



## Anyagszerkezet, anyaghullámok, atomi és molekuláris kölcsönhatások

Példaként: atomi erő mikroszkópia



Bozó Tamás

Nanobiotechnológia és Molekuláris Biofizika Munkacsoport  
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

2018 október 4.

1

## Áttekintés

### Témakörök:

- atomszerkezet
- atommodellek
- az elektron kettős természete, anyaghullámok
- szabad és kötött elektron terjedése
- kvantumszámok
- atomi és molekuláris kölcsönhatások
- atomi erő mikroszkópia

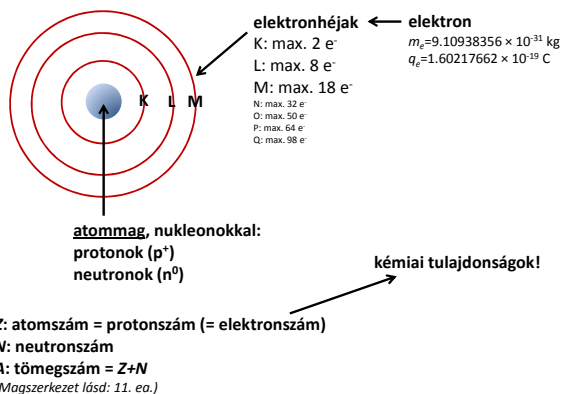
### Kollokviumi tételek:

6. A részecske-hullám kettősség bizonyítása az elektron esetében. Anyaghullámok szabad és kötött állapotban.
7. Atomi és molekuláris kölcsönhatások általános leírása.

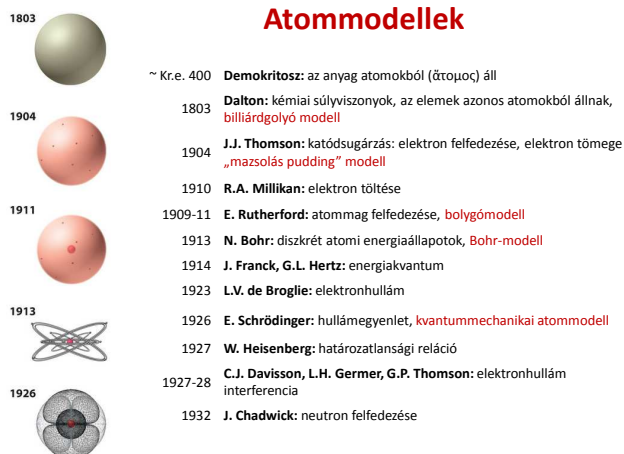
**Tankönyvi részek:** I/1.1-1.4, I/2, X/2

**Kapcsolódó gyakorlatok:** Fényemisszió, Fényabszorpció, Rezonancia

## Általános atomszerkezet, alapfogalmak



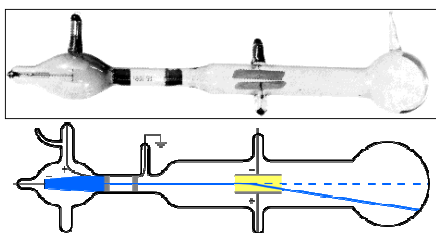
## Atommodellek



## Az elektron felfedezése (1897)



Joseph John Thomson  
1856-1940



Megfigyelések	Következtetések
A katódsugár elektromos térben a pozitív elektród felé hajlik, és mágneses térrel is eltéríthető.	A sugár negatívan töltött részecskékből („korpuskulumból”) áll.
Alacsony $m/q$ arány.	Ezek a részecskék vagy nagyon könnyűek vagy nagy a töltésük.
A $m/q$ arány független a katód (és a csőben lévő gáz) anyagától.	Ezek a részecskék valamennyi atom alapvető összetevői.

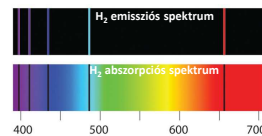
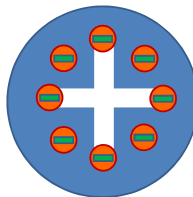
5

## Thomson mazsolás puding modellje (1904)



- Kis tömegű, negatív töltésű részecskék (elektronok)
- egyenletesen, középpont-szimmetrikusan oszlanak meg
- az atom tömegének nagy részét hordozó
- homogén sűrűségeloszlású,
- pozitív töltésű felhőben.
- Az elektronok úgy helyezkednek el, hogy minimális potenciális energiával rendelkezzenek.
- Ha kimozdítjuk őket egyensúlyi rendszerükből, rezegni kezdenek, az atom sugároz.

**Probléma:** nem ad magyarázatot az atomok vonalas színeképére.

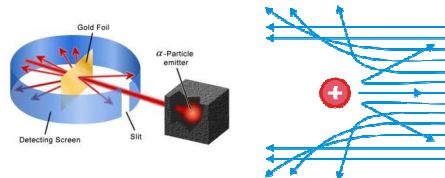


6

## Az atommag felfedezése (1909)



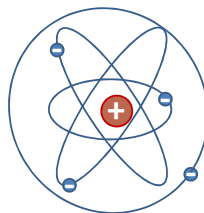
Ernest Rutherford  
1871-1937



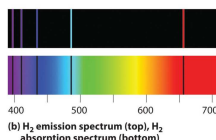
Megfigyelések	Következtetések
Az $\alpha$ részecskék 99.995%-a elhajlás nélkül, vagy enyhe elhajlással áthaladt a fólián.	Az atom sűrűségeloszlása nem egyenletes. A tömeg legnagyobb része egy kis térfogatrészbe tömörül.
Mindössze 0.005%-uk verődött vissza éles szögben.	Ez a térfogatrész az atom térfogatánál $10^5$ -szer kisebb, és pozitív töltést hordoz.

