

Anyagszerkezet, anyaghullám, atomi illetve molekuláris kölcsönhatások. Atomi erő mikroszkópia (AFM).

Kiss Balázs

kissb3@gmail.com

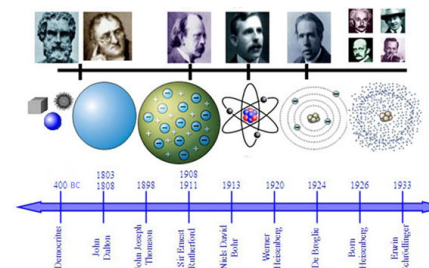


Nanobiotechnológia és Egyedi Molekula Kutatócsoport és
Vékony Filamentum Mechanobiofizika Laboratórium,
Semmelweis Egyetem,
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet.

2020. Október 08.

Atommodellek

Tankönyv: 23-37. oldal

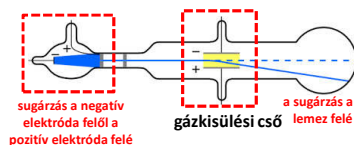


- **Démokritosz** (i.e. 400 körül): az anyag atomos szerkezetű
- **Dalton (1803)**: **súlyviszony-törvény**: az elemek azonos atomokból épülnek fel
- **Thomson (1897)**: elektron felfedezése (katódsugárzás); „mazsolás puding” modell
- **Rutherford (1909-1911)**: atommag (nukleonok: p^+ és n_0) és elektronok
- **Bohr (1913)**: diszkrét atomi energiaállapotok

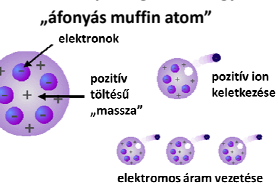
2

Thomson és Rutherford

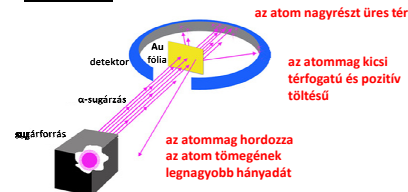
Thomson: katódsugárzás felfedezése



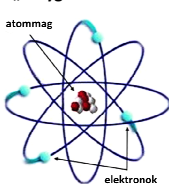
„mazsolás puding atom” vagy



Rutherford: kísérletek α -részecskével



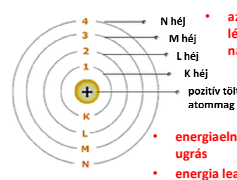
„bolygómodell”



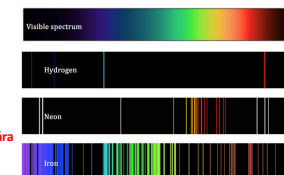
3

Bohr és Schrödinger

Bohr: az elektronhéjak leírása



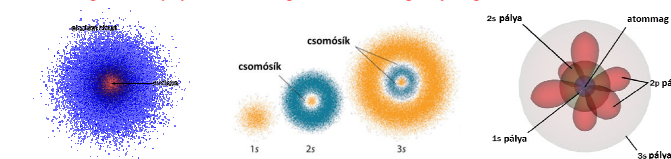
Néhány elem emissziós spektruma:



Schrödinger: az elektron kvantummechanikai modellje

- **nincs meghatározott pálya, az elektron megtalálási valószínűségét adja meg**

Komplex pályaalakok:
elektronfelhő

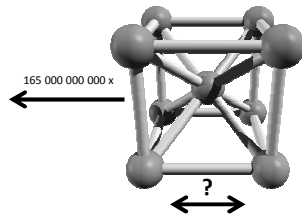


4

Hogyan jöhetnek létre stabil szerkezetek?



