



# Atomi, illetve molekuláris kölcsönhatások és alkalmazásai

Példaként: atomi erő mikroszkópia



**Bozó Tamás**  
Nanobiotechnológia és Molekuláris Biofizika Munkacsoport  
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet  
bozo.tamas@med.semmelweis-univ.hu

2016 október 11.

## Áttekintés

**Témakörök:**

- alapvető kölcsönhatások
- atomi és molekuláris kölcsönhatások
- pásztázó próbamikroszkópiák
- atomi erő mikroszkópia
  - kontakt mód
  - oszcilláló mód
  - erőspektroszkópia

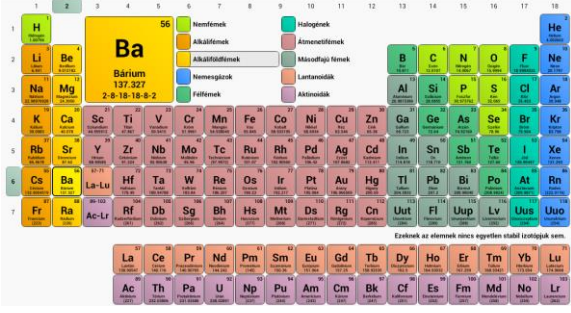
**Várható kollokviumi tétel:**

Hogyan értelmezhető az atomok közötti kölcsönhatások, kötéstípusok?

**Tankönyvi részek:** I/2, VIII/4.2.1., X/2

**Kapcsolódó gyakorlat:** Rezonancia

## Atomi kölcsönhatások



Ezenek az elemek nincs egyetlen stabil izotópja sem.

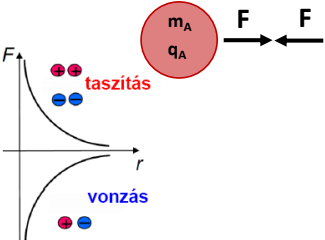
## Alapvető kölcsönhatások a fizikában

Kölcsönhatás	Mire hat?	Hatótávolság	Relatív erősség
Gravitáció	minden részecske	végtelen ( $\sim 1/r^2$ )	$10^{-40}$
Elektromágneses	töltött részecskék	végtelen ( $\sim 1/r^2$ )	$10^{-2}$
Erős nukleáris	nukleonok	$10^{-15}$ m	1
Gyenge nukleáris	minden részecske	$10^{-18}$ m	$10^{-13}$

### Coulomb kölcsönhatás

$$F_C = k \cdot \frac{q_A \cdot q_B}{r^2}$$

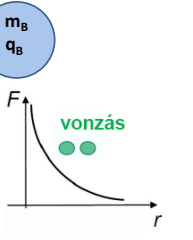
$(k = 9 \cdot 10^9 \frac{Nm^2}{C^2})$



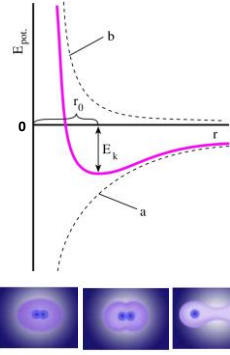
### Gravitáció

$$F_g = \gamma \cdot \frac{m_A \cdot m_B}{r^2}$$

$(\gamma = 6,67 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{kg \cdot s^2})$



## Atomi kölcsönhatások általános leírása



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

A és B: kölcsönhatásokra jell. állandók  
 $n < m$   
 $r$ : atomok távolsága  
 $r_0$ : kötéstávolság  
 $E_k$ : kötési energia



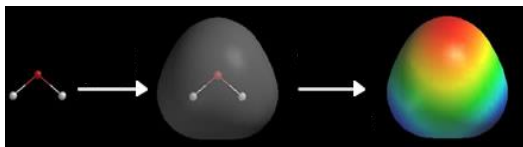
## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