7

## Rutherford bolygó modellje



- Elektronok (könnyű, negatívan töltött részecskék) keringenek az atommag (nehéz, pozitív töltésű részecske) körül.
- Az elektronokat a Coulomb erő tartja körpályán.



### Hiányosságok:

- Nem stabil (gyorsulás  $\rightarrow$  sugárzás  $\rightarrow$  energiavesztés  $\rightarrow$  magba zuhanás)
- Nem magyarázta a  $H_2$  gáz vonalas spektrumát.

8

## Bohr hidrogénatomja, a „régí kvantumelmélet” (1913)



Niels Henrik David Bohr  
1885-1962

**I. Pályafeltétel:** az elektronok csak meghatározott pályákon keringhetnek ( $n=1, 2, 3, \dots$ ).

$$m_e \cdot v \cdot r = n \cdot \frac{h}{2\pi} = n \cdot \hbar$$

impulzusmomentum  
 $L [kg \cdot m^2 \cdot s^{-1}]$

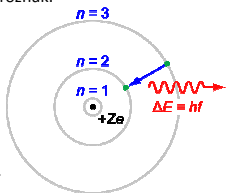
Ezek a pályákon tartózkodva energiájuk meghatározott és állandó ( $E_1, E_2, E_3, \dots$ ), nem sugároznak.

### II. Frekvenciafeltétel:

$$\Delta E = E_m - E_i = h \cdot f$$

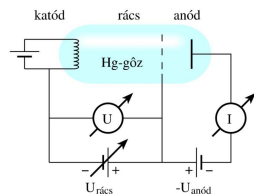
$$f = \frac{\Delta E}{h}$$

**Sugárzás (emisszió):** alacsonyabb pályára lépéskor.  
**Abszorpció:** magasabb pályára kerüléshez vezet.

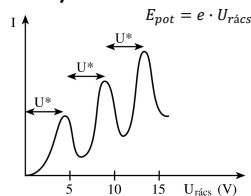


9

## A Franck-Hertz kísérlet: az energiakvantum bizonyítéka (1914)



### Eredmény:



James Franck  
1882-1964



Gustav Ludwig Hertz  
1887-1975

### Következtetés:

Az atom energiája nem változhat folytonosan, hanem meghatározott értékeket (quantumokat) vehet fel.

10

## Az elektron hullámtermészete (1923)

**Einstein:**  
tömeg-energia  
equivalencia  
 $E = mc^2$

**Planck:**  
sugárzási  
törvény  
 $E = h \cdot f$

**Maxwell:**  
fény terjedési  
sebessége  
 $c = \lambda \cdot f$

**Ha a fény részecske, akkor az elektron lehet hullám?**



Louis Victor de Broglie  
1892-1978

$$m \cdot c^2 = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

$$p = m \cdot v$$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{h}{p}$$

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

**Részecske-hullám dualitás:** Az elektron egyszerre tekinthető szubatomi részecskének és hullámjelenségnek. Ez általánosítható minden részecskére (anyaghullámok).

11

## Az elektronhullám hullámhossza

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

$$p = m_e \cdot v$$

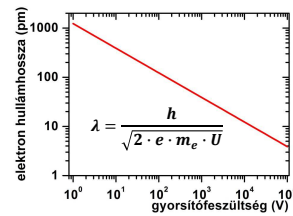
$$\lambda = \frac{h}{m_e \cdot v}$$

$$E_{pot} = e \cdot U$$

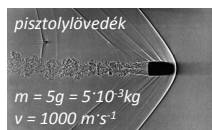
$$E_{kin} = \frac{1}{2} \cdot m_e \cdot v^2$$

$$E_{kin} = E_{pot}$$

$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot e \cdot U}{m_e}}$$



**Miért nem érzékeljük a makroszkopikus testek hullámtulajdonságait?**



$m = 5g = 5 \cdot 10^{-3} kg$   
 $v = 1000 m \cdot s^{-1}$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} m^2 \cdot kg \cdot s^{-1}}{5 \cdot 10^{-3} kg \cdot 1000 m \cdot s^{-1}} = 1,325 \cdot 10^{-34} m$$

## Interferencia kísérletek (1927-28)

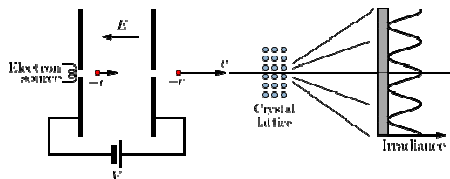


J. Davisson and L.H. Germer

- A hullámtermészet kísérletes bizonyítékai.
- Davisson, Germer és Thomson elektronnyalábbal váltott ki diffrakciót vékony fémfóliákon, kristályokon.
- Interferenciamentázat jelent meg, ami a hullámtermészet egyértelmű bizonyítéka.
- Más anyagi részecskékkal (protonok, neutronok, atomok is sikerült interferenciát kelteni. Ez az anyag hullámtermészetét bizonyítja.