makroszkopikus méretskála: Atomium



nanovilág: vas tércentrált köbös kristályrácsa

Általános vezérlő elv:

következmény:
RENDEZETLENSÉG

**taszító
köölcsönhatás**

**vonzó
köölcsönhatás**

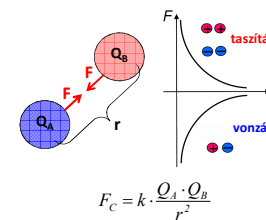
következmény:
RENDEZETTSÉG

5

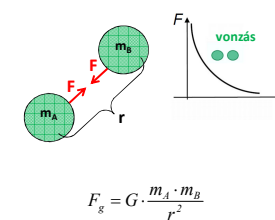
Alapvető kölcsönhatások a fizikában

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

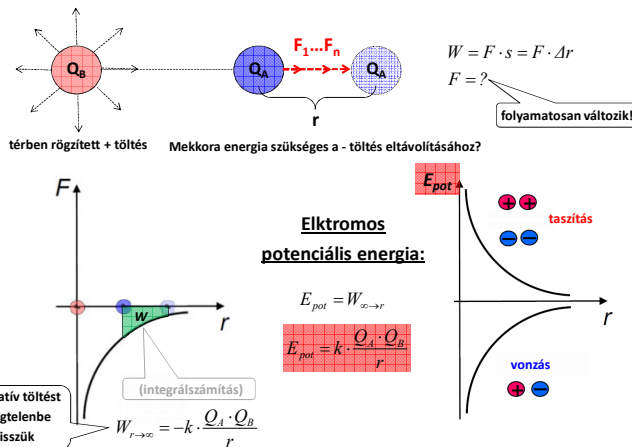


Gravitáció



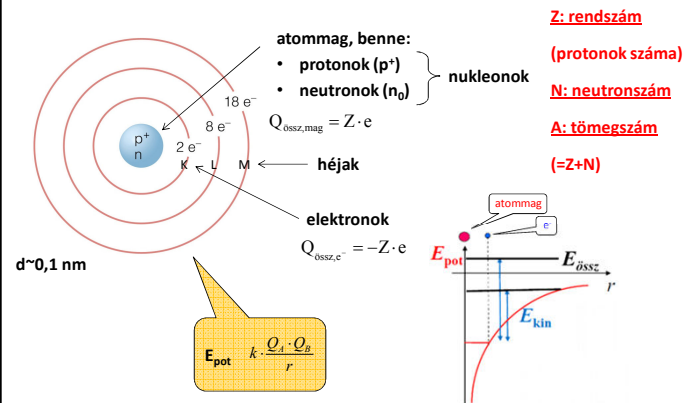
6

Elektromos potenciális energia (E_{pot})



7

Az atom felépítése



8

Az elektron energiaállapotai

$E_{\text{össz}} < 0$: kötött elektron
 $E_{\text{össz}} > 0$: szabad elektron

n: főkvantumszám

a hidrogénatom elektronjának
lehetséges energiái

l: mellékvantumszám
m: mágneses kvantumszám

s: sharp;
p: principal;
d: diffuse;
f: fundamental.

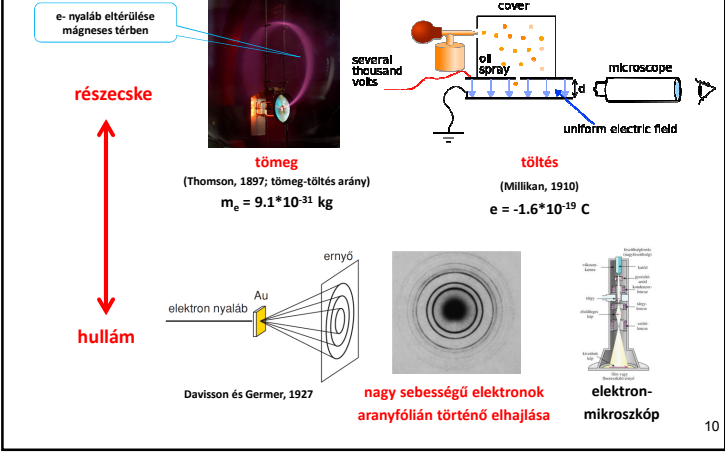
alhéjak

Id. fényemisszió
gyakorlat.

