

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

**Kiss Balázs**

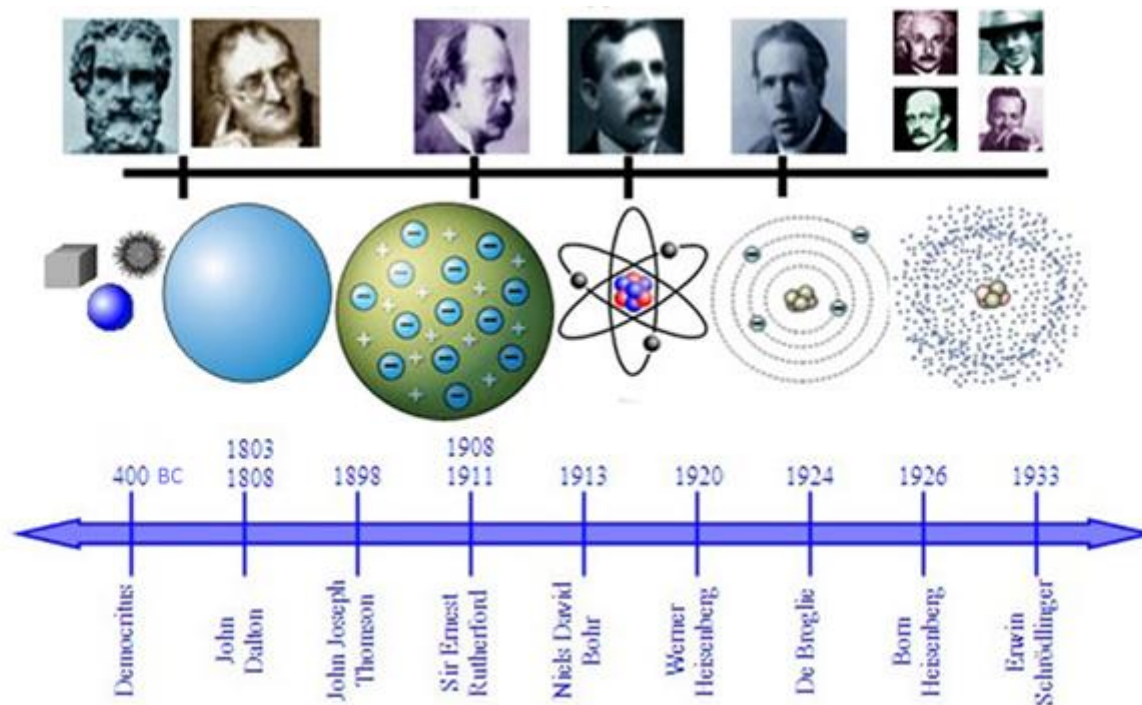
kissb3@gmail.com



**Miofilamentum Mechanobiofizika Laboratórium,  
Semmelweis Egyetem,  
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet.**

*2022. Október 06.*

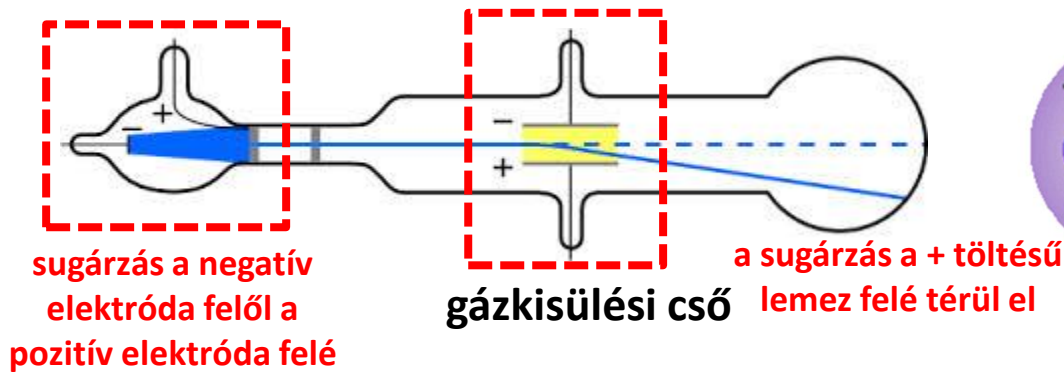
# Atommodellek



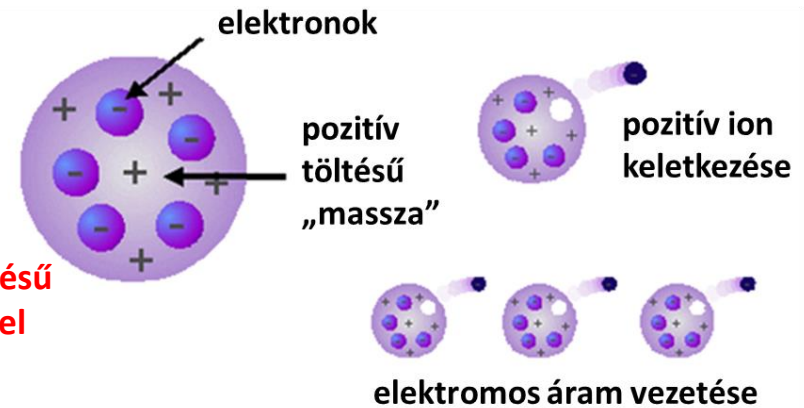
- **Démokritosz (i.e. 400 körül):** az anyag atomos szerkezetű
- **Dalton (1803): súlyviszony-törvény:** az elemek azonos atomokból épülnek fel
- **Thomson (1897):** elektron felfedezése (katódsugárzás); „mazsolás puding” modell
- **Rutherford (1909-1911):** atommag (nukleonok:  $p^+$  és  $n_0$ ) és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

# Thomson és Rutherford

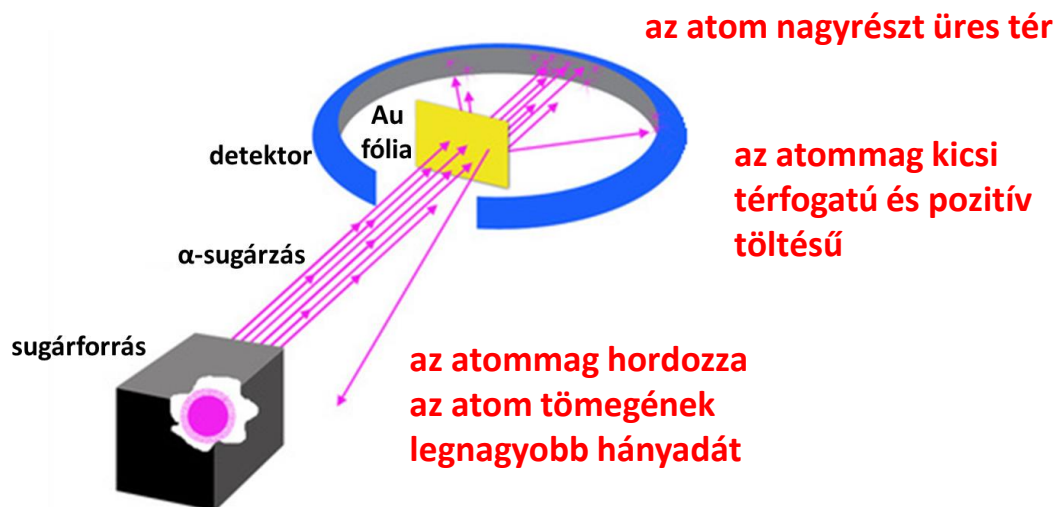
## Thomson: katódsugárzás felfedezése



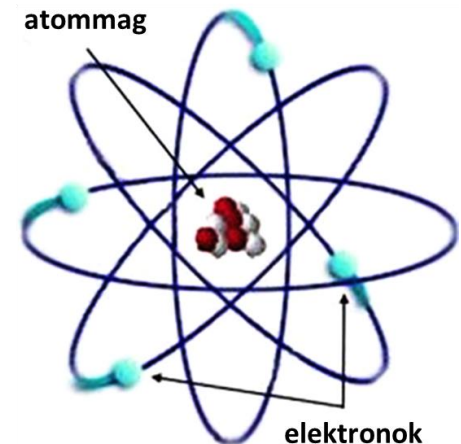
## „mazzolás puding atom” vagy „áfonyás muffin atom”



## Rutherford: kísérletek $\alpha$ -részecskével



## „bolygómodel”

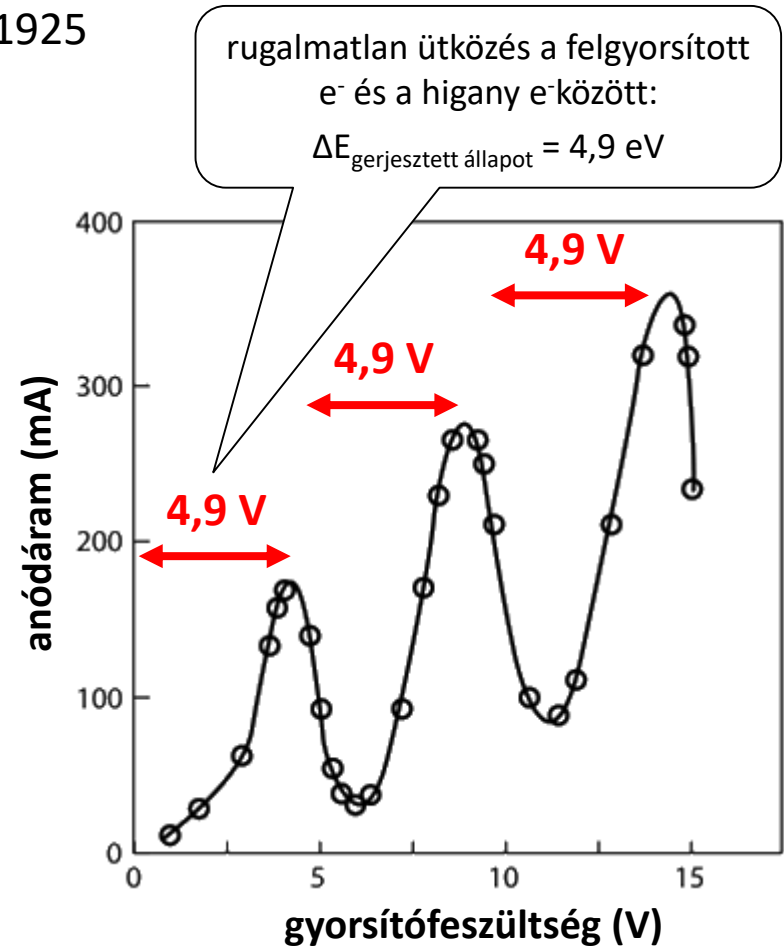
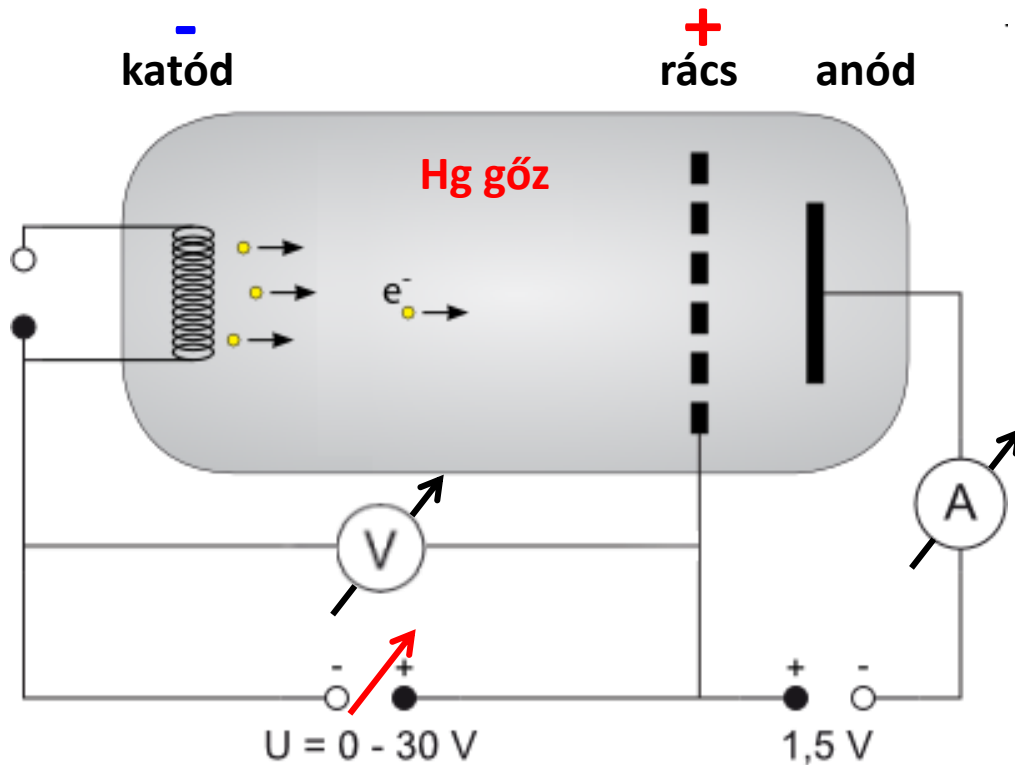


# Franck-Hertz Kísérlet



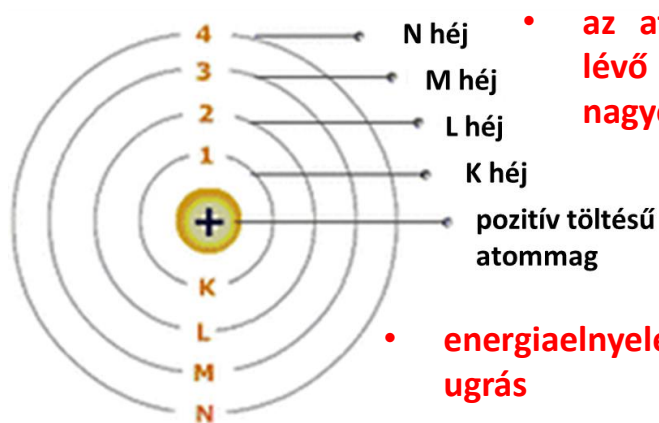
James Franck Gustav Hertz

- 1914-ben: a gerjesztett higanyatomok **elektronjainak diszkrét, kvantált energiaállapotai vannak**
- fizikai Nobel díj, 1925