G. P. Thomson



13

## Az elektron hullámtermészete



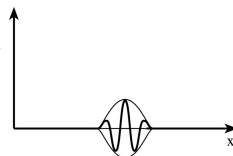
Erwin Schrödinger  
1887-1961

### Az elektronhullám terjedési törvénye (1926):

A hullámfüggvény (állapotfüggvény)  $\Psi(x,t)$  az elektronhullám „amplitúdóját” a hely ( $x$ ) és az idő ( $t$ ) függvényeként adja meg.

Az elektront mint kiterjedt, folytonos töltésfelhőt írja le, aminek a tér minden pontjában  $\Psi^2$ -tel arányos töltéssűrűsége van.

$\Psi(x,t)$



„hullámcsoport”



hely (kiterjedés): ahol  $\Psi(x,t) \neq 0$   
impulzus ( $p$ ): a fv. alakja adja meg

14

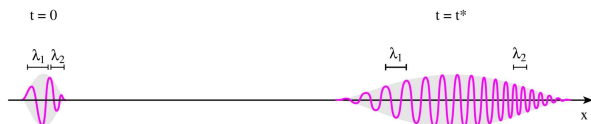
## Szabad elektron terjedése

$\Psi(x,t) \neq 0$  több pontra is teljesül  $\rightarrow$  a hely nem határozható meg egyetlen számmal.

$\Psi(x,t)$ : nem periodikus függvény  $\rightarrow$  nincs egyértelmű hullámhossza  $\rightarrow$  A kb. legnagyobb ( $\lambda_1$ ), ill. legkisebb ( $\lambda_2$ ) értékek között bármilyen  $\lambda$ -val jellemezhető.

$$\text{Mivel } p = \frac{h}{\lambda}, \quad v = \frac{p}{m_e} \quad \text{és} \quad s = v \cdot t$$

Sem az impulzus, sem a sebesség, sem az elmozdulás nem határozható meg egyetlen számértékkel  $\rightarrow$   $s_1$  és  $s_2$  között bármilyen értékkel jellemezhető  $\rightarrow \Psi(x,t)$  szétterül a terjedés közben. Új hullámhegyek és -völgyek jelennek meg.



## Heisenberg-féle határozatlansági reláció (1927):

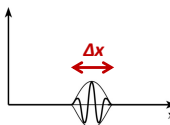


Werner Karl Heisenberg  
1901-1976

Az állapotfüggvény  $\Psi(x,t)$  önmagában teljesen határozott, egyértelmű függvény.

A hordozott információ egy része (pl. hely, impulzus) azonban határozatlan.

$\Psi(x,t)$



$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h$$

$\Delta x$ : hely határozatlanság  
 $\Delta p$ : impulzus határozatlanság  
 $h$ : Planck' állandó

**Konklúzió:** Minél pontosabban meghatározott az elektron helye, annál kevésbé meghatározott az impulzusa (és sebessége), és fordítva.

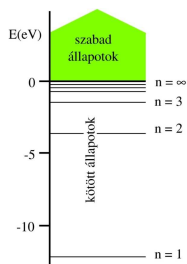
Általános elv: a részecskéket jellemző más komplementer változókra is érvényes. Pl.:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

16

## Mi a helyzet a kötött állapotú elektronokkal?

- Atommag elektromos erőtere hat rájuk.
- Az állapotfüggvényt saját irányába tereli (torzítja).
- Az elektronok impulzusa határozatlan  $\rightarrow$  a szétterülés érvényben marad.
- Nincs elég energiájuk az atom elhagyására  $\rightarrow$  kötött állapot.



### Következmény:

- Dinamikus egyensúly (magvonzás és szétterülés között).
- Szimmetrikus alak (állóhullámszerű)
- Stacionárius függvény  $\rightarrow \Psi(x)$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h$$

Mivel  $\Delta t$  teljesen határozatlan  $\rightarrow E$  teljesen határozott  $\rightarrow$  **diszkrét energiaszintek.**

17

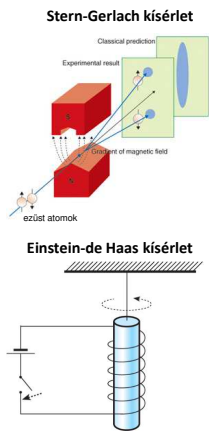
## Hogyan jellemezhetjük az atomi elektronállapotokat?

kvantumszám	lehetséges értékei	Mit jellemez?	Mit ad meg?
fő	$n=1,2,3...7$	elektronhéj	energiaszint
mellék	$l=0,1,2,...(n-1)$ or: s, p, d, f	alhéj	(pálya-) impulzusmomentum (perdület) nagysága
mágneses	$m_l=-l,...,0,...,+l$	orbitál (elektronpálya) az alhéjon	(pálya-) impulzusmomentum (perdület) iránya
spin	$m_s=\pm 1/2$	elektron saját perdületét (spinjét)	spin iránya (nagysága konstans)

**Elektronpálya (orbitál):**  $n, l, m_l$  kvantumszámokkal jellemezhető állapot. Rajta max. 2 db, ellentétes spinű elektron tartózkodhat.