- Energiaminimum elve
- Pauli-elv

9

v.ö.: „fény kettős természete”



Az elektron leírása hullámfüggvénnyel

$k = 1$

$k = 2$

$k = 3$

analógia: kifeszített húron kialakuló állóhullámok

$l = k \frac{\lambda}{2}$ $k = 1, 2, \dots$

csak diszkrét értékeket vehet fel!

λ : anyaghullám hullámhossza

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

De Broglie, 1923

Az elektron állapotfüggvénye:

$\psi(x, t)$

(Schrödinger)

- elektron helye (x): ahol $\psi(x, t) = 1$
- elektron impulzusa (p): $\psi(x, t)$ „alakja”

Where am I...?

Or what is my momentum...?

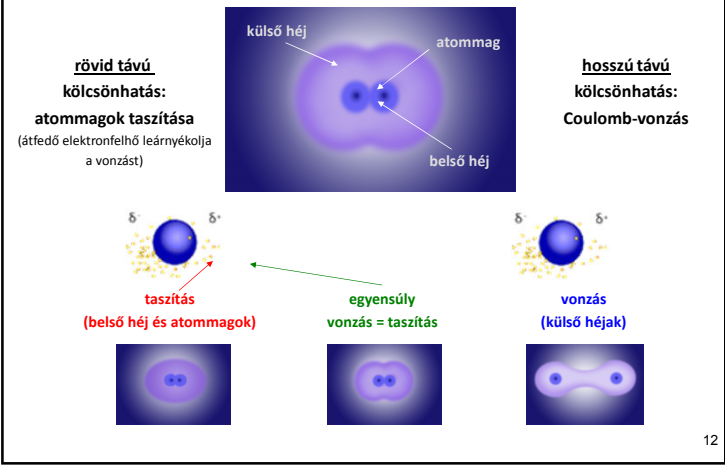
Or where am I, p?

Oh hell!! Why worry about all that again... I'm not even sure if I'm a wave or a particle!

1926

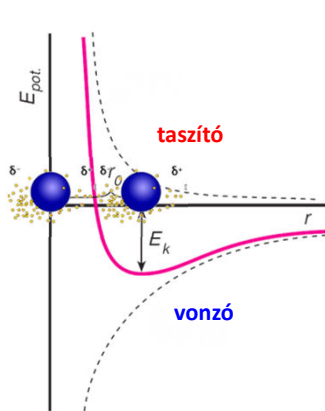
11

Tankönyv: 44-51. oldal



Atomi kölcsönhatások

Tankönyv: 44. oldal



$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító}$$

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

A, B: kölcsönhatásra jellemző állandók

(atomtól függők)

n (vonzó) < m (taszító)

r_0 : kötéstávolság

E_b : kötési energia

13

Elsődleges kötések

intramolekuláris

erős

elsődleges

intermolekuláris

gyenge

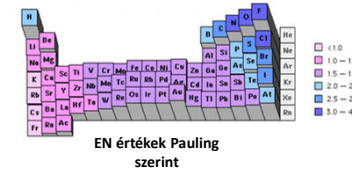
másodlagos

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

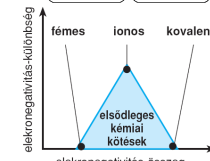
kialakulásuk az elektronegativitás (EN) függvénye

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

ionizációs energia elektron-affinitás



EN értékek Pauling szerint

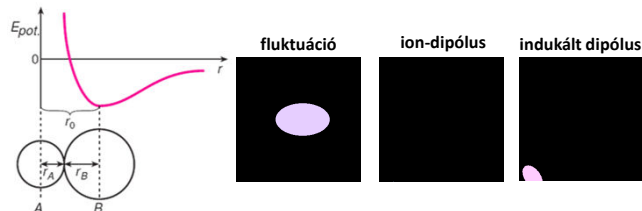


14

Másodlagos kötések 1

- 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: ($E_{köt} \sim 0,02\text{ eV}$)