# Bohr és Schrödinger

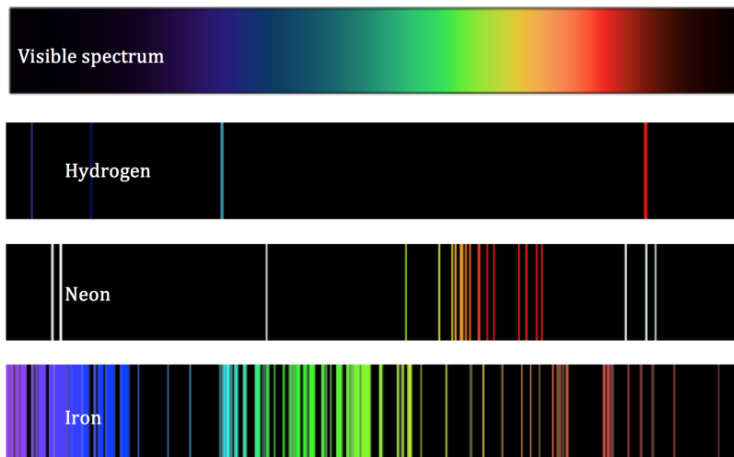
## Bohr: az elektronhéjak leírása



- az atommagtól távolabb lévő elektronok energiája nagyobb

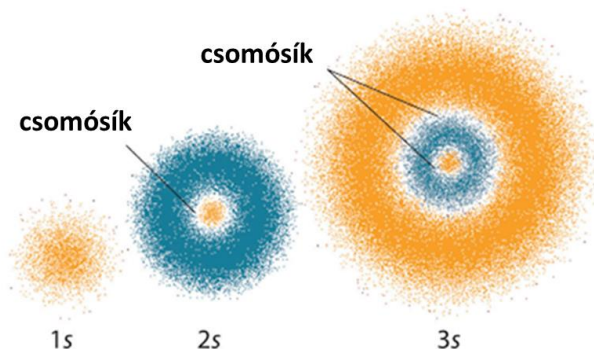
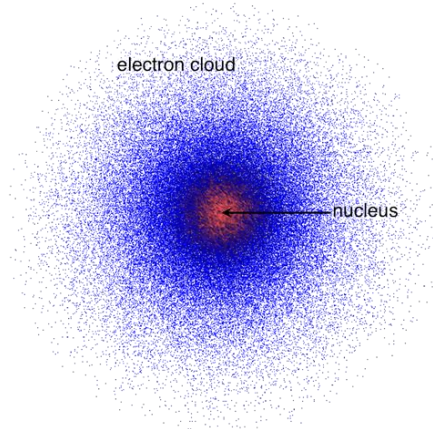
- energiaelnyelés: magasabb pályára ugrás
- energia leadás: fotonok emissziója

## Néhány elem emissziós spektruma:

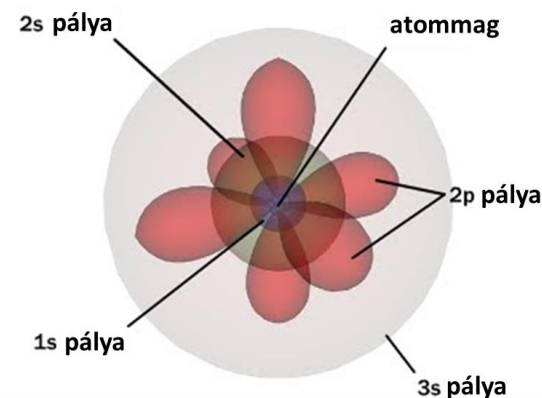


## Schrödinger: az elektron kvantummechanikai modellje

- nincs meghatározott pálya, az elektron megtalálási valószínűségét adja meg



## Komplex pályaalakok: elektronfelhő

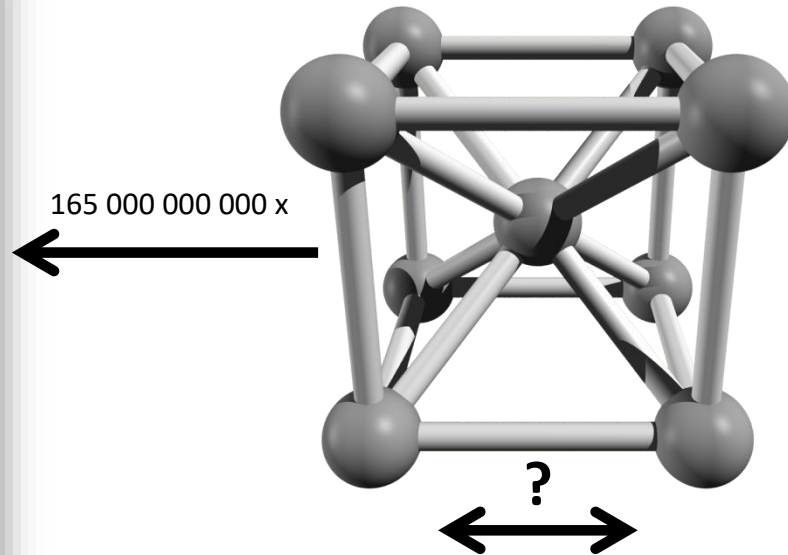




# Hogyan jöhetnek létre stabil szerkezetek?



makroszkopikus méretskála: Atomium



nanovilág: vas tércentrált köbös kristályrácsa

## Általános vezérlő elv:

következmény:  
RENDEZETLENSÉG

**taszító**  
**kölcsönhatás**



**vonzó**  
**kölcsönhatás**

következmény:  
RENDEZETTSÉG

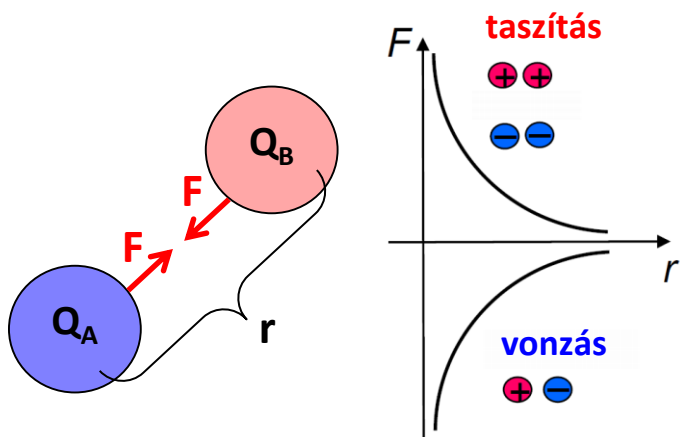
# Alapvető kölcsönhatások a fizikában

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	$10^{-18}$	$10^{-13}$

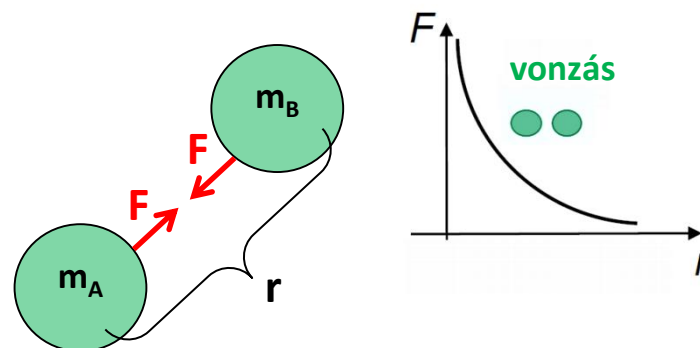
## Coulomb-kölcsönhatás



## Gravitáció

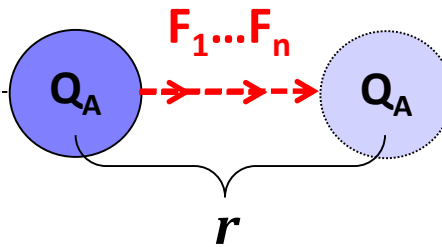
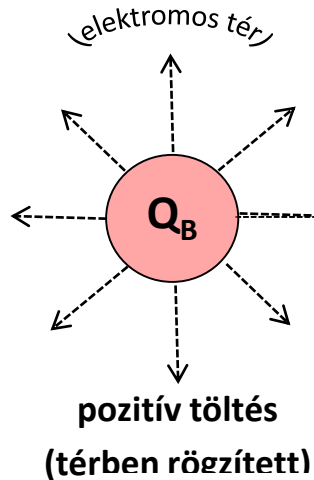


$$F_C = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r^2}$$



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

# Elektromos potenciális energia ( $E_{\text{pot}}$ )

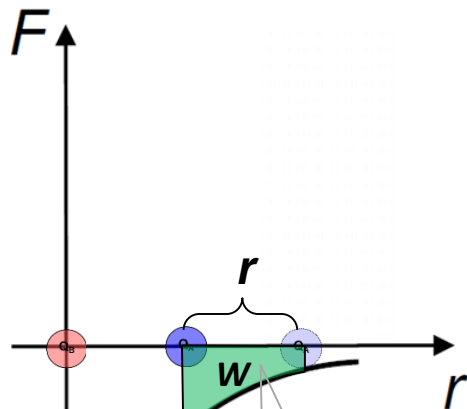


$$W = F \cdot r$$

$$F = ?$$

folyamatosan változik!

Mekkora energia szükséges a negatív töltés eltávolításához?



(integrálszámítás)

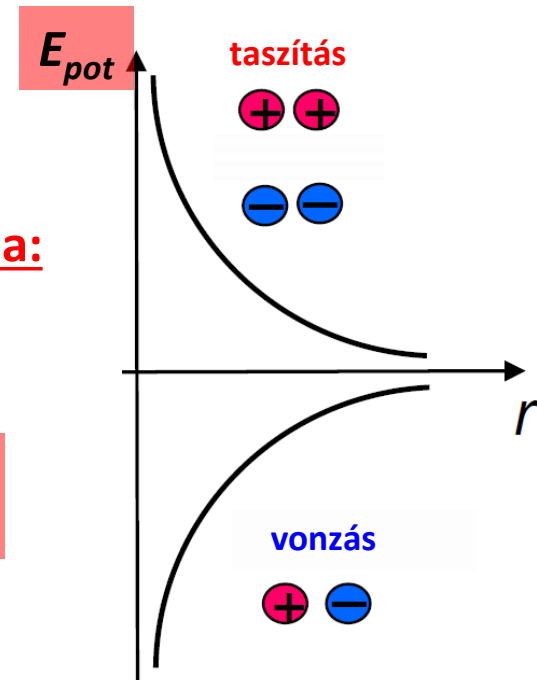
$$W_{r \rightarrow \infty} = -k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r}$$

a negatív töltést  
a végtelenbe  
visszük

Elektromos  
potenciális energia:

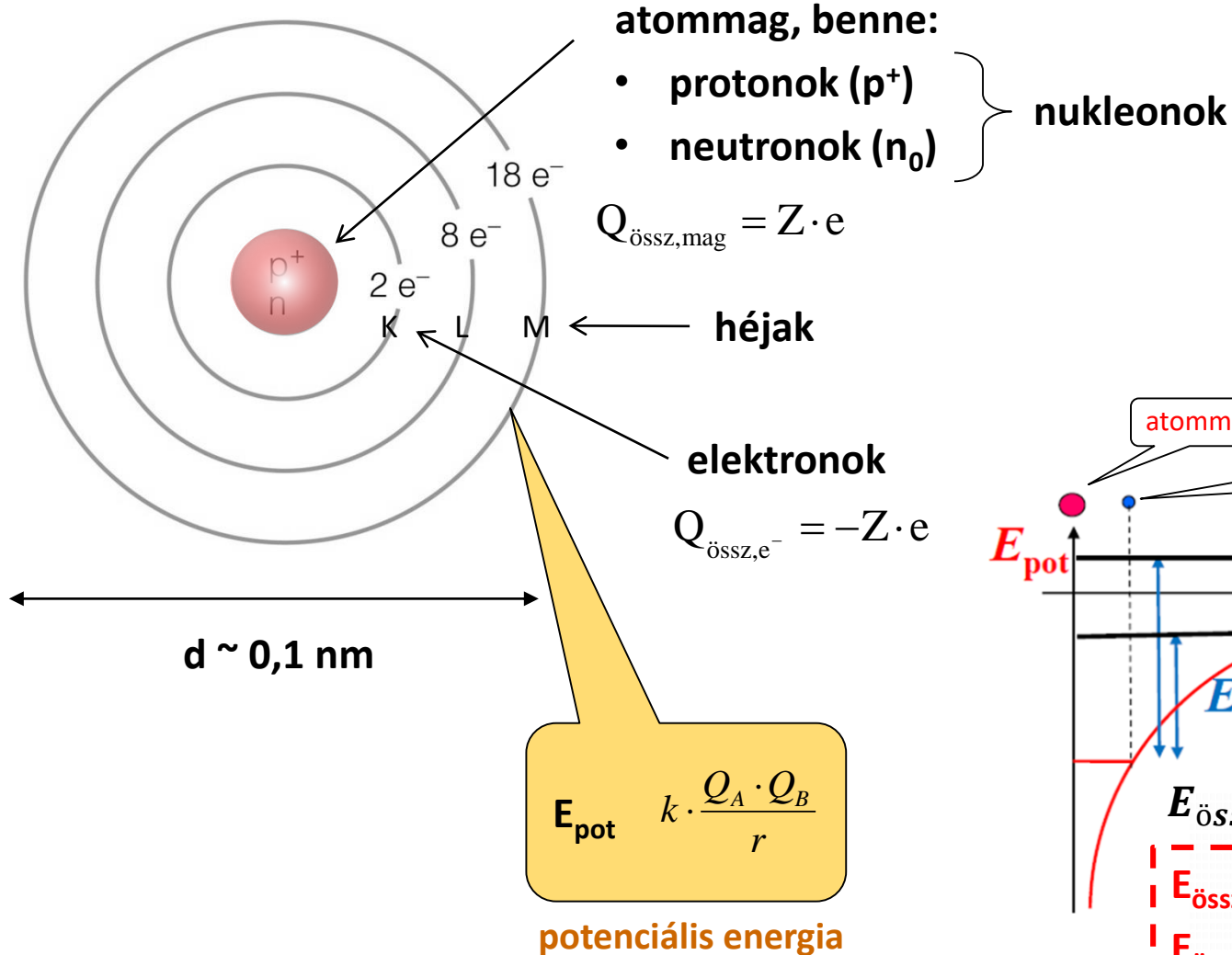
$$E_{\text{pot}} = W_{\infty \rightarrow r}$$