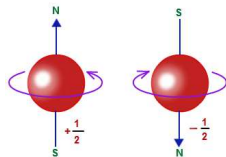
18

## Az elektron saját impulzusmomentuma (spin)



### Következtetések:

- Az elektronnak van saját mágneses momentuma.
- Irányítottága kétféle lehet.
- Az elektronnak saját impulzusmomentuma van (mivel a mágneses momentum mindig impulzusmomentummal jár együtt).

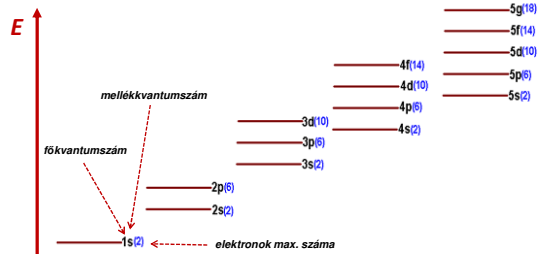


Spinkvantumszám:  $m_s$  vagy  $s = \pm 1/2$

## Hogyan foglalják el az elektronok a kvantumállapotokat?

**Pauli elv:** Egy atomban belül nem lehet két olyan elektron, amelynek mind a 4 kvantumszáma megegyezik.

### Energiaminimum elve

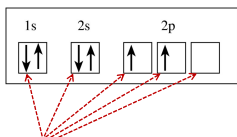


**Hund szabály:** Adott elektronkonfigurációra a legalacsonyabb energiájú állapot a legnagyobb eredő spinértéknél van.

## Hogyan foglalják el az elektronok a kvantumállapotokat?

**Konfiguráció:** Megadjuk a (teljesen vagy részlegesen) betöltött alhéjakat és az ekvivalens (azonos alhéjhoz tartozó) elektronok számát.

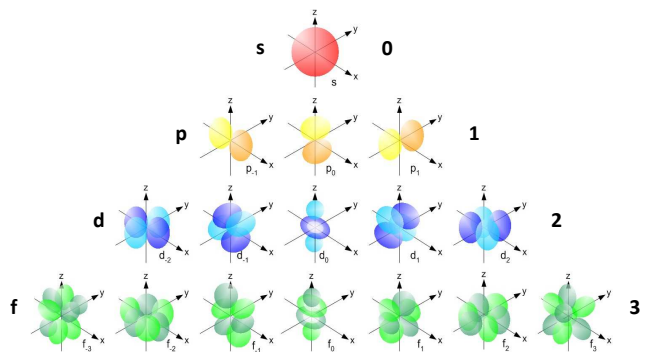
**Egy példa:** Szénatom,  $Z=6$ , konfigurációja:  $1s^2 2s^2 2p^2$



**Elektronpályák (orbitál):**  $n, l, m_l$  kvantumszámokkal jellemezhető állapot. Rajta max. 2 db, ellentétes spinű elektron tartózkodhat.

21

## Elektronpályák (orbitálok) szemléltetése



22

## Atomi kölcsönhatások

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H 1.00794	2 He 4.00260																
3 Li 6.941	4 Be 9.01218	5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.0064	8 O 15.9994	9 F 18.9984	10 Ne 20.1798										
11 Na 22.98977	12 Mg 24.3047	13 Al 26.98154	14 Si 28.0855	15 P 30.97376	16 S 32.06	17 Cl 35.453	18 Ar 39.9624										
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.9559	22 Ti 47.88	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.9380	26 Fe 55.845	27 Co 58.9332	28 Ni 58.6934	29 Cu 63.546	30 Zn 65.38	31 Ga 69.723	32 Ge 72.63	33 As 74.9216	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.9058	40 Zr 91.224	41 Nb 92.90638	42 Mo 95.94	43 Tc 98.9062	44 Ru 101.07	45 Rh 102.9055	46 Pd 106.9056	47 Ag 107.8682	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.757	52 Te 127.6	53 I 126.905	54 Xe 131.29
55 Cs 132.90545	56 Ba 137.327	57 La 138.90547	58 Ce 140.12	59 Pr 140.90765	60 Nd 144.242	61 Pm 144.9127	62 Sm 150.36	63 Eu 151.964	64 Gd 157.254	65 Tb 158.92532	66 Dy 162.5001	67 Ho 164.93032	68 Er 167.259	69 Tm 168.93032	70 Yb 173.05468	71 Lu 174.967	72 Hf 178.49
73 Ta 180.94788	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.222	78 Pt 195.084	79 Au 196.96657	80 Hg 200.59	81 Tl 204.3833	82 Pb 207.2	83 Bi 208.9804	84 Po 209	85 At 210	86 Rn 222	87 Fr 223	88 Ra 226	89 Ac 227	90 Th 232.0377
91 Pa 231.03688	92 U 238.02891	93 Np 237.04817	94 Pu 244.0642	95 Am 243.06138	96 Cm 247.07035	97 Bk 247.07035	98 Cf 251.0834	99 Es 252.0834	100 Fm 257.1035	101 Md 258.1035	102 No 259.1035	103 Lr 262.1035	104 Rf 261.1035	105 Db 262.1035	106 Sg 266.1035	107 Bh 264.1035	108 Hs 277.1035
109 Mt 268.1035	110 Ds 271.1035	111 Rg 272.1035	112 Cn 285.1035	113 Nh 286.1035	114 Fl 289.1035	115 Uup 289.1035	116 Lv 293.1035	117 Uus 293.1035	118 Uuo 293.1035	119 Ts 294.1035	120 Og 294.1035	121 Lr 262.1035	122 Hf 261.1035	123 Ta 262.1035	124 W 266.1035	125 Re 264.1035	126 Os 277.1035

