

# Biofizika I

## 5. Anyagszerkezet: atomok, molekulák, kristályok

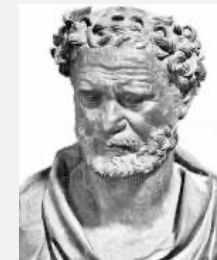
Liliom Károly

2022. 10. 06.

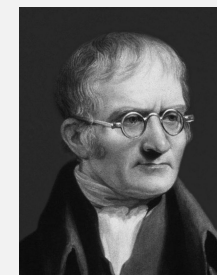
[liliom.karoly@med.semmelweis-univ.hu](mailto:liliom.karoly@med.semmelweis-univ.hu)  
[karoly.liliom.mta@gmail.com](mailto:karoly.liliom.mta@gmail.com)

# Atommodellek fejlődése

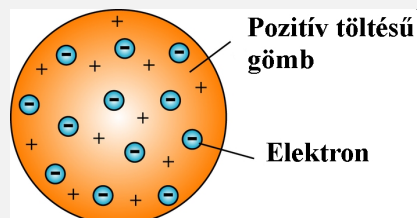
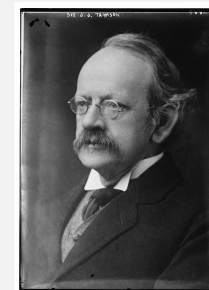
„Csupán hozzánk viszonyítva van édes, keserű, forró és szín, a valóságban csak atomok léteznek és az űr.” Démokritosz i.e. 460-370. Az atomok oszthatatlan örök létezők, súllyal, kiterjedéssel rendelkeznek, alakjukban sokfélék.



Annyiféle atom, ahányféle elem, az atom gömb alakú, egy vegyületben a részt vevő elemek aránya állandó, akármennyi anyagból is keletkeznek. "A new system of chemical philosophy" (John Dalton, 1808)

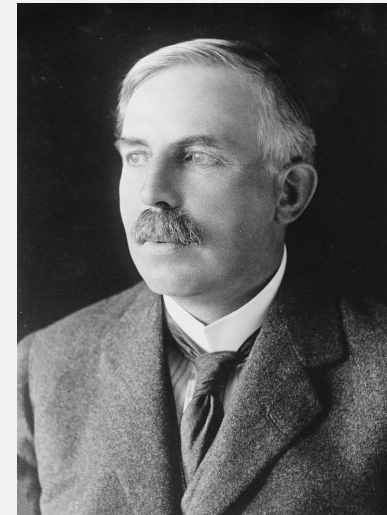
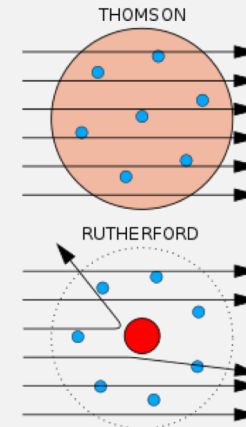
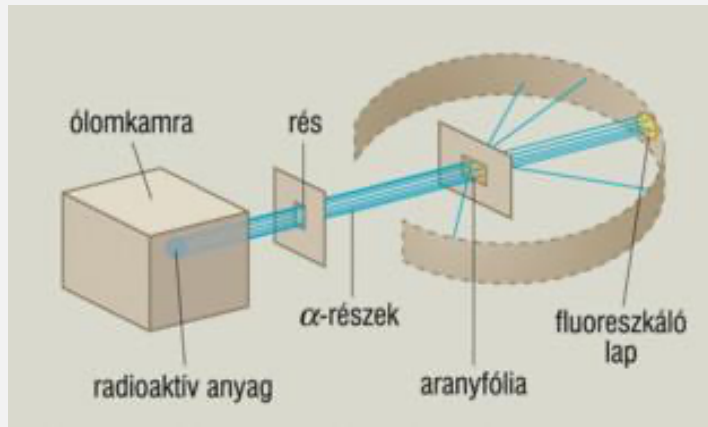


Az elektron felfedezése: Joseph John Thomson (1897, Nobel-díj 1906). Katódsugár: azonos, kis tömegű részecskék, bármely anyagot is használjuk katódként, tehát ez a részecske minden elem atomjának alkotórésze.



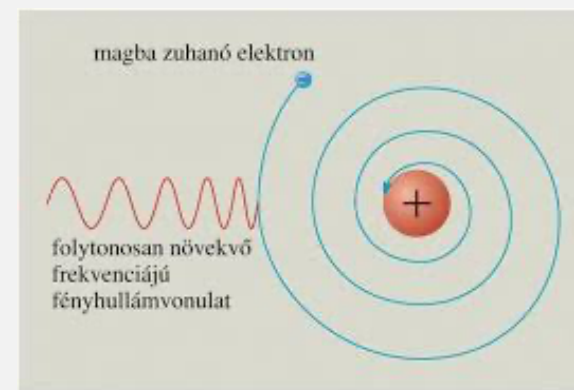
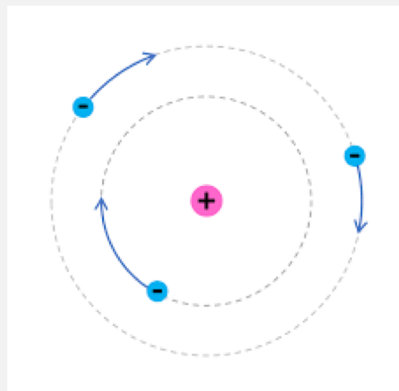
Az atomban egyenletesen oszlik el a tömeg nagyobb, pozitív töltésű része, és abban mozognak a kis tömegű elektronok. Joseph John Thomson "mazsolás-puding modell" (1904)