$$E_{\text{pot}} = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r}$$





# Az atom felépítése



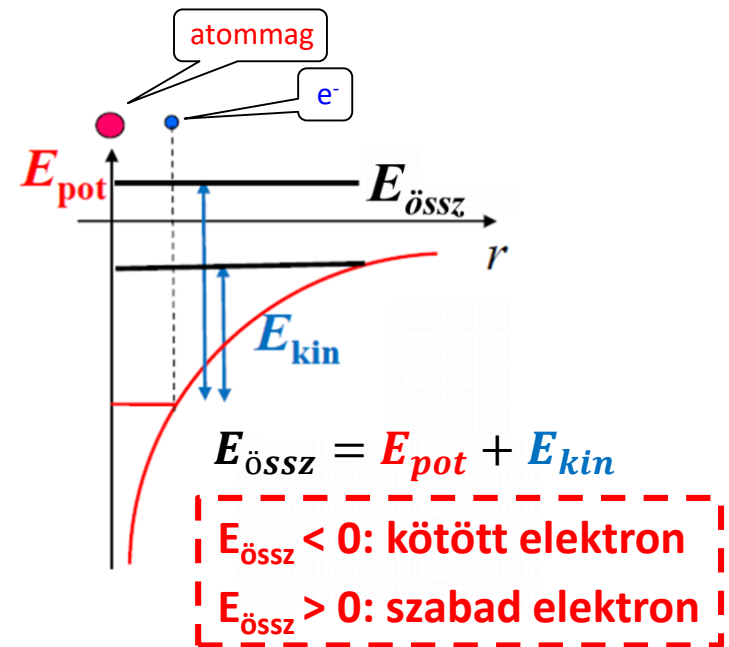
Z: rendszám

(protonok száma)

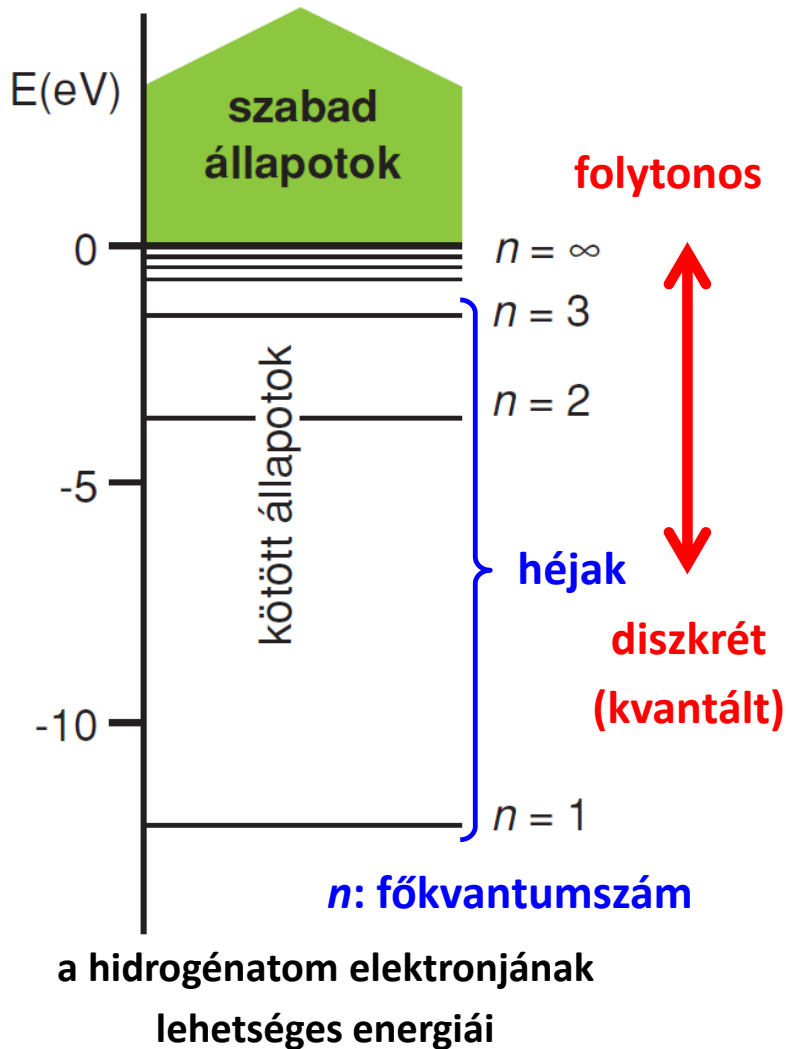
N: neutronsám

A: tömegszám

(=Z+N)

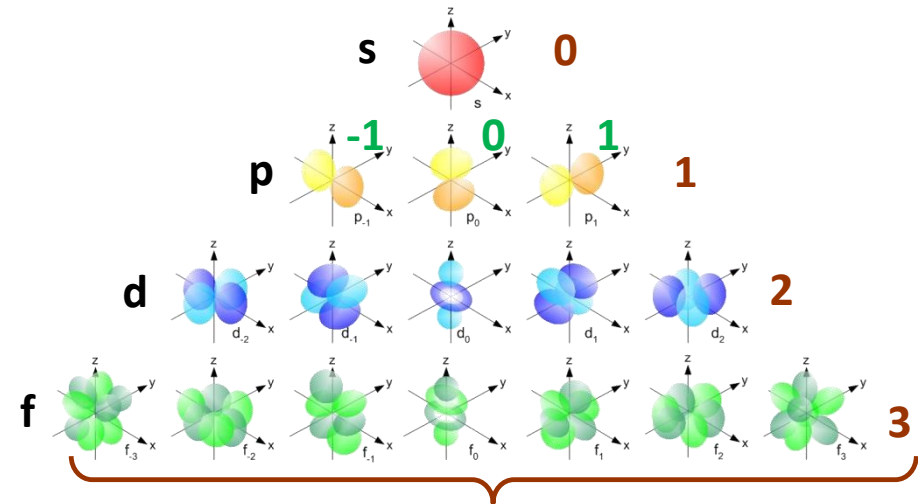


# Az elektron energiaállapotai



$l$ : mellékvantumszám ( $n-1$ )

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



s: sharp;

p: principal;

d: diffuse;

f: fundamental.

**alhéjak**

ld. fényemisszió  
gyakorlat

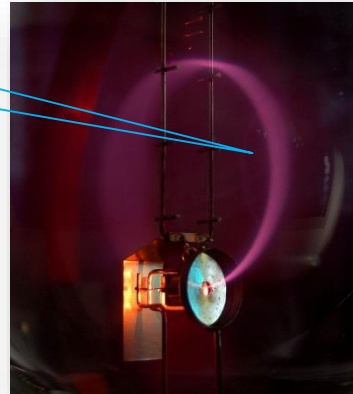
$m_s$ : spin kvantumszám ( $\pm 1/2$ )

- Energiaminimum elve
- Pauli-elv

# Az elektron kettős természete

v.ö.: „fény kettős természete”

e- nyaláb eltérülése  
mágneses térben



részecske

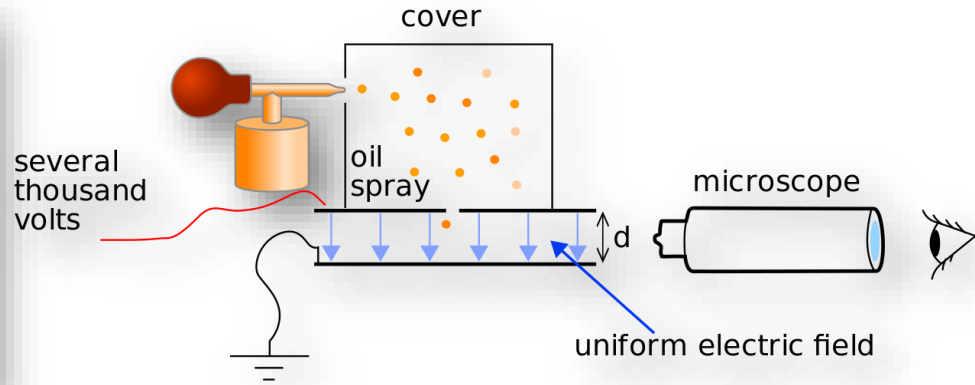


hullám

**tömeg**

(Thomson, 1897; tömeg-töltés arány)

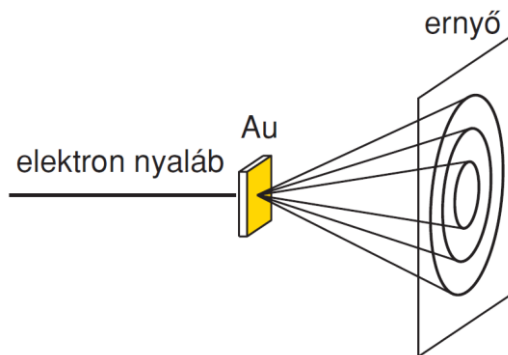
$$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$



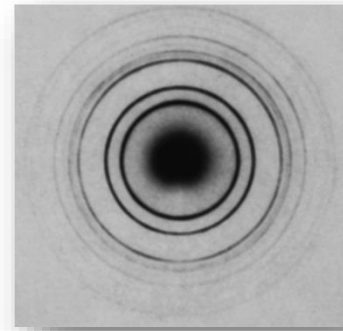
**töltés**

(Millikan, 1910)

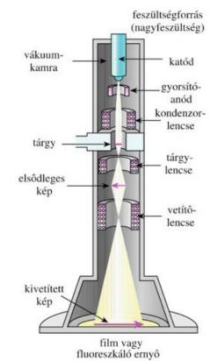
$$e = -1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$



Davisson és Germer, 1927

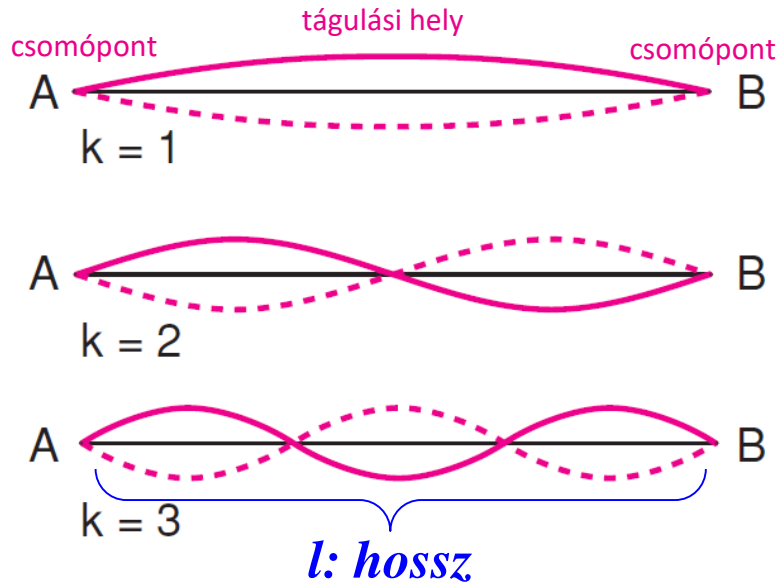


**nagy sebességű elektronok  
aranyfólián történő elhajlása**



**elektron-  
mikroszkóp**

# Az elektron leírása hullámfüggvénnyel



analógia: kifeszített húron kialakuló állóhullámok

## Az elektron állapotfüggvénye:

$$\psi(x,t)$$

(Schrödinger)

- **elektron helye (x):** ahol  $\psi(x,t) \neq 0$
- **elektron impulzusa (p):**  $\psi(x,t)$  „alakja”

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

csak diszkrét  
értékeket vehet fel!