23

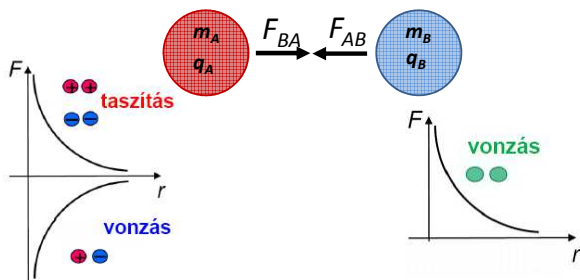
## Alapvető kölcsönhatások a fizikában

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

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

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

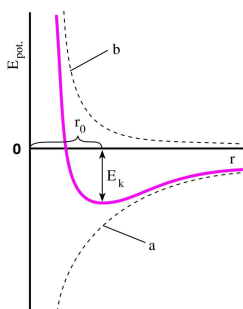


### Gravitáció

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

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

### Atomi kölcsönhatások általános leírása



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

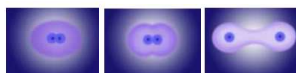
A és B: kölcsönhatásokra jellemző állandók

$n < m$

$r$ : atomok távolsága

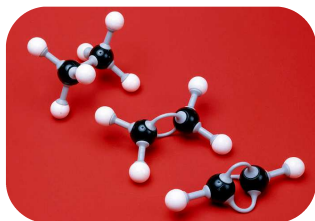
$r_0$ : kötéstávolság

$E_k$ : kötési energia



### I. Kovalens kötés

- Atomokat közös elektronpályák tartják össze
- Vegyértékelektronok szerepe
- Elektrosztatikus komponens is jelen lehet
- Erős kötés:  $E_k > 1 \text{ eV}$   
( $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 96 \text{ kJ/mol} \sim 100 \text{ kJ/mol}$ )

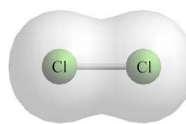


	szén-szén kötéshossz	kötési energia
$H_3C-CH_3$ etán	154 pm	-331 KJ·mol <sup>-1</sup>
$H_2C=CH_2$ etén (etilén)	139,9 pm	-590 KJ·mol <sup>-1</sup>
$HC\equiv CH$ etin (acetilén)	120,3 pm	-812 KJ·mol <sup>-1</sup>

### I. Kovalens kötés

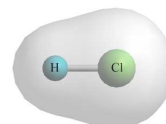
#### Apoláris (homeopoláris)

(+) 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.:  $HCl$ ,  $HF$ ,  $H_2O$

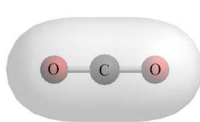
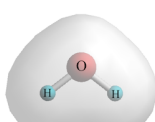
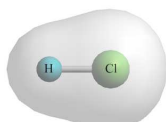


### I. Kovalens kötés

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

$$p = q \cdot d$$

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



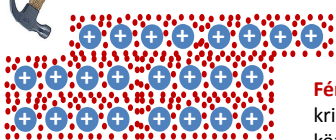
### I./b Fémes kötés

- 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	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H	He																
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne										
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar										
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Unq	Unp	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns	Uns
56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103				
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				



## I./b Fémes kötés



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

### Fizikai tulajdonságok:

fémes szín  
nyújthatóság, alakíthatóság  
elektromos vezetés  
hővezetés



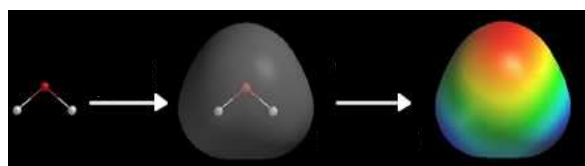
## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

### Elektronegativitás fogalma

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

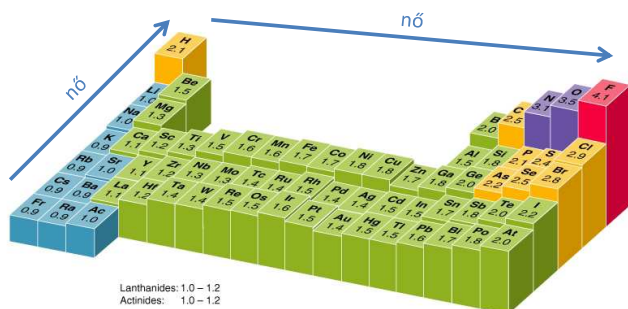
Egysége önkényes (Pauling, Mulliken, Sanderson és más skálák)