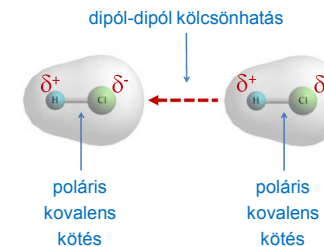


15

Másodlagos kötések 2

- 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 ($E_{köt} = 0,003-0,02\text{ eV}$).



$$E_{vonzó} = p \cdot E$$

p : dipólusmomentum ($p = q \cdot d$)

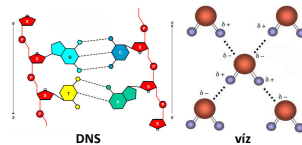
E : a környező molekulák által generált elektromos térerősség

16

Másodlagos kötések 3

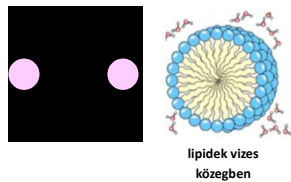
- **H-kötés:** a H-atom két másik nagy elektronegativitású (F, O, N) atom között létesít kapcsolatot

- $r \sim 0,23-0,35 \text{ nm}$
- $E \sim 0,2 \text{ eV}$



- **Hidrofób kölcsönhatás:** gyenge Van der Waals kölcsönhatás lehetne ($E_{\text{köt}} = 0,003-0,02 \text{ eV}$), de ezt a hőmozgás felszakítaná ($kT \sim 0,025 \text{ eV}$)!

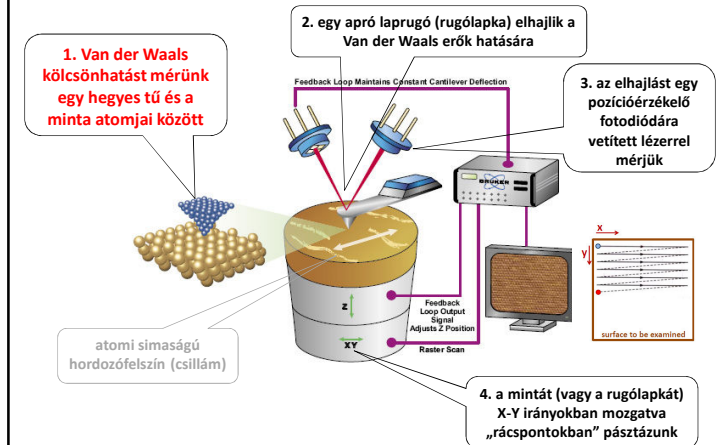
- rendezett vízmolekulák az apoláris molekula körül (minimális határfelület)



17

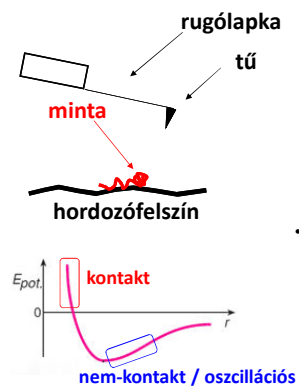
Atomi erő mikroszkópia (AFM)