### Elektronegativitás fogalma

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

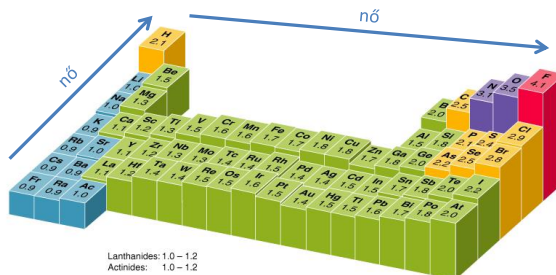
Egysége önkényes (Pauling, Mulliken, Sanderson és más skálák)

$$EN \approx |E_{\text{ionizációs}}| + |E_{\text{elektronaffinitás}}|$$



## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

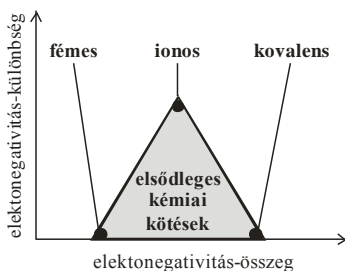
Elektronegativitás L. Pauling szerint (relatív egységekben)



## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

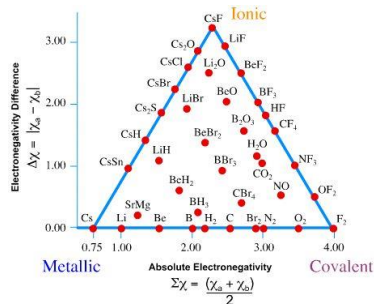
### Elektronegativitás különbség:

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



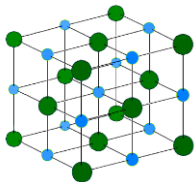
## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

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



### II./a Ionos kötés

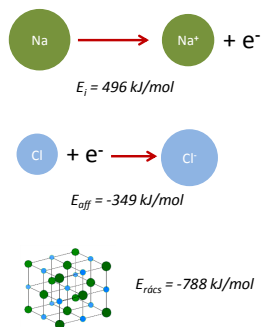
- (+) és (-) ponttöltések között Coulomb erők
- Heteropoláris kötések „határesetek”
- Nagy EN különbségű atomok között (pl.  $\text{NaCl}$ ,  $\Delta EN = 3,0 - 0,9 = 2,1$ )
- Általában sokatomos kristályok, de értelmezhető két atomra is
- Hosszú hatótávú kh., de ez a közegtől is függ (lsd. hidratáció)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



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

### II./a Ionos kötés

Példa:



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

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

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

## II./b Dipól-dipól kölcsönhatás

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

- A dipólusok közti vonzás és tasztítás:

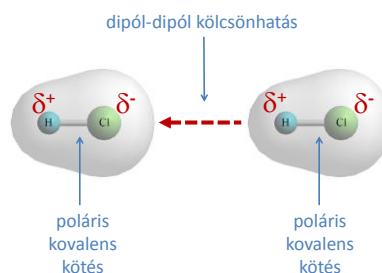
$$E_{\text{vonzó}} = p \cdot E$$

$p$ : dipólusmomentum  
 $E$ : környező partnerek által keltett elektromos télerősség

$E_{\text{tasztító}}$ : partnerek elektronfelhőjének tasztítása

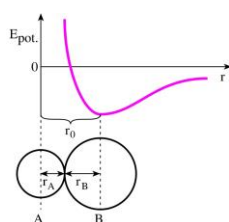
## II./b Dipól-dipól kölcsönhatás

Példa:



## III. Van der Waals-kölcsönhatások

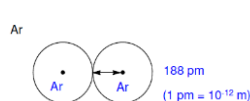
- Apoláris molekulákban/molekularészekben időlegesen kialakuló dipólus egy másik apoláris molekulában dipólust indukál
- Közöttük vonzó (diszperziós, vagy London-féle) erők lépnek fel
- Inter/intramolekuláris kölcsönhatás
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Gyenge kölcsönhatás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



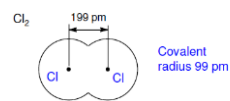
$r_0$ : kötéshossz

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

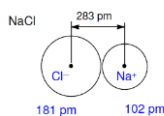
## Atomi méretek fogalma



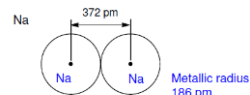
Van der Waals sugár



kovalens sugár



ionos sugár



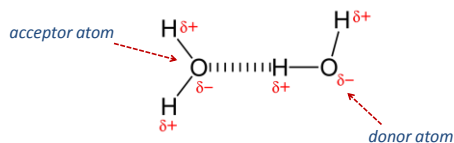
fém sugár

## 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 / intramolekuláris 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)