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



## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

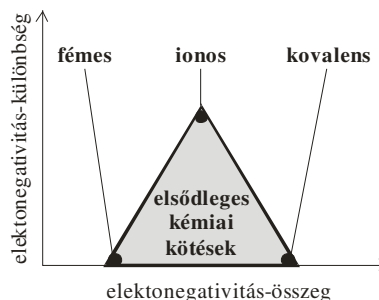
Elektronegativitás L. Pauling szerint (relatív egységekben)



## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

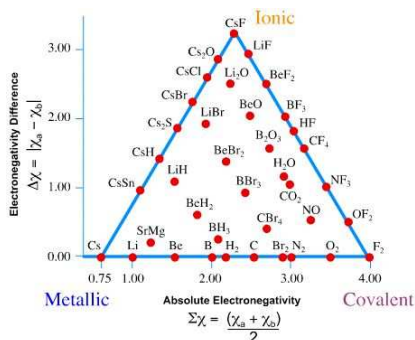
### Elektronegativitás különbség:

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



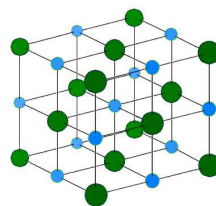
## II. Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

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



## II./a Ionos kötés

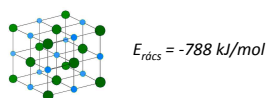
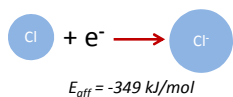
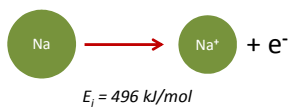
- (+) és (-) ponttöltések között Coulomb erők
- Heteropoláris kötések „határesetek”
- Nagy EN különbségű atomok között (pl.  $\text{NaCl}$ ,  $\Delta EN = 3,0 - 0,9 = 2,1$ )
- Általában sokatomos kristályok, de értelmezhető két atomra is
- Hosszú hatótávú kh., de ez a közegtől is függ (Isd. hidratáció)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



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



Példa:



## II./a Ionos kötés

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

**Elektronaffinitás:** anionok képződése (elektronfelvétel) során történő energiafelszabadulás. (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 töltéseloszlás
- Intra/intermolekuláris kölcsönhatás
- Gyenge kölcsönhatás ( $E_k = 0,003\text{-}0,02 \text{ eV}$ )
- A dipólusok közti vonzás és taszítás:

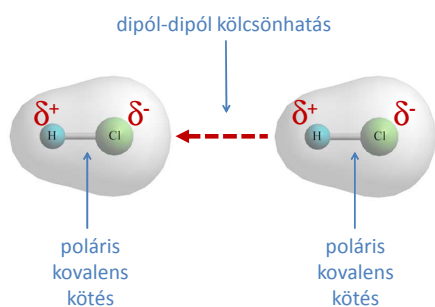
$$E_{\text{vonzó}} = p E$$

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

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

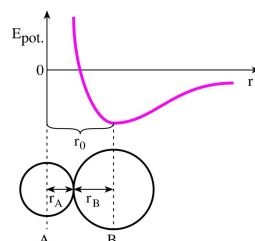
## II./b Dipól-dipól kölcsönhatás

Példa:



## III. Van der Waals-kölcsönhatások

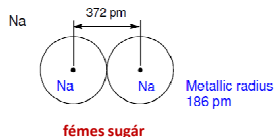
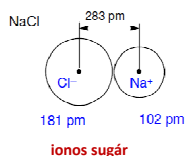
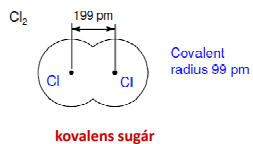
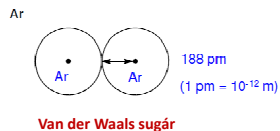
- Apoláris molekulákban/molekularészekben időlegesen kialakuló dipólus egy másik apoláris molekulában dipólust indukál
- Köztük vonzó (diszperziós, vagy London-féle) erők lépnek fel
- Inter/intramolekuláris kölcsönhatás
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Gyenge kölcsönhatás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



$r_0$ : kötéshossz

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

## Atomi méretek fogalma

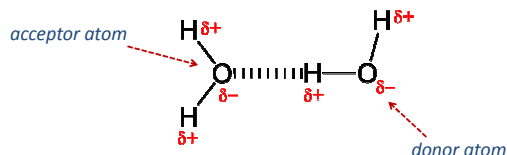


## Elektrosztatikus kölcsönhatáson alapuló kötések

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 átl.: 0,23 – 0,35 nm
- A kötés térben irányított
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Közepes erősségű kölcsönhatás ( $E_k \sim 0,2$  eV)

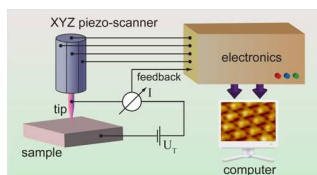


#### V. Hidrofób kölcsönhatás



- 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 (Izd. entrópiánövekedés elve, 2. félév)
- Intra/intermolekuláris kölcsönhatás
- Nagy jelentőség biokémiai reakciókban, szerkezetstabilizálásban
- Gyenge kölcsönhatás

#### Pásztázó próbamikroszkópiák (Scanning Probe Microscopy, SPM)

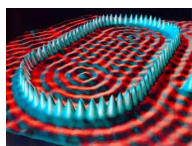


Változatos szerkezetvizsgáló eljárások, melyek egy vékony **szonda** és valamely **felület** között létrejövő atomi szintű **kölcsönhatások** detektálásán alapulnak.