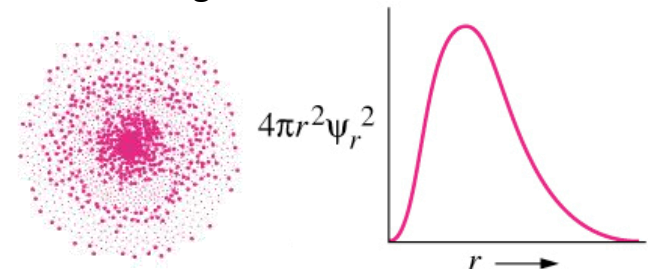
$\lambda$ : anyaghullám  
hullámhossza

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



De Broglie, 1923

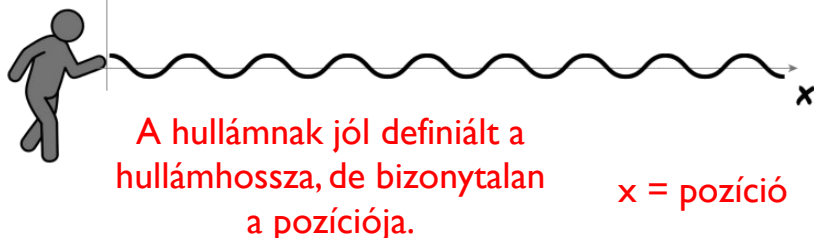
- $\psi^2$ : az elektron adott pályán történő megtalálási valószínűségének sűrűségével korrelál



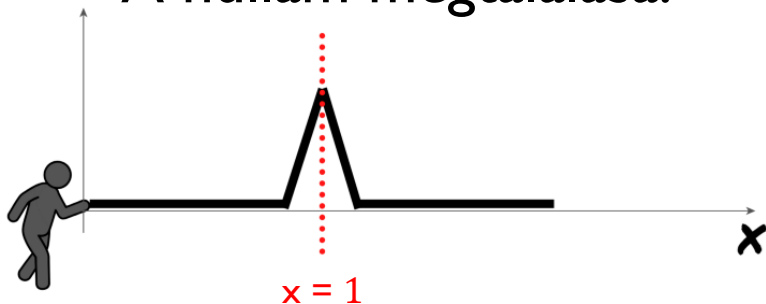
# Az atomban kötött elektron

az atommag (vagy proton)  
elektromos terében

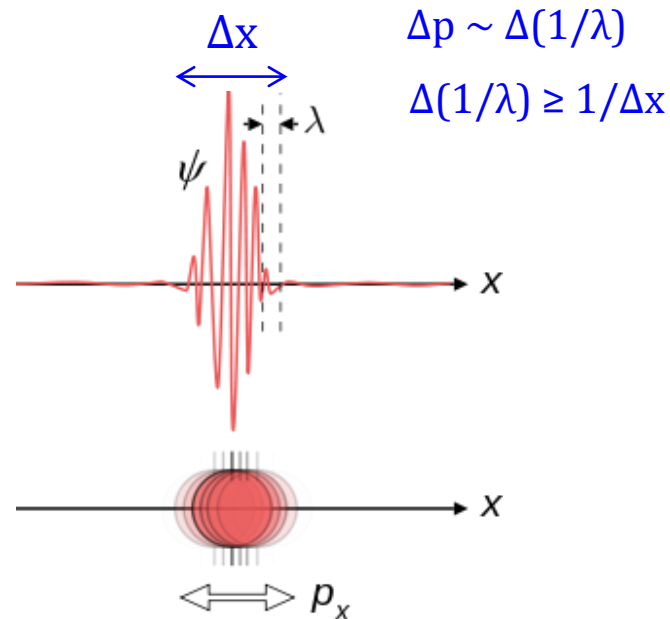
## Hol van a hullám a térben?



## A hullám megtalálása.



A kötelet hirtelen függőlegesen megrántva a hullám „helye” azonosítható, de a hullámfüggvény jelentősen torzul.



**A Heisenberg-féle bizonytalansági összefüggés:**

az impulzus bizonytalansága ( $\Delta p$ ) :

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

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

$\Delta t$ : bizonytalan, így a  $\Delta E$  pontosan meghatározható: **kötött elektron esetén**

**diszkrét energiaszintek**

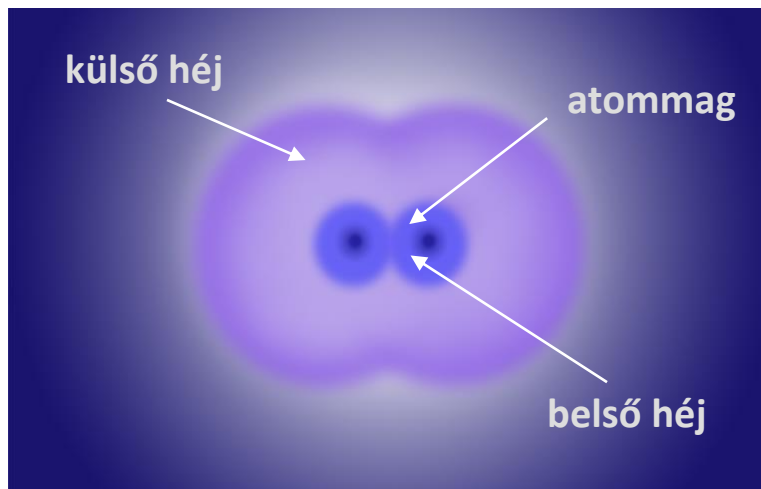
# Atomi kölcsönhatások

rövid távú

kölcsönhatás:

**atommagok taszítása**

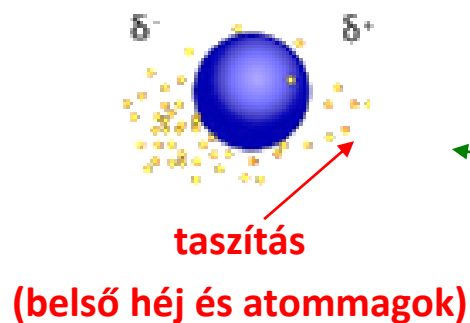
(átfedő elektronfelhő leárnyékolja a vonzást)



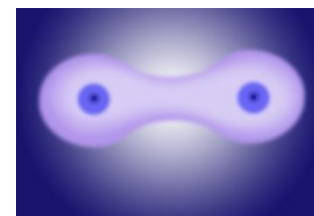
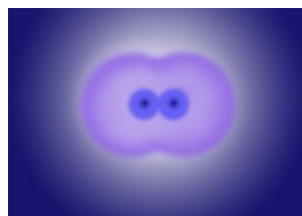
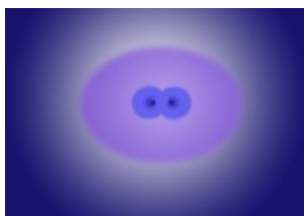
hosszú távú

kölcsönhatás:

**Coulomb-vonzás**

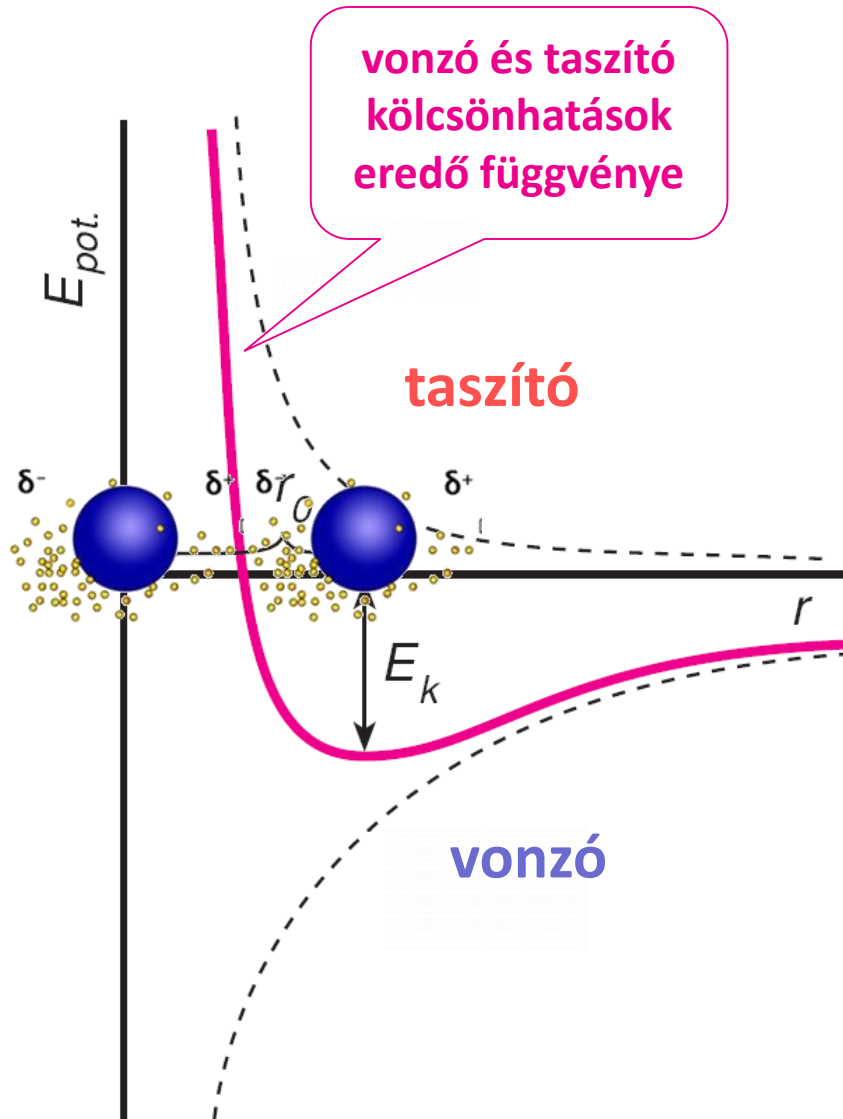


egyensúly  
vonzás = taszítás





# Atomi kölcsönhatások



$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító}$$

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

A, B: kölcsönhatásra jellemző állandók  
(atomtól függők)

$$n \text{ (vonzó)} < m \text{ (taszító)}$$

$r_0$ : kötéstávolság

$E_k$ : kötési energia

# Elsődleges kötések

intramolekuláris

erős

elsődleges

intermolekuláris

gyenge

másodlagos

„kötésben lévő atom  
elektronvonzó  
képessége”

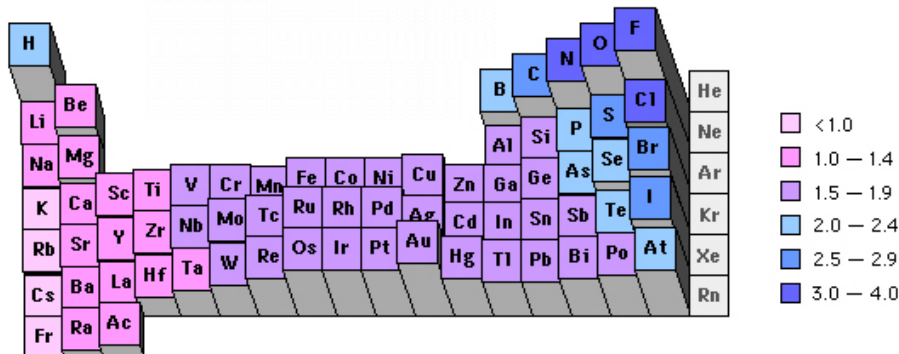
- **kovalens:** közös elektronpályák a részt vevő atommagok körül, erős:  $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$
- **fémek kötése:** sokatomos rendszer,  $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$
- **ionos kötés:** Coulomb-erők az ionok között,  $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$

kialakulásuk az  
**elektronegativitás  
(EN) függvénye**

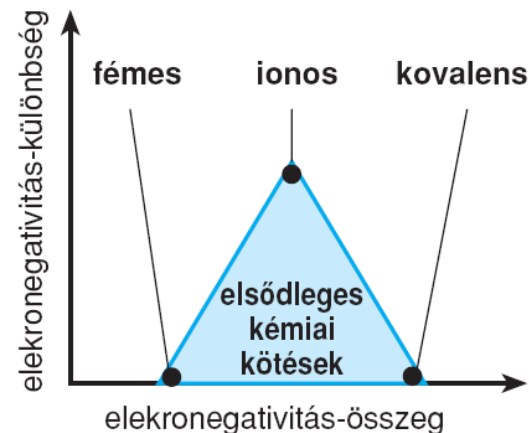
$$EN = |E_i| + |E_{ea}|$$

ionizációs  
energia

elektron-  
affinitás

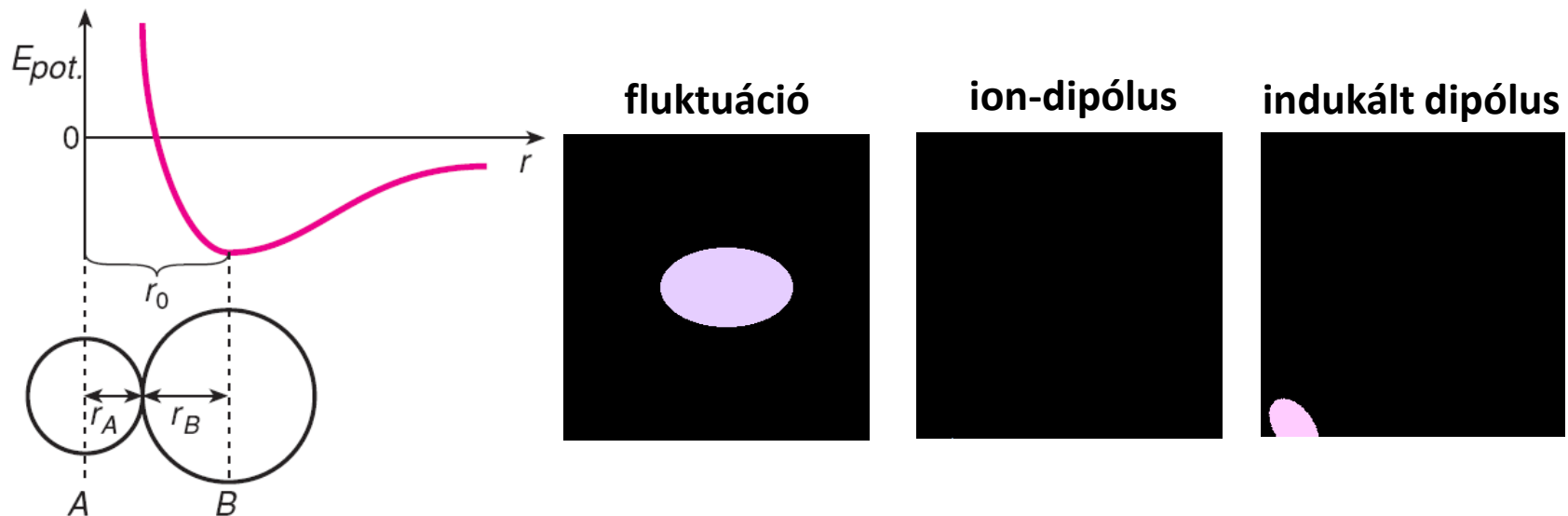


EN értékek Pauling  
szerint



# Másodlagos kötések 1

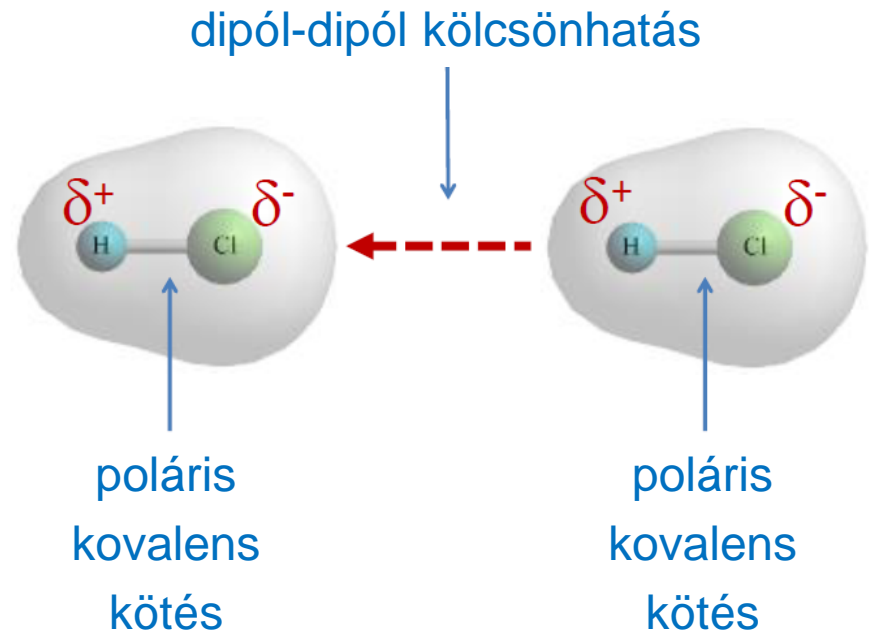
- **Van der Waals:** apoláris atomok között (állandó dipólusmomentum nélkül) ahol egy átmenetileg kialakuló dipólus hat egy apoláris molekulára vagy atomra, melyben polarizációt indukál (**indukált dipólus**)
  - **Van der Waals sugár:**  $r_0 = r_A + r_B$
  - Intermolekuláris vagy intramolekuláris
  - Fontos biológiai funkció: szerves anyagok/szerkezetek kialakítása
  - Gyenge: ( $E_{\text{köt}} \sim 0,02 \text{ eV}$ )



