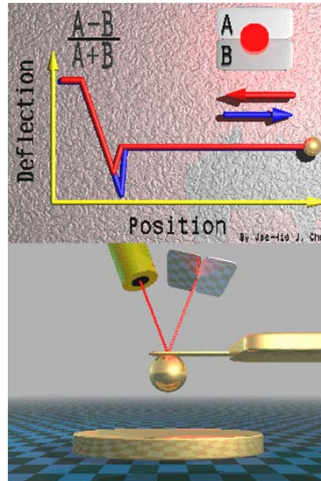
Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

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!