Tankönyv: 573. oldal



18

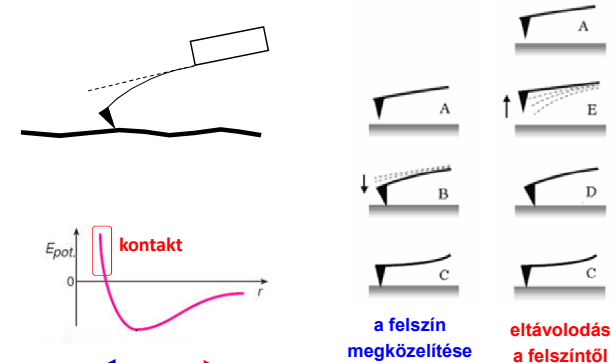
AFM üzemmódok



- **Kontakt:** a tű hozzáér a mintához; a **rugólapka elhajlása** a felszín topográfiájára enged következtetni. Leképezéskor az elhajlást **állandó** értéken tartjuk.
- **Z-feedback:** a rugólapka emelésével / süllyesztésével biztosítja az állandó értékű **elhajlást** (setpointhoz képest).
- **topográfiai információ** (pl. magasság) minden x;y pontban a rugólapka Z-tengely irányú elmozdulásából van számítva.
- **Nem-kontakt:** a **rugólapka** a mintától távolabb **oszcillál**; a rezgési amplitúdó és a **rezonanciafrekvencia** (f_0) változik a felszín topográfiájának hatására.
- **Z-feedback:** a rugólapka emelésével / süllyesztésével biztosítja az állandó értékű **amplitúdót**.

19

Kontakt üzemmódú AFM



20

Kontakt üzemmódú AFM

alkalmas pl. lágy
biológiai minták
(sejtek) vizsgálatára

lézer

kvadráns
fotodióda

U_0
 U_1

$\Delta d \sim \text{erő}$

$F = \text{erő} = D \Delta d$ (Hooke-törvény)

Δd : rugólapka elhajlása
 D : rugóállandó

erőmérés /
rugalmasságmérés
biológiai mintákon

2 μm

21

Kontakt üzemmódú AFM

22

Rezonancia

Gyakorlat: Rezonancia

Rezonancia: olyan kényszerrezgés, amelynél a külső kényszererő frekvenciája közel esik a rezgőrendszer sajátfrekvenciájához. Ilyenkor igen nagy amplitúdók fordulhatnak elő.

Szabadrezgés (csillapítatlan)

Kényszerrezgés

23

Nem-kontakt / oszcillációs AFM üzemmód

Gyakorlat: Rezonancia

Rezonancia: olyan kényszerrezgés, amelynél a külső kényszererő frekvenciája közel esik a rezgőrendszer sajátfrekvenciájához. Ilyenkor igen nagy amplitúdók fordulhatnak elő.

GERJESZTÉS

KÉNYSZERREZGÉS

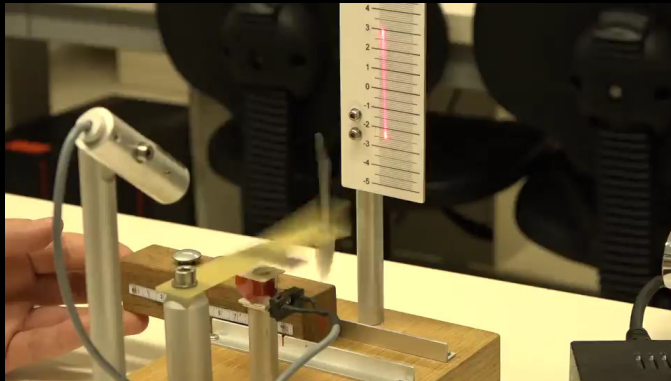
REZONANCIA

Rezonanciagörbe

a gerjesztés különböző frekvenciái, f_{gy}

24

Nem-kontakt / oszcillációs AFM üzemmód

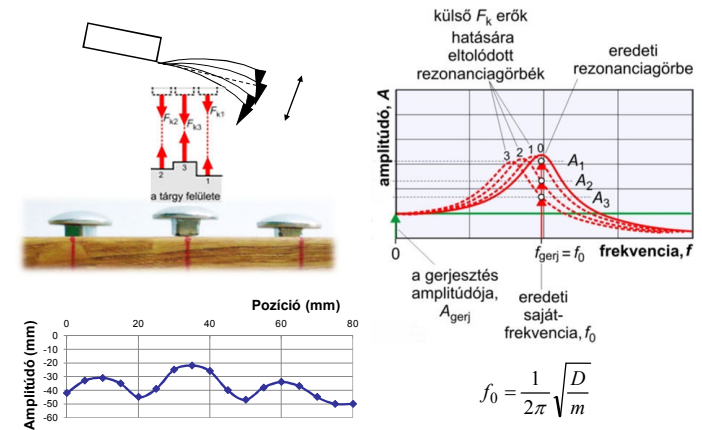


Megjegyzés: A Van der Waals erőket mágneses kölcsönhatással modellezzük.