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



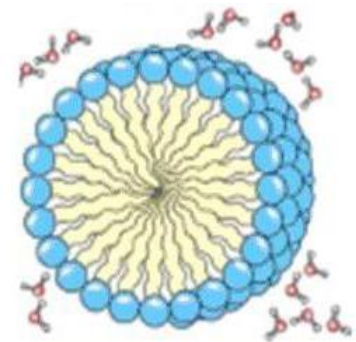
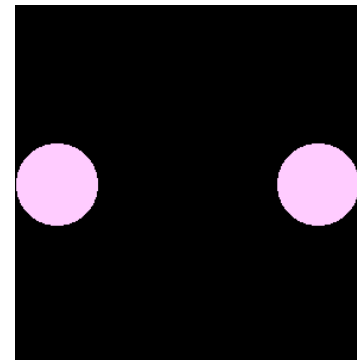
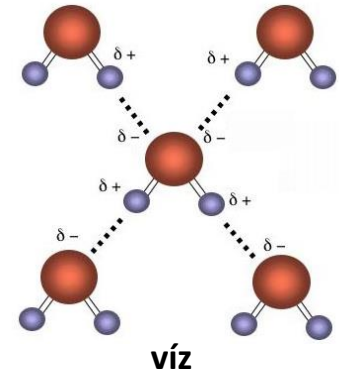
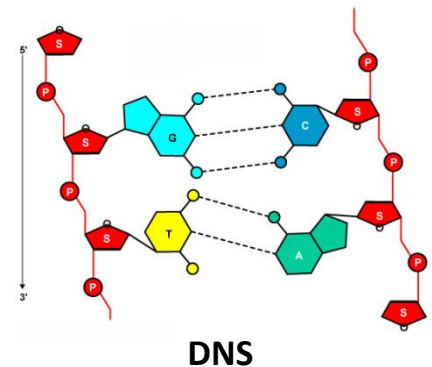
$$E_{\text{vonzó}} = p * E$$

p: dipólusmomentum ( $p=Q*d$ )

E: a környező molekulák által generált elektromos térerősség

# 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)



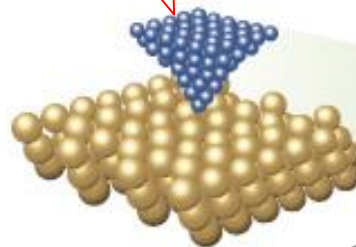
lipidek vizes  
közegben

# Atomi erő mikroszkópia (AFM)

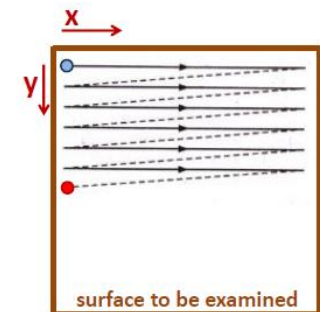
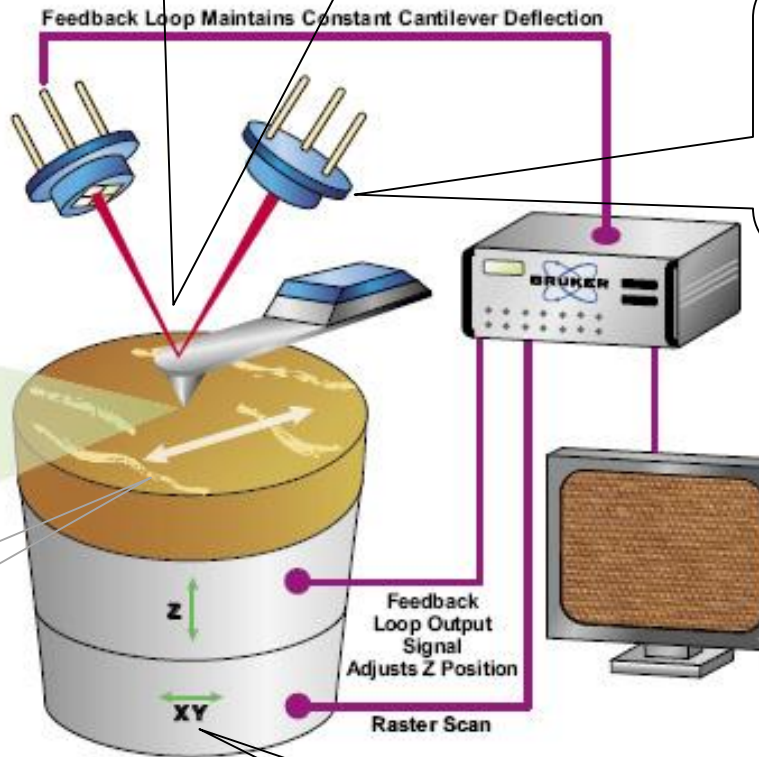
1. Van der Waals kölcsönhatást mérünk egy hegyes tű és a minta atomjai között

2. egy apró laprugó (rugólapka) elhajlik a Van der Waals erők hatására

3. az elhajlást egy pozícióérzékelő fotodiódára vetített lézerral mérjük



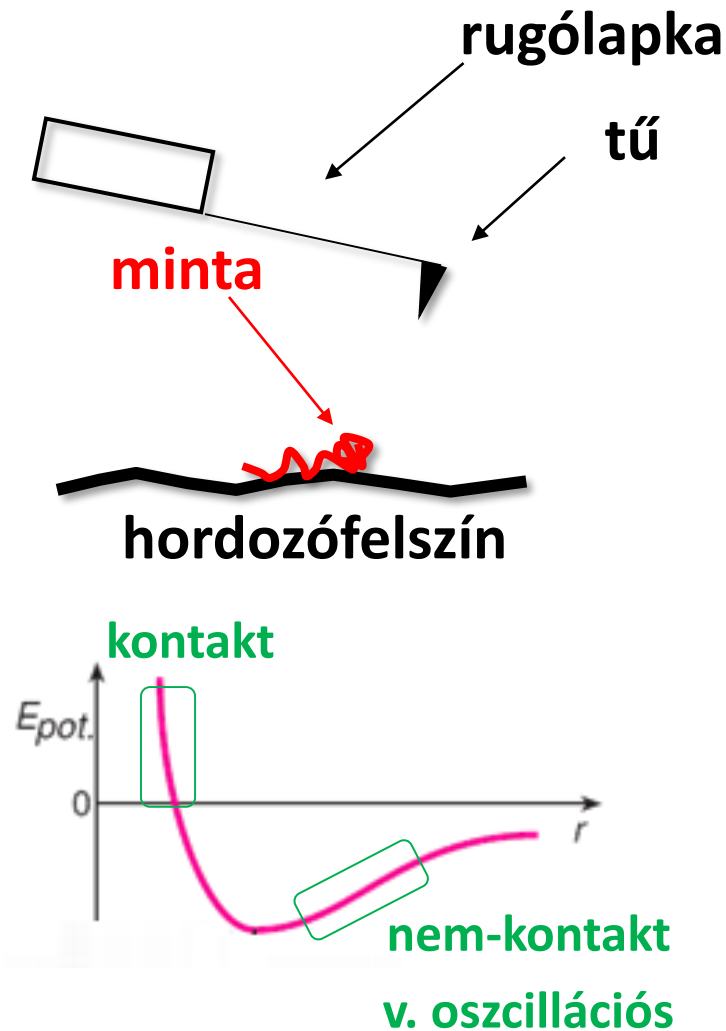
atomi simaságú hordozófelszín (csillám)



4. a mintát (vagy a rugólapkát) X-Y irányokban mozgatva „rácsponatokban” pásztázunk

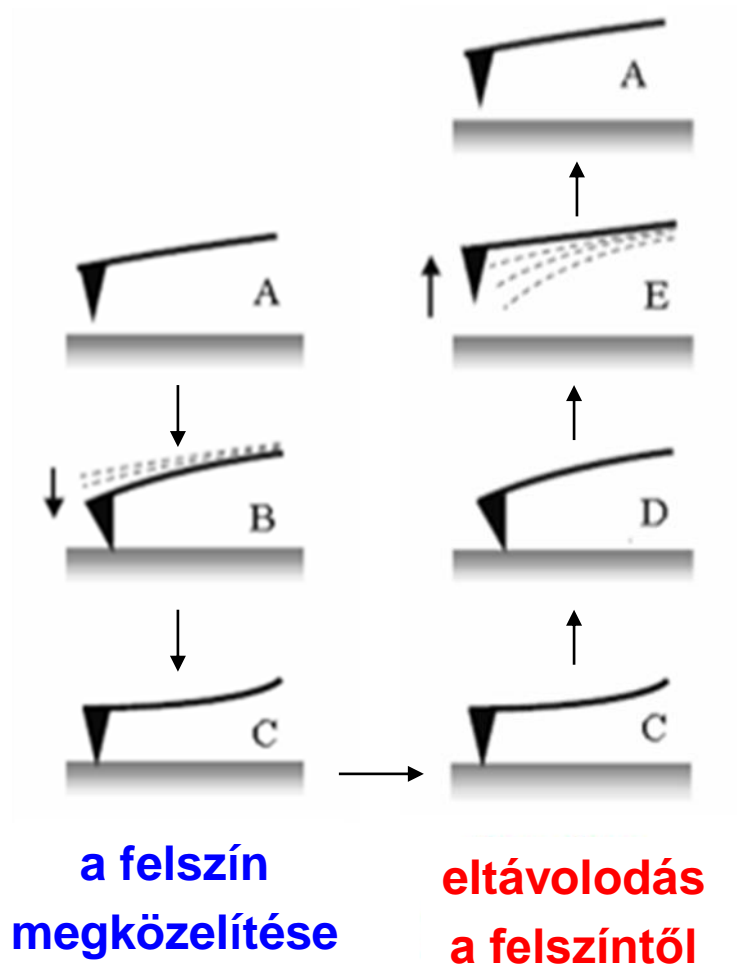
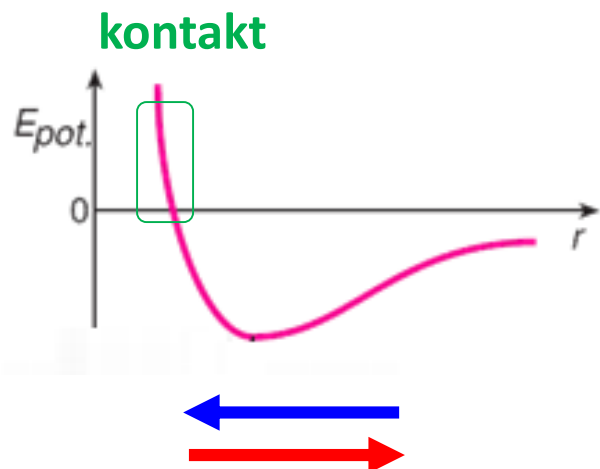
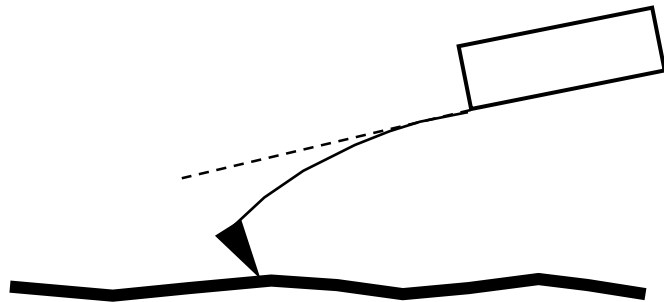


# AFM üzemmódok



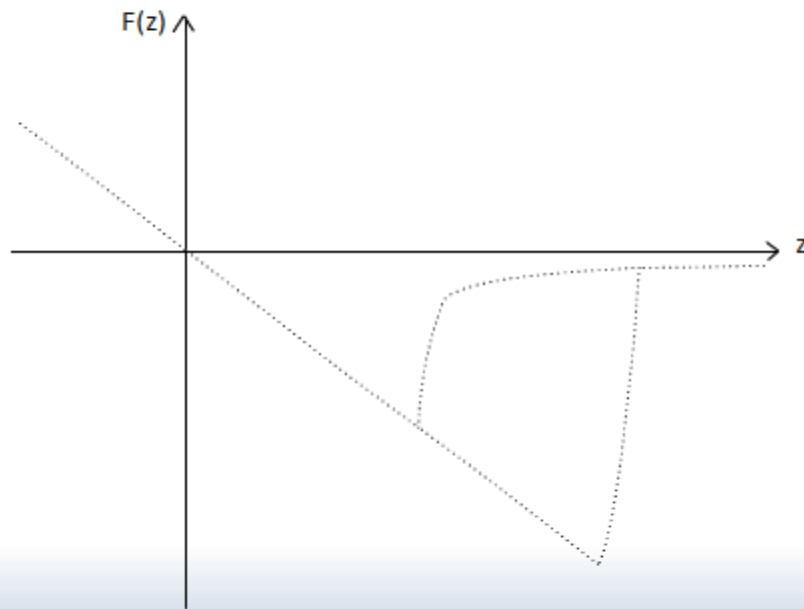
- **Kontakt:** a tű hozzáér a mintához; a **rugólapka elhajlása** a felszín topográfiájára enged következtetni. Leképezéskor az elhajlást **állandó** értéken tartjuk.
  - **Z-feedback:** a rugólapka emelésével / süllyesztésével biztosítja az állandó értékű **elhajlást** (setpointhoz képest).
  - **topográfiai 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**.