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

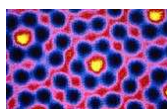
Nem diffrakció-limitált módszerek.

Akár pm-es pásztázási pontosság is elérhető.

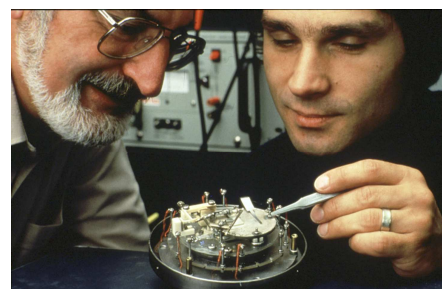


Vasatomok rézen, STM kép

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

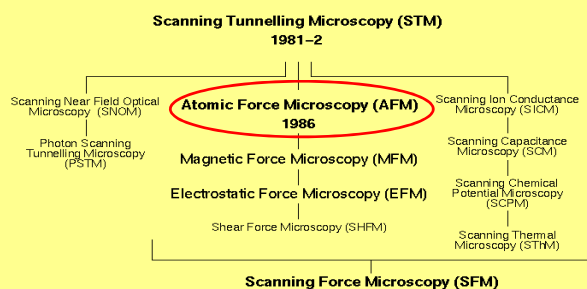


Atomok egy szilíciumlapkán

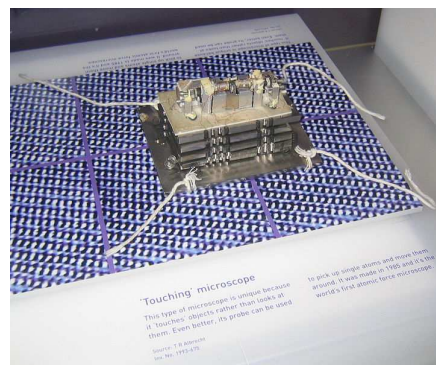


Heinrich ROHRER és Gerd BINNING  
Nobel díj: 1986

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

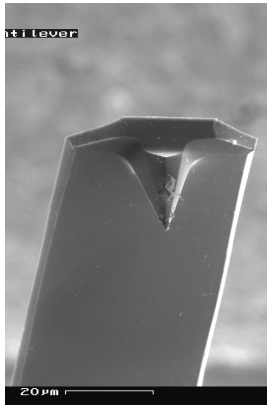


#### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

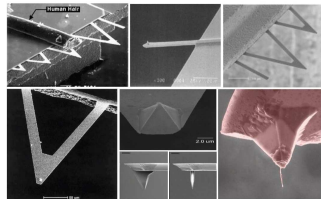




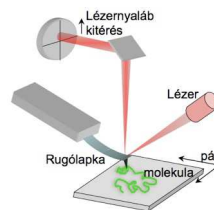
### A szonda: piciny tű



Egy kb. 100-500  $\mu\text{m}$  hosszú laprugóhoz (vagy rugólapkához) kapcsolva.  
Anyaga: ált. szilícium-nitrid  
Általában fémbevonat (Au, Cu, Ni...)  
Tűhegy sugara: 0.1 nm – 100  $\mu\text{m}$   
Rugóállandó:  $k \sim 0.1\text{-}10\text{ N/m}$   
 $f_0 \sim 50\text{-}500\text{ kHz}$



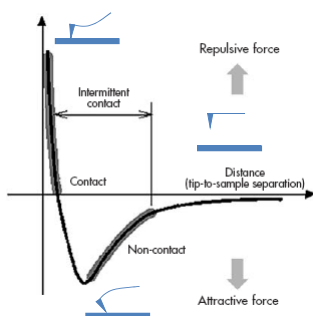
### Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



- 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 vonalaként **pásztázzuk** a felületet.
- Vertikális **felbontóképesség akár 10 pm**, a horizontális ennél rosszabb.

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

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

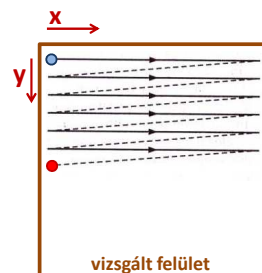


#### Atomi kölcsönhatások a tűhegy és a minta között:

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

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

#### Pásztázási mintázat:

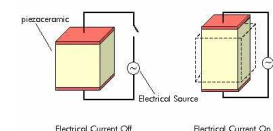


- pásztázás kezdőpontja
- szonda aktuális pozíciója

#### 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 hozzácsatolt feszültségvezérelt piezoelektromos kristályok segítségével.