25

Gyakorlat: Rezonancia

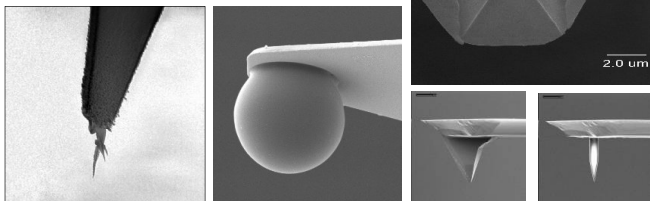
Nem-kontakt / oszcillációs AFM üzemmód



26

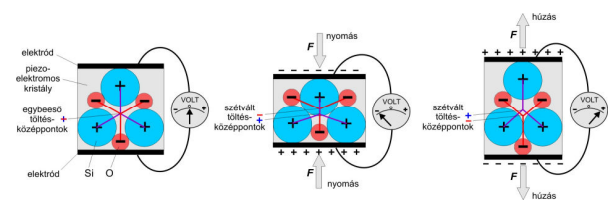
Rugólapkák

- Anyag: főleg szilícium nitrid (Si_3N_2)
- Tű görbületi sugara: 0,1 nm - 100 μm
- Rugóállandó $\sim 0,1 - 10 \text{ N/m}$
- $f_0 \sim 50 - 500 \text{ kHz}$



27

Pásztázás elve: piezoelektromosság



- **direkt piezoelektromos hatás:** deformáció \rightarrow feszültség
- **inverz piezoelektromos hatás:** feszültség \rightarrow deformáció
- X, Y, Z irányú piezo: pl. 150 V \rightarrow 40 μm

precíz, akár 0,1 nm-es léptetés



28

AFM - jellemzők

Fő előnyök:

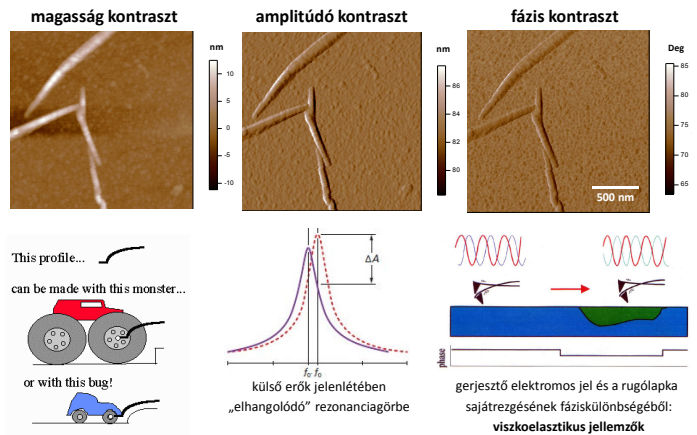
- 3D felszíni topográfia.
- Képképzés ~ 10 pm-es függőleges és valamelyest rosszabb oldalirányú felbontással.
- Bármilyen felszín leképezhető (elektromos vezetők, szigetelők, félvezetők).
- Atomszférikus, védőgáz vagy folyadékpufferes közegben is lehetséges a képképzés.
- Natív minta is vizsgálható (nem szükséges festés vagy fixálás).
- Biológiai minták élettani körülmények között (hőmérséklet, pH, megfelelő ionerősség) is vizsgálhatók.