# Kontakt üzemmódú AFM



# Kontakt üzemmódú AFM

## Force-displacement curve



This is a force-displacement curve, showing the change in the force acting on the tip as it approaches and withdraws from the surface.

The horizontal axis is the extension of the piezo in the  $z$ -direction.

The  $y$ -axis is the force experienced by the cantilever. Since force is calculated from Hooke's law:  $F = -kx$ , the  $y$ -axis can also be considered as cantilever deflection.

Start 

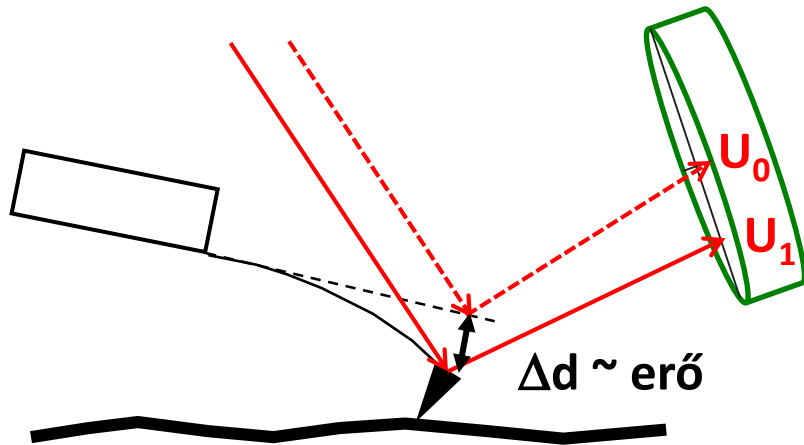


# Kontakt üzemmódú AFM

alkalmas pl. lágy  
biológiai minták  
(sejtek) vizsgálatára

lézer

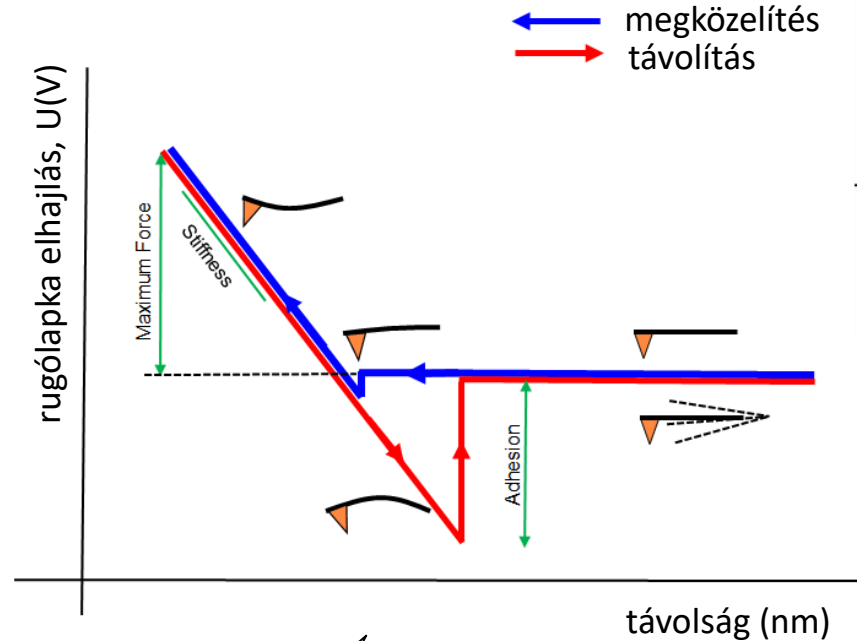
pozícióérzékelő  
fotodióda



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

$\Delta d$ : rugólapka elhajlása

$D$ : rugóállandó

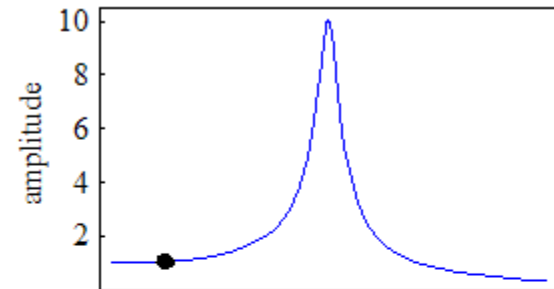
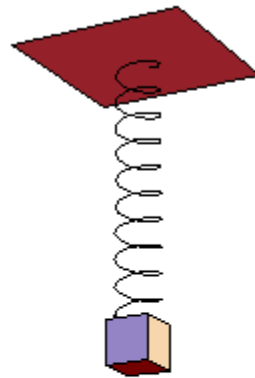


erőmérés /  
rugalmasságmérés  
biológiai mintákon

# Rezonancia

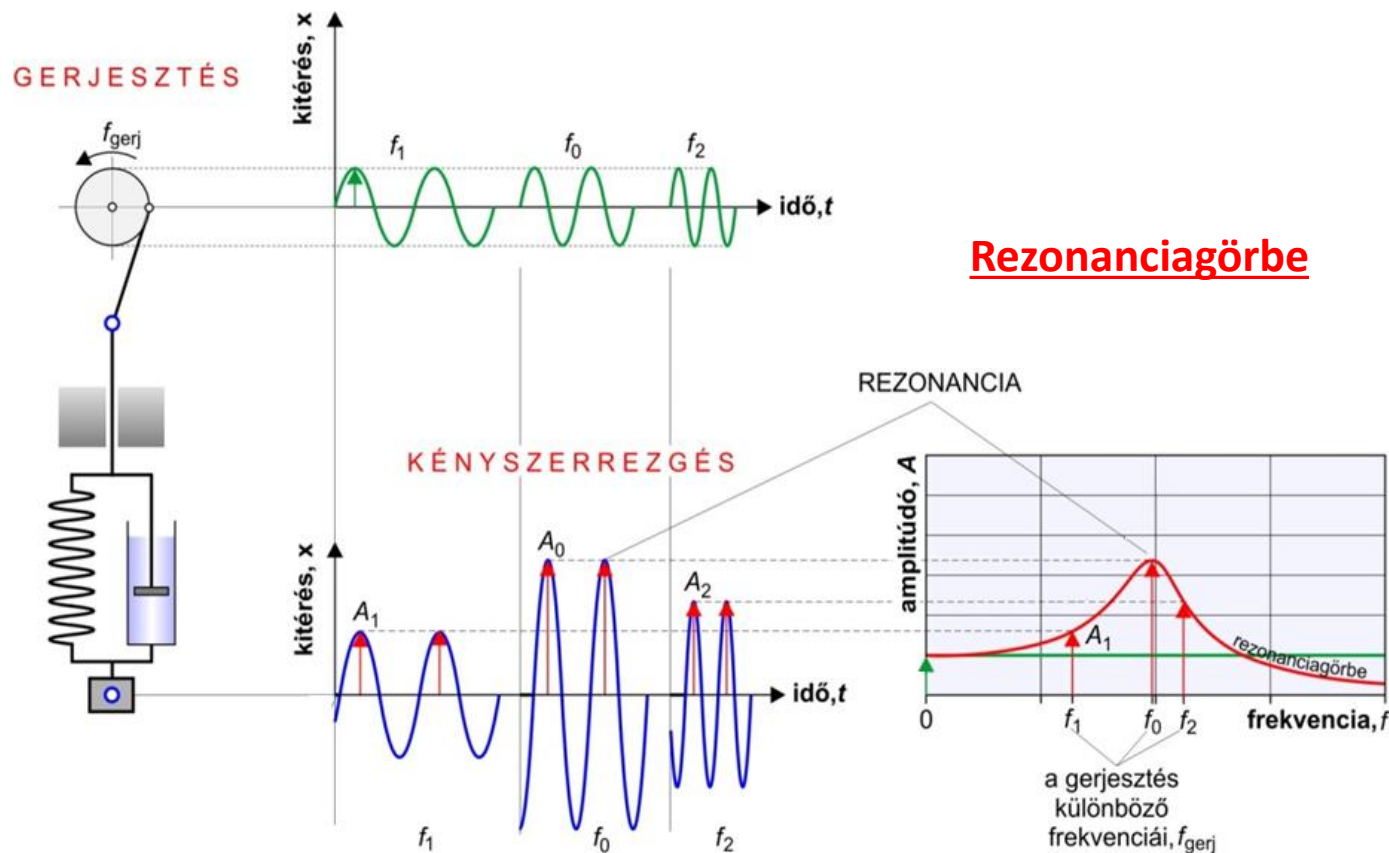
**Rezonancia:** olyan kényszerrezgés, amelynél a külső kényszererő frekvenciája közel esik a rezgőrendszer sajátfrekvenciájához. Ilyenkor igen nagy amplitúdók fordulhatnak elő.

## Kényszerrezgés



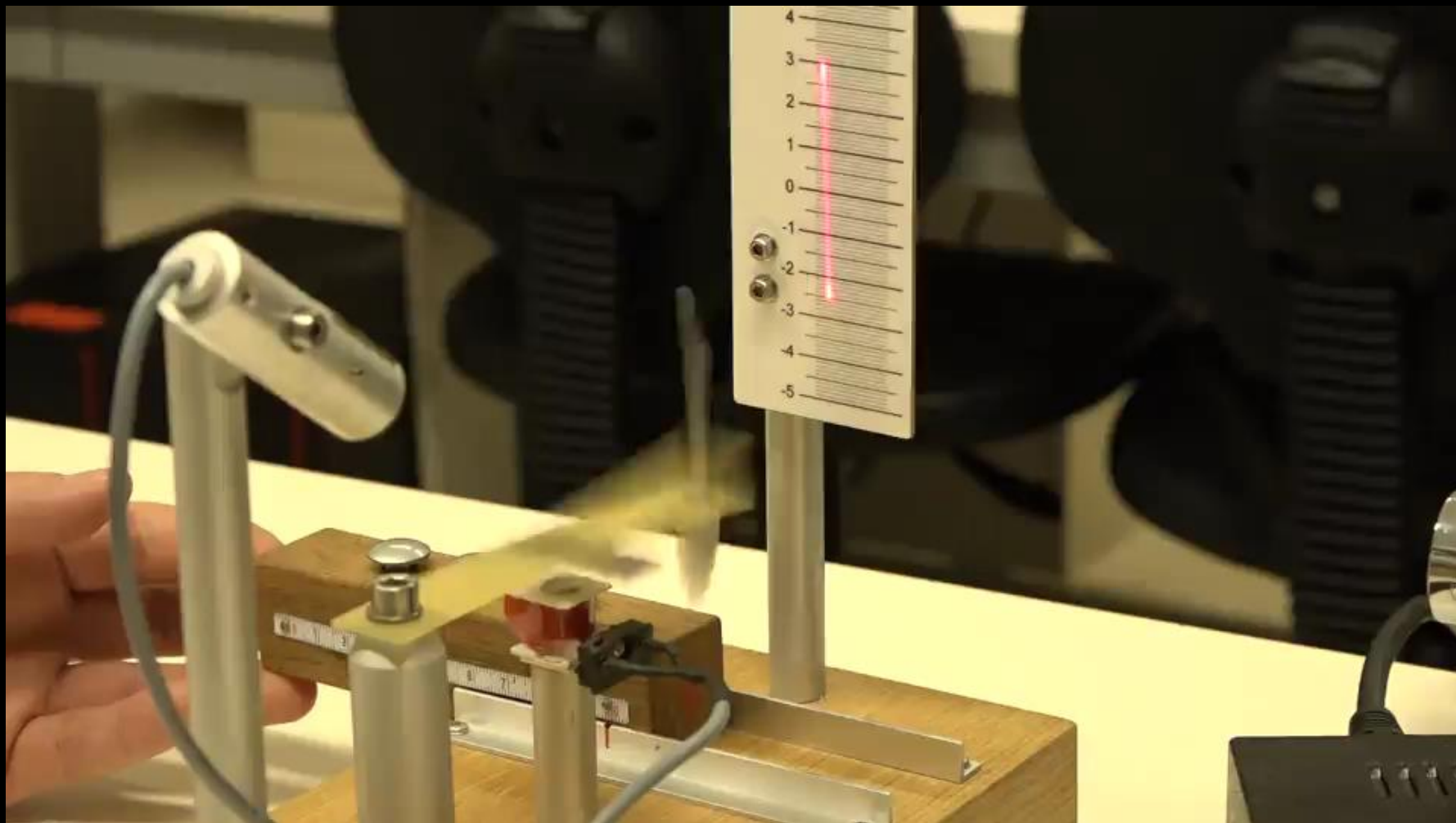
# Nem-kontakt / oszcillációs AFM üzemmód