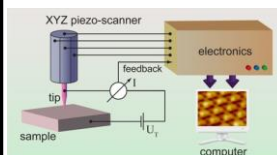


## V. Hidrofób kölcsönhatás



- 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. termodinamika 2. főtétele)
- Intra/intermolekuláris kölcsönhatás
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Gyenge kölcsönhatás

## Pásztázó próbamikroszkópiák (Scanning Probe Microscopy, SPM)

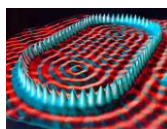


Változatos szerkezetvizsgáló eljárások, melyek egy vékony **szonda** és valamely **felület között** létrejövő atomi szintű **kölcsönhatások detektálásán** alapulnak.

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

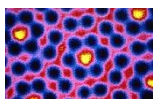
Nem diffrakció-limitált módszerek.

Akár pm-es pásztázási pontosság is elérhető.

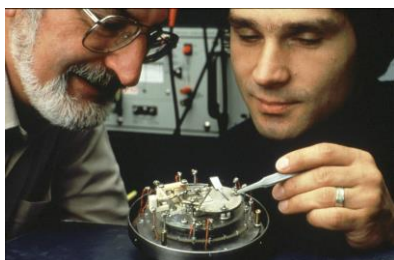
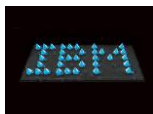


Vasatomok rézen, STM kép

## Scanning Tunneling Microscope (STM) 1981 Pásztázó alagút-mikroszkóp

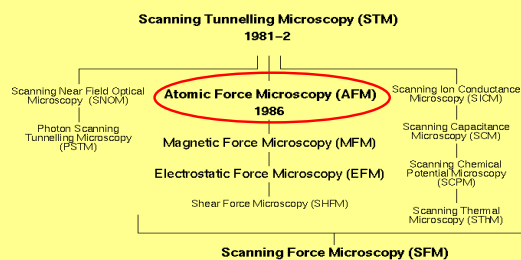


Atomok egy szilíciumlapkán

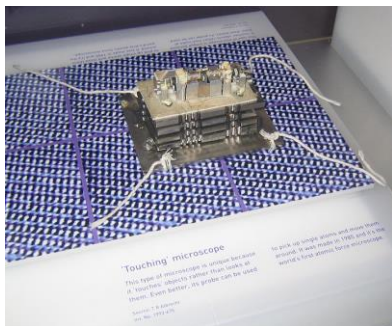


Heinrich ROHRER és Gerd BINNING  
Nobel díj: 1986

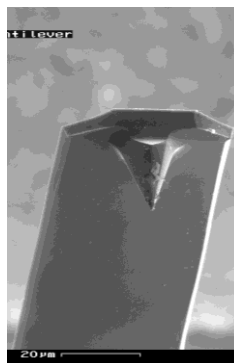
## Scanning Probe Microscopy "Family Tree" (SPM)



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



## A szonda: piciny tű



Egy kb. 100-500 μm hosszú laprugóhoz (vagy rugólapkához) kapcsolva.

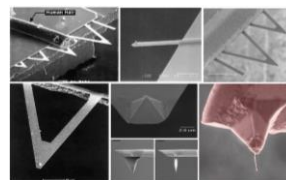
Anyaga: ált. szilícium-nitrid

Általában fémbevonat (Au, Cu, Ni...)