Fő hátrányok:

- A mintát hordozófelszínhez kell kötni, mely megváltoztathatja a minta szerkezetét.
- Lassú pásztázás.
- Maximális pásztázási magasság néhány mikrométer lehet.
- A pásztázott terület maximális mérete 10 mikrométeres nagyságrendű.
- Drága (műszer, mintaelőkészítés, rugólapkák, stb).

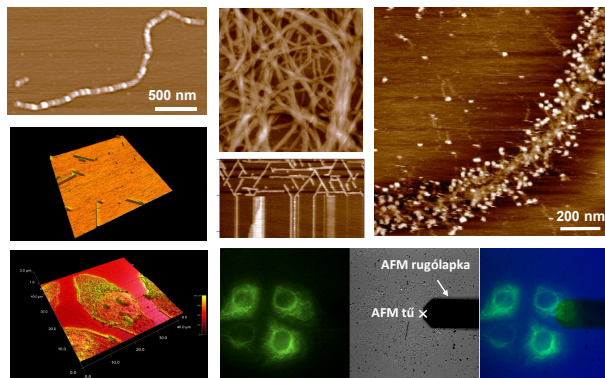
29

AFM – képképzés, felbontás



30

Intézetünkben született képek



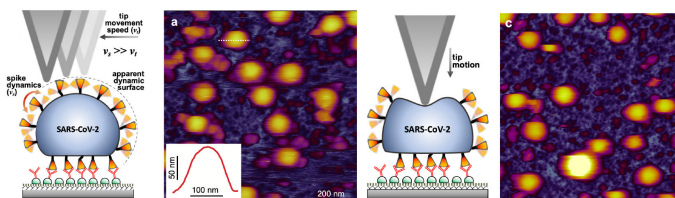
31

Natív SARS-CoV-2 vírus AFM-felvétele

Topography, spike dynamics and nanomechanics of individual native SARS-CoV-2 virions

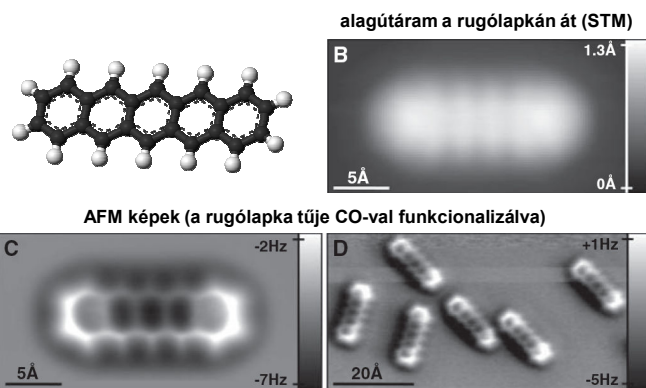
Bálint Kiss¹*, Zoltán Kis^{2,3*}, Bernadett Pályi², Miklós S.Z. Kellermayer^{1*}

bioRxiv preprint doi: <https://doi.org/10.1101/2020.09.17.302380>



32

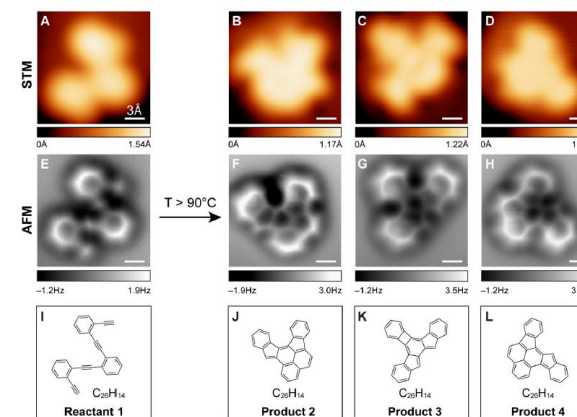
Pentacén molekula



Nature Chemistry 1, 597 - 598 (2009)

33

Kémiai reakciók leképezése („elektronsűrűség”)



34

Köszönöm

a

figyelmet!