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



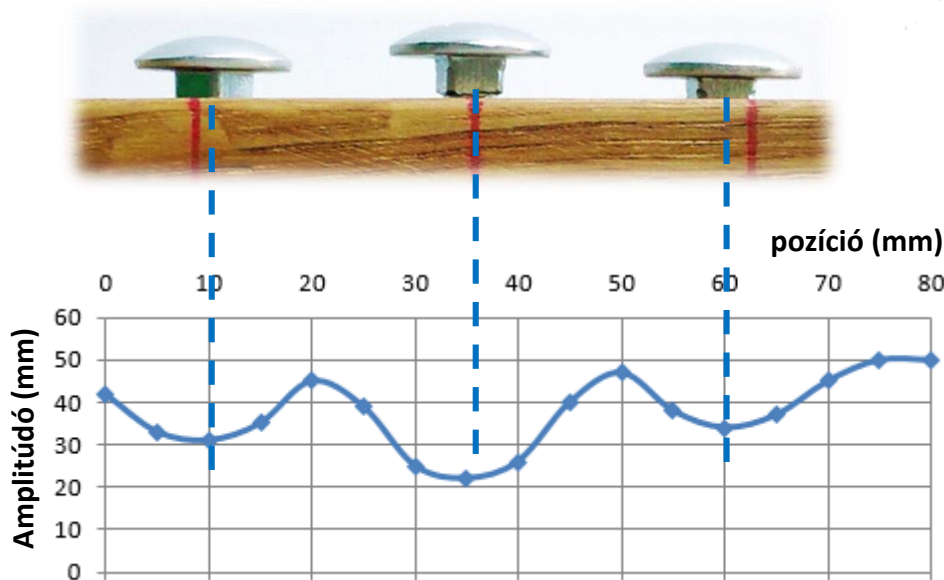
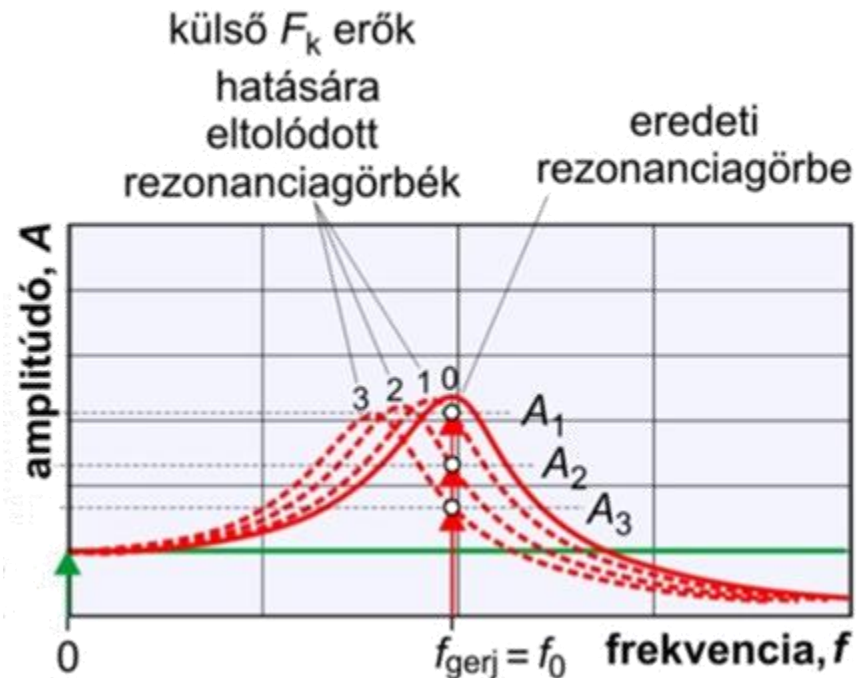
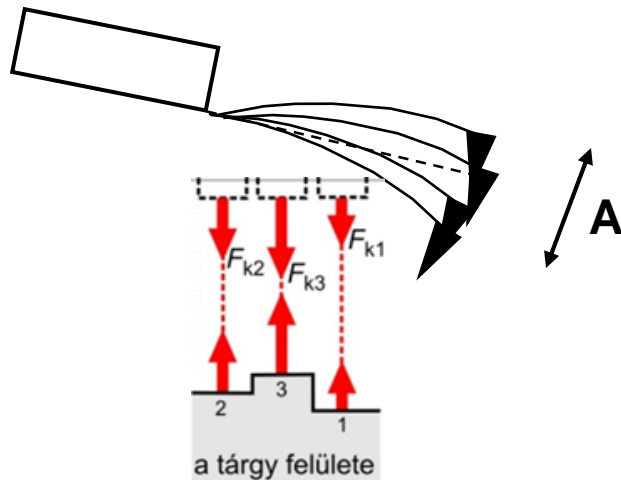


# Nem-kontakt / oszcillációs AFM üzemmód



**Megjegyzés: A Van der Waals erőket mágneses kölcsönhatással modellezzük.**

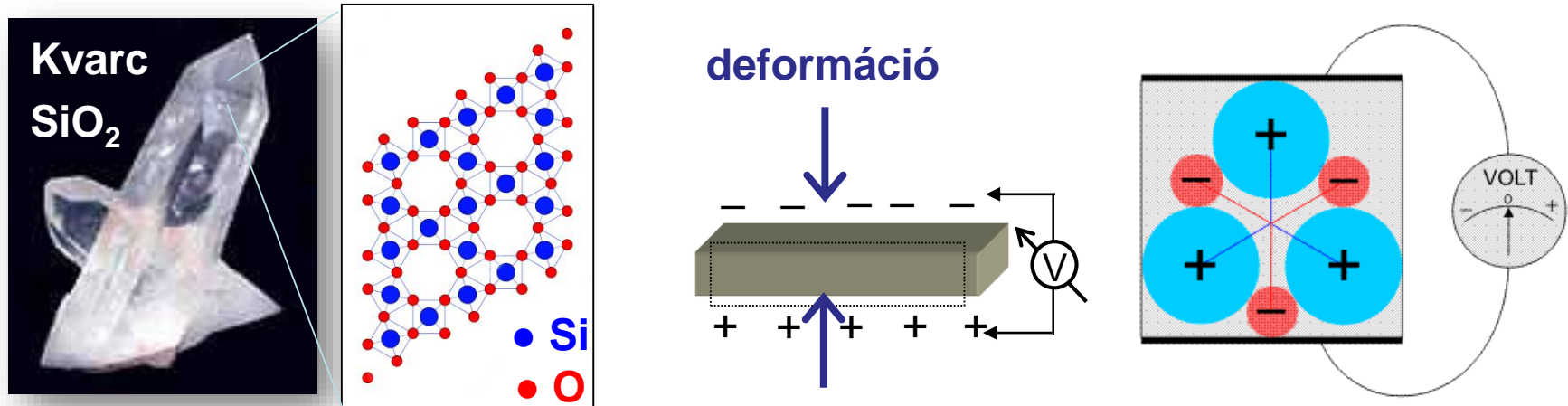
# Nem-kontakt / oszcillációs AFM üzemmód



$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D}{m}} \quad \downarrow$$

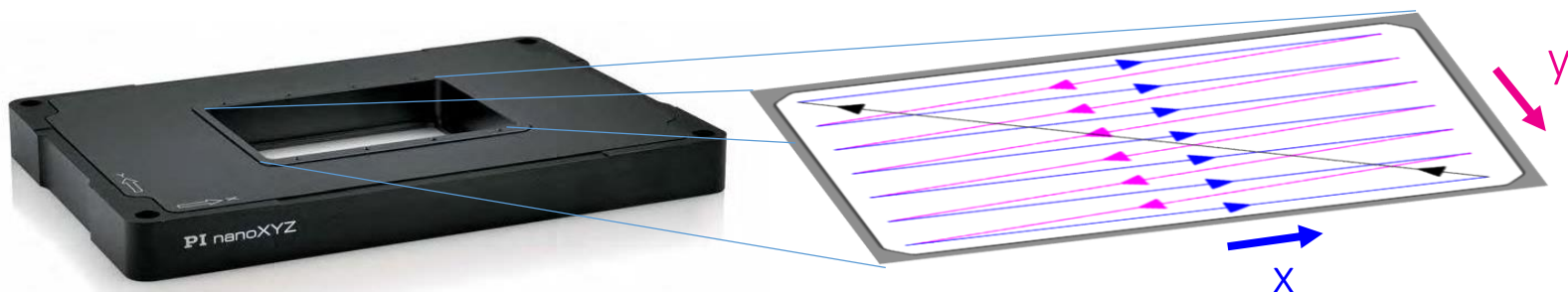
- amplitúdó  $\neq$  tárgymagasság
- **A tárgy magassága** csak **visszacsatolással** mérhető pontosan.

# Pásztázás elve: piezoelektromosság



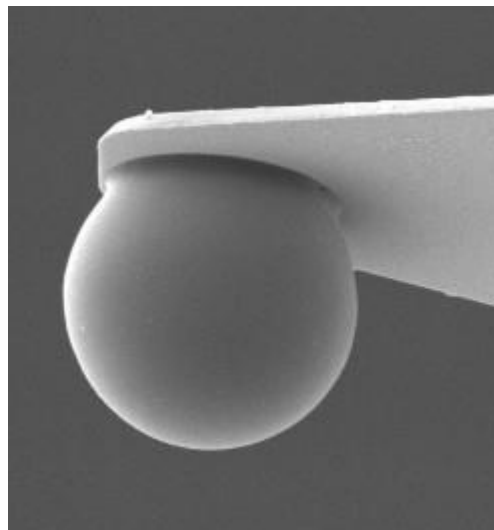
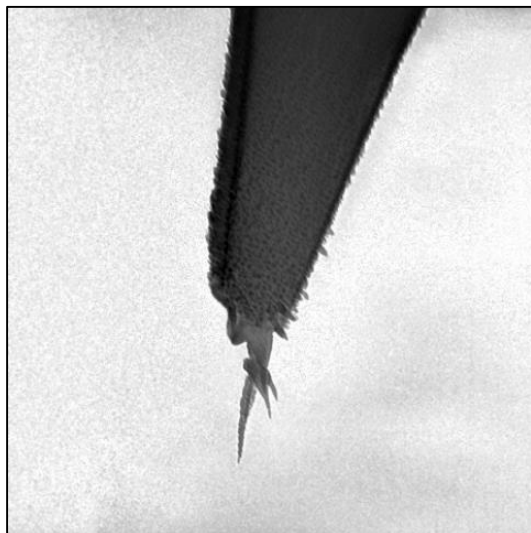
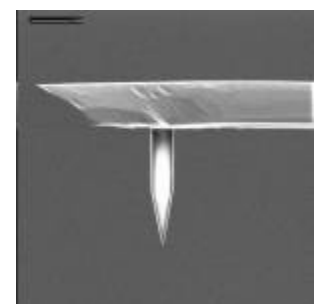
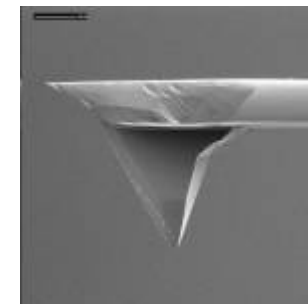
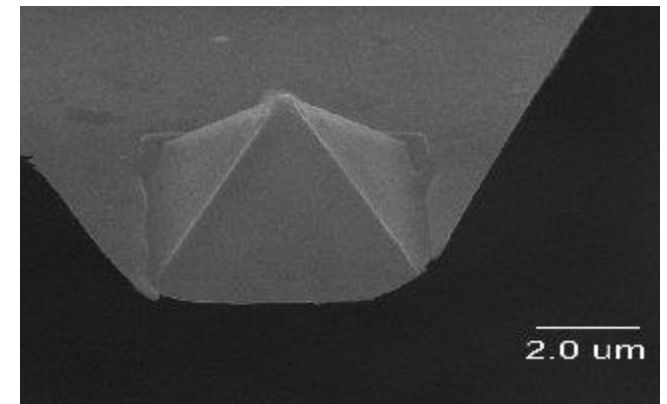
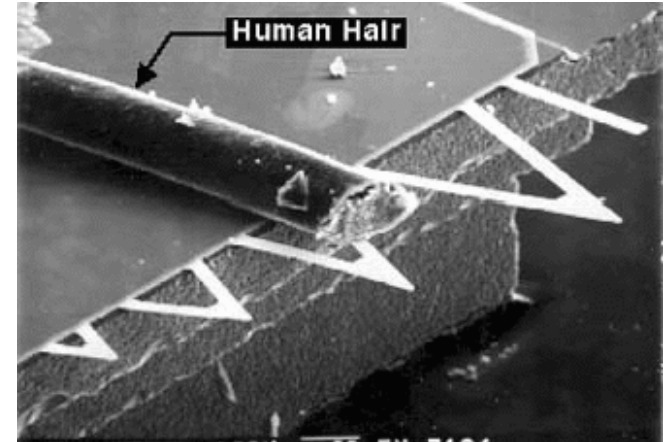
- inverz piezoelektromos hatás: feszültség  $\rightarrow$  deformáció
- X, Y, Z irányú piezo: pl. 150 V  $\rightarrow$  40  $\mu\text{m}$

precíz, akár 0,1 nm-es léptetés



# Rugólapkák

- Anyag: főleg szilícium nitrid ( $\text{Si}_3\text{N}_2$ )
- Tű görbületi sugara: 0,1 nm - 100  $\mu\text{m}$
- Rugóállandó  $\sim 0,1 - 10 \text{ N/m}$
- $f_0 \sim 50 - 500 \text{ kHz}$