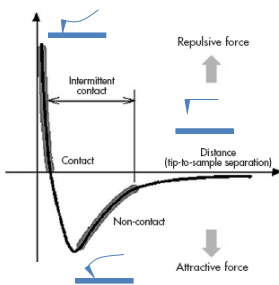
Tűhegy sugara: 0.1 nm – 100 μm

Rugóállandó:  $k$ -0.1-10 N/m

$f_0$ -50-500 kHz



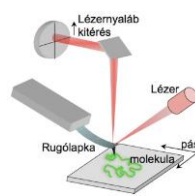
### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



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

- Vonzás és taszítás
- Eredőjük távolságfüggő
- Nagyobb távolságoknál: vonzás (van der Waals erők)
- Közel érve: Coulomb taszítás

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

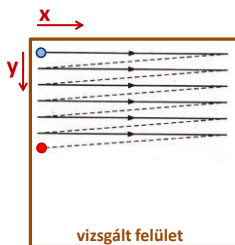


- A szonda egy rugalmas, mikroszkópikus méretű laprugóra szerkesztett parányi **tű**.
- A tűhegy atomjai és a minta felületének atomjai között taszító-vonzó **kölcsönhatások** a rugólapka elhajlását okozzák.
- X-Y irányban vonalanként **pásztázzuk** a felületet.
- Vertikális **felbontóképesség akár 10 pm**, a horizontális ennél rosszabb.

- **Levegőben és folyadékokban** (fiziológiai közeg) is működőképes
- Szinte mindenféle felületen alkalmazhatók.
- **nm- $\mu$ m** nagyságú objektumok szkennelhetők.
- **Natív minták vizsgálhatóak:** nem kíván fixálást, festést vagy jelölést.

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

#### Pásztázási mintázat:

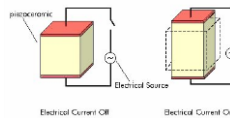


- **pásztázás kezdőpontja**
- **szonda aktuális pozíciója**

#### Pásztázás alapja:

**Inverz piezoelektromos hatás:** Bizonyos anyagokban (pl. kvarc kristály) feszültség hatására deformáció jelentkezik ( $\sim 1\text{nm}$  hosszváltozás/Volt).

A mintaasztal x-y irányba mozdítható hozzacsatolt feszültségvezérelt piezoelektromos kristályok segítségével.

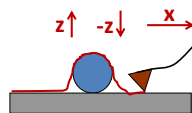


(Bővebben: Ultrahang ea., 2. félév)

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

#### Kontakt mód: (Contact mode)

- A tű folyamatosan kapcsolatban van a felszínnel, vonalról vonalra pásztázza azt.
- 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.

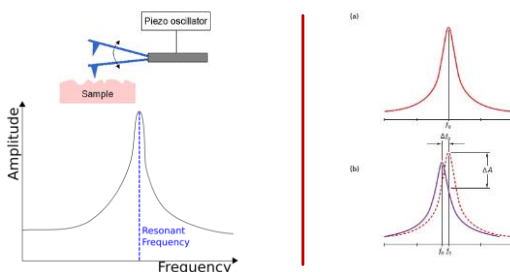


**Hátrány:** jelentős perturbáció lehet vertikális és horizontális irányban.

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

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

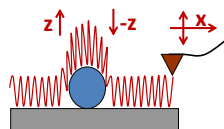
**Rezonancia:** kényszerrezgés,  $f \approx f_0$ , nagy amplitúdók



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

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

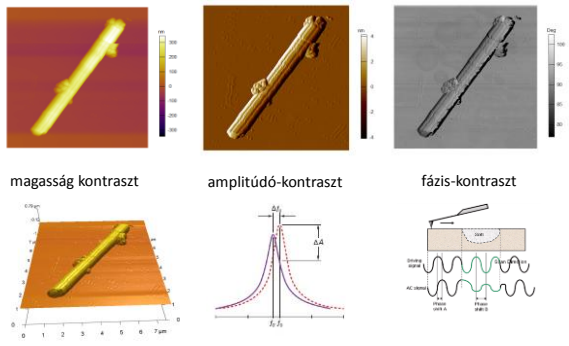
- A **tűt** a rezonanciafrekvenciájához közeli frekvencián **rezgetjük**.
- Vonalanként pásztázzuk a felszínt.
- A felszínnel való kölcsönhatás miatt **a rezgés amplitúdója megváltozhat**.
- Az **amplitúdót** a tű és a felszín távolságának szabályozásával **tartjuk állandó értéken**.
- Pontról pontra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