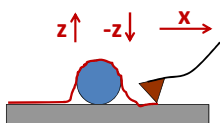


(Bővebben: Ultrahang ea., 2. félév)

### 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.

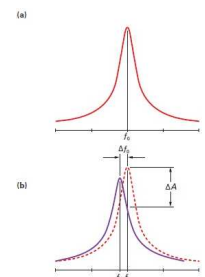
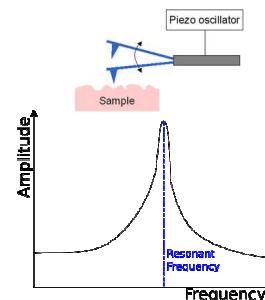


**Hátrány:** jelentős perturbáció lehet vertikális és horizontális irányban.

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

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

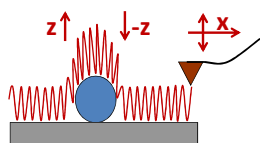
**Rezonancia:** kényszerrezgés,  $f \approx f_0$ , nagy amplitúdók



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

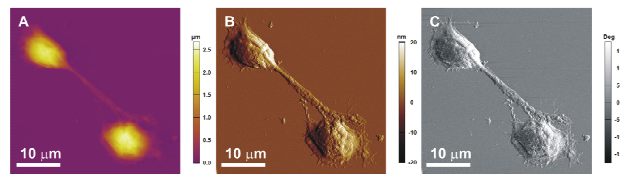
**Oscilláló mód:** (Tapping mode, Non-contact mode)

- A tűt a rezonanciafrekvenciájához közeli frekvencián **rezegtetjük**.
- 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 erőkifejtés, érzékeny minták vizsgálatára is alkalmas.

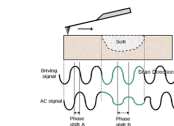
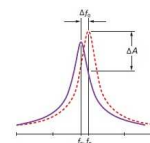
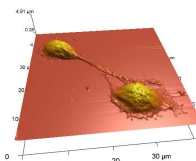
## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia



magasság kontraszt

amplitúdó-kontraszt

fázis-kontraszt

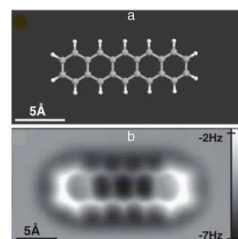


## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

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

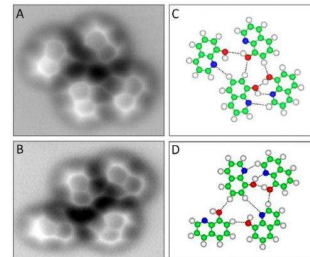
## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

Példák:



Pentacén molekula  
AFM képe

Nature Chemistry 3, 273–278 (2011)

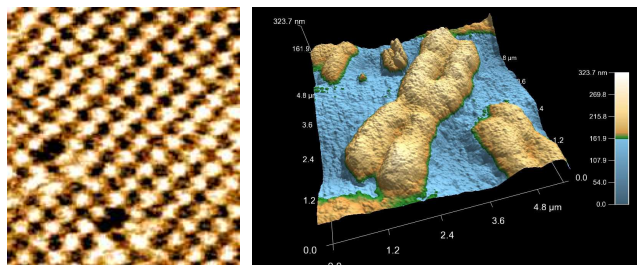


Hidrogénkötések 8-hidroxiquinolin  
molekulák között (AFM felvétel)

Science 26, 611-614 (2013)

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

Példák:

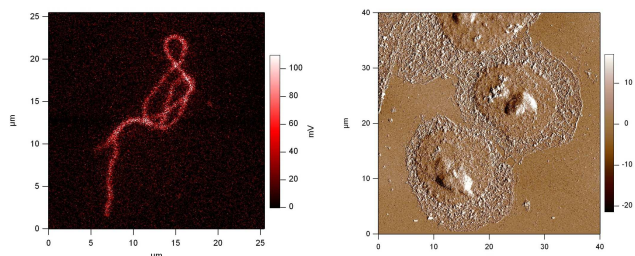


NaCl kristály AFM képe

Humán metafázisos kromoszóma AFM képe

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

Példák:



Egyedi aktinpolimer AFM képe

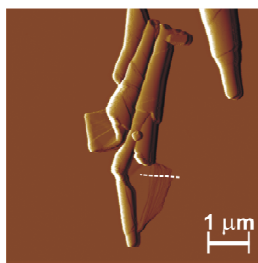
HeLa sejtek AFM képe

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

Példák:



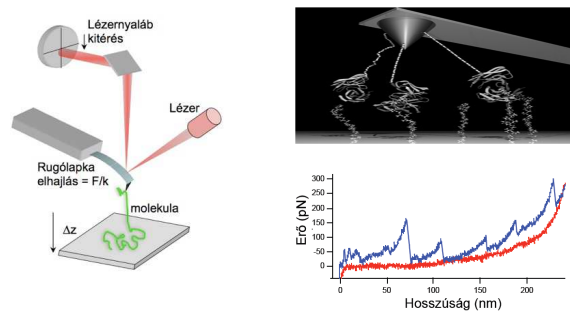
T7 bakteriofágok AFM képe



Többrétegű foszfolipid membrán tekercsek

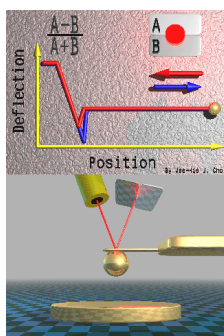
## Atomic Force Microscopy (AFM), Atomi erő mikroszkópia

**Erőspektroszkópia:** a mintát erő 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 mérhetők így.

63

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



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



Köszönöm a figyelmet!