# AFM - jellemzők

- **Fő előnyök:**

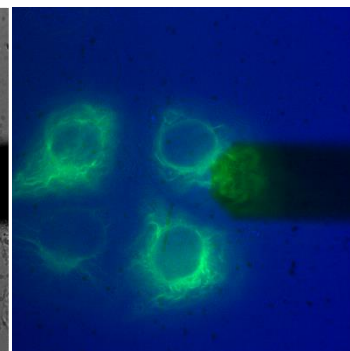
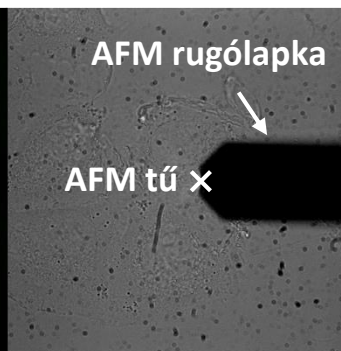
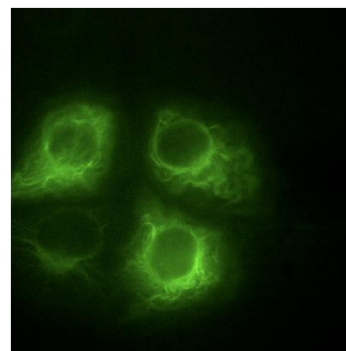
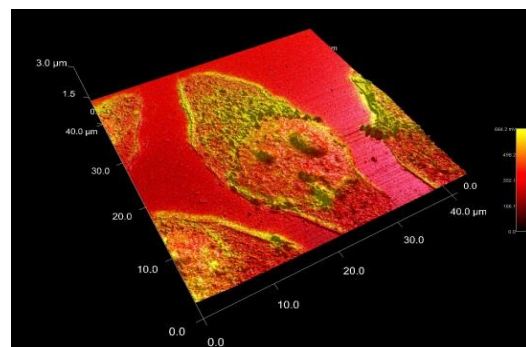
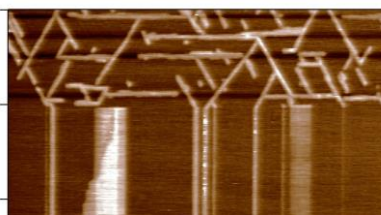
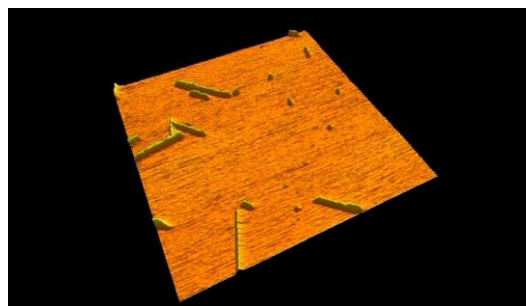
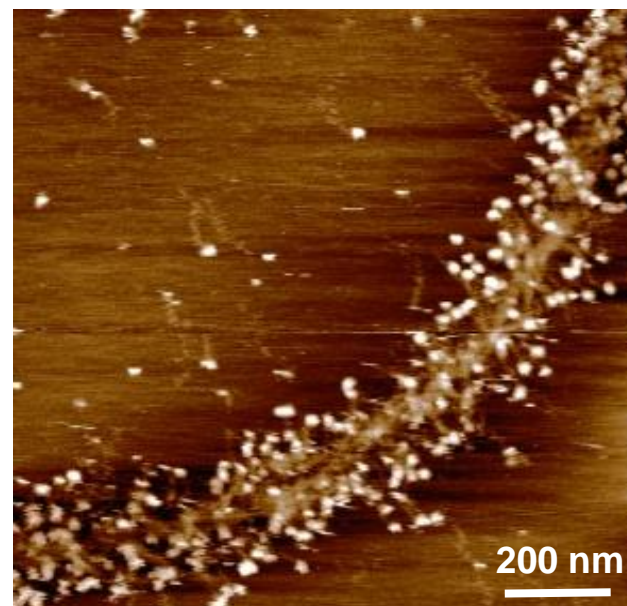
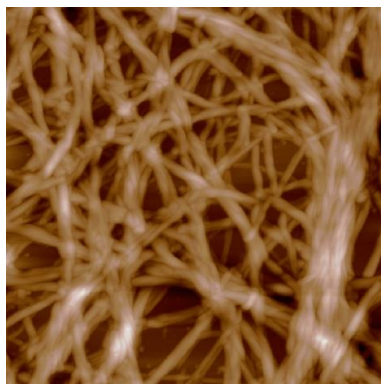
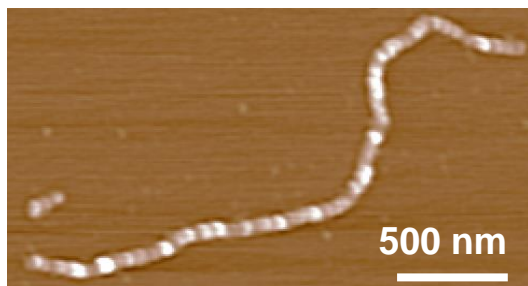
- 3D felszíni topográfia.
- Képkalkotás  $\sim 10$  pm-es függőleges és valamelyest rosszabb oldalirányú felbontással.
- Bármilyen felszín leképezhető (elektromos vezetők, szigetelők, félvezetők).
- Atomszférikus, védőgázos vagy folyadékpufferes közegben is lehetséges a képkalkotás.
- Natív minta is 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).



# Intézetünkben született képek



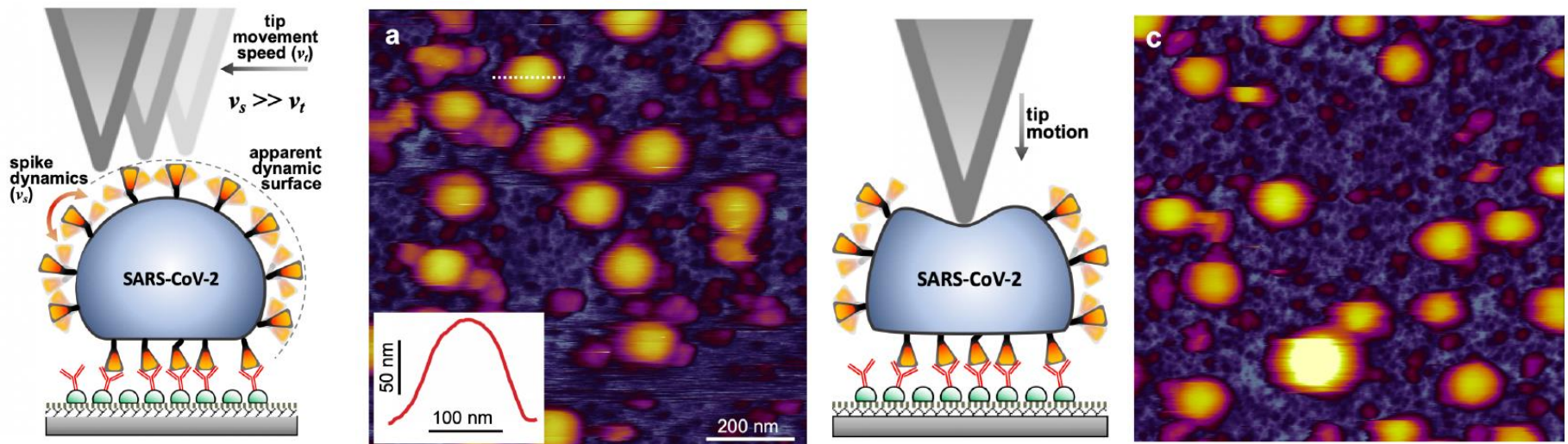


# Natív SARS-CoV-2 vírus AFM-felvétele

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

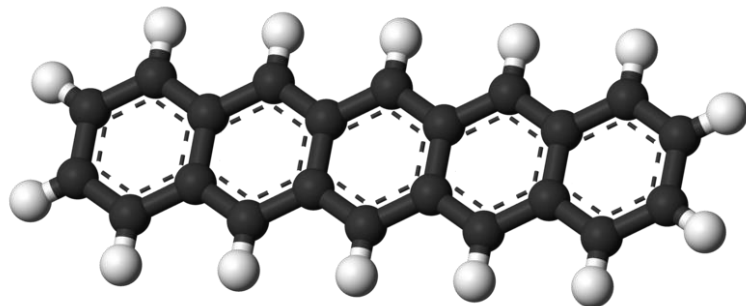
Bálint Kiss<sup>1#</sup>, Zoltán Kis<sup>2,3#</sup>, Bernadett Pályi<sup>2</sup>, Miklós S.Z. Kellermayer<sup>1\*</sup>

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

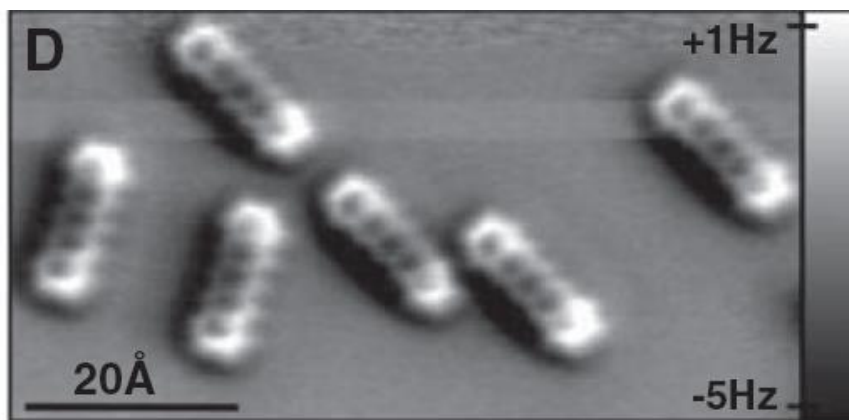
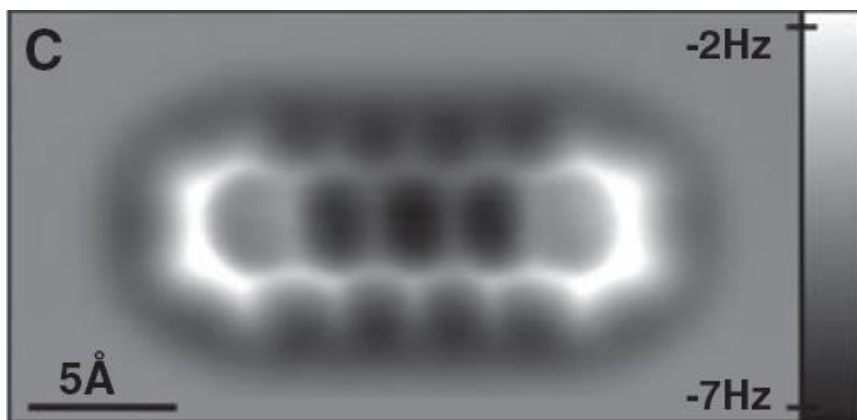


# Pentacén molekula

alagútáram a rugólapkán át (STM)

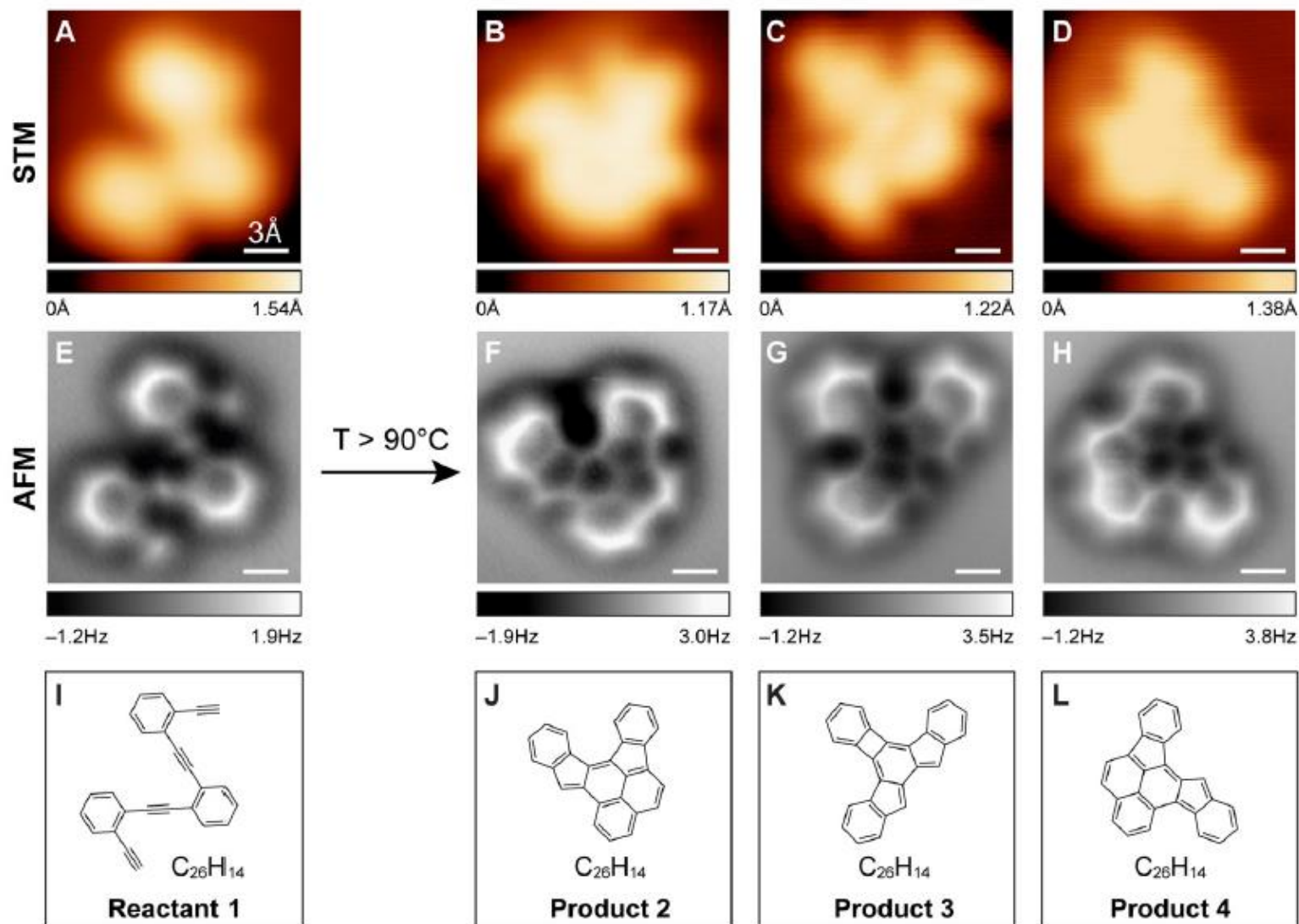


**AFM képek** (a rugólapka „tűhegye” egyetlen CO molekula)



*Nature Chemistry* 1, 597 - 598 (2009)

# Kémiai reakciók leképezése („elektronsűrűség”)



Köszönöm  
a figyelmet!

SCHRÖDINGER'S CAT IS  
**ALIVE**