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



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

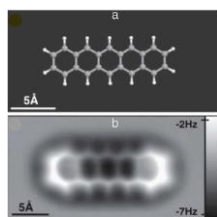


### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

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

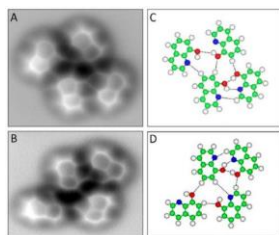
### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

Példák:



Pentacén molekula  
AFM képe

Nature Chemistry 3, 273–278 (2011)

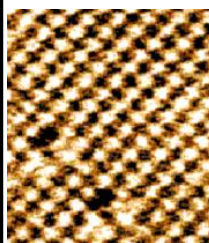


Hidrogénkötések 8-hidroxiquinolin  
molekulák között (AFM felvétel)

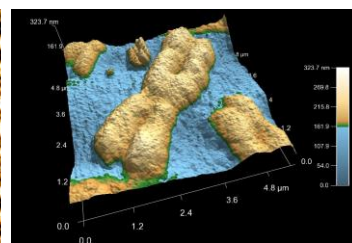
Science 26, 611–614 (2013)

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

Példák:



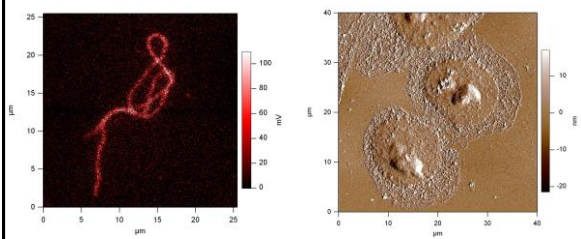
NaCl kristály AFM képe



Humán metafázisos kromoszóma AFM képe

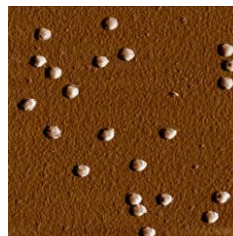
### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

Példák:

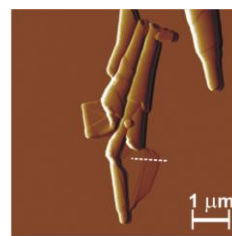


### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

Példák:



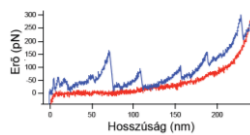
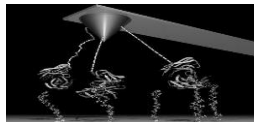
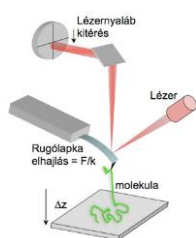
T7 bakteriofágok AFM képe



Többrétegű foszfolipid membrán tekercsek

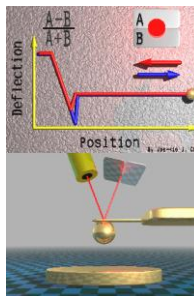
### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

**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:**



**Hook törvény:** A rugólapka elhajlása ( $\Delta x$ ) arányos az erővel ( $F$ ): (Rezonancia gyak.)

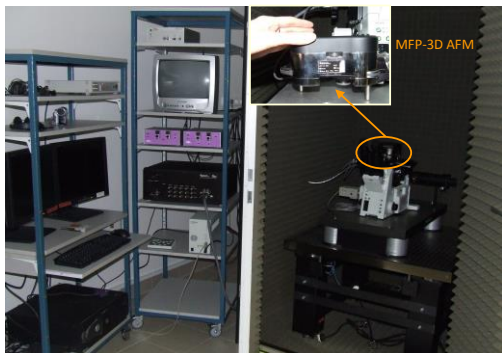
$$F = k \cdot \Delta x$$

$k$ : rugóállandó

Átszűrési, szakítási, domén-kitekeredési és más erők, viszkozus és elasztikus tulajdonságok mérhetőek így.

44

### Atomic Force Microscopy (AFM),



### Atomic Force Microscopy (AFM),



**Köszönöm a figyelmet!**