# Atommodellek fejlődése

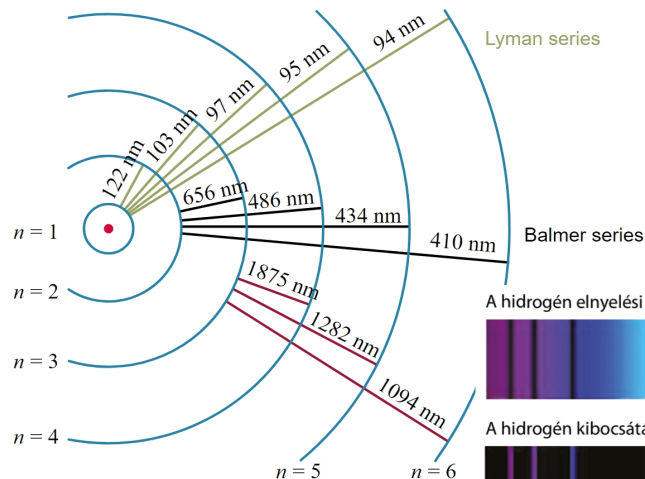
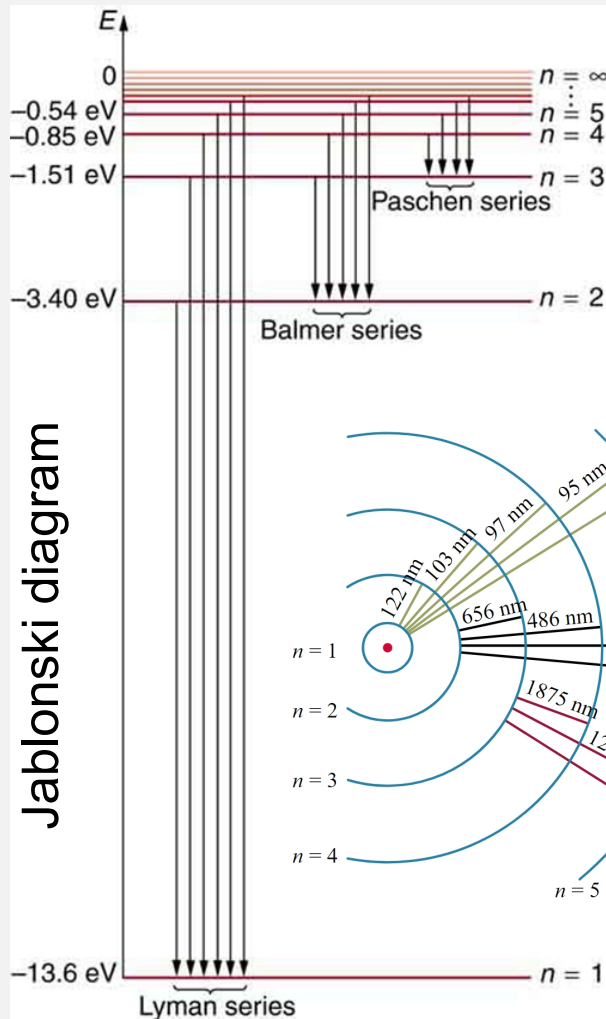


1909-1911:  $\alpha$ -részecskék szóródásának mérése

Ernest Rutherford (1911): Az atom tömegének túlnyomó többsége egy nagyon kis méretű, pozitív töltésű magban található, amely körül az elektronok úgy keringenek, mint a bolygók a nap körül.



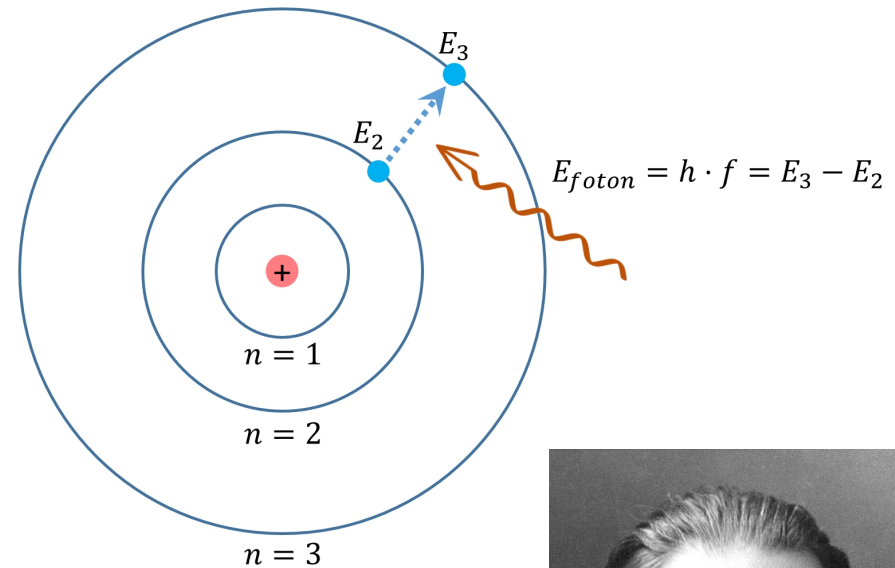
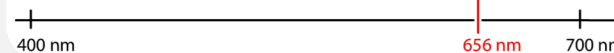
# Atommodellek fejlődése



A hidrogén elnyelési színe:



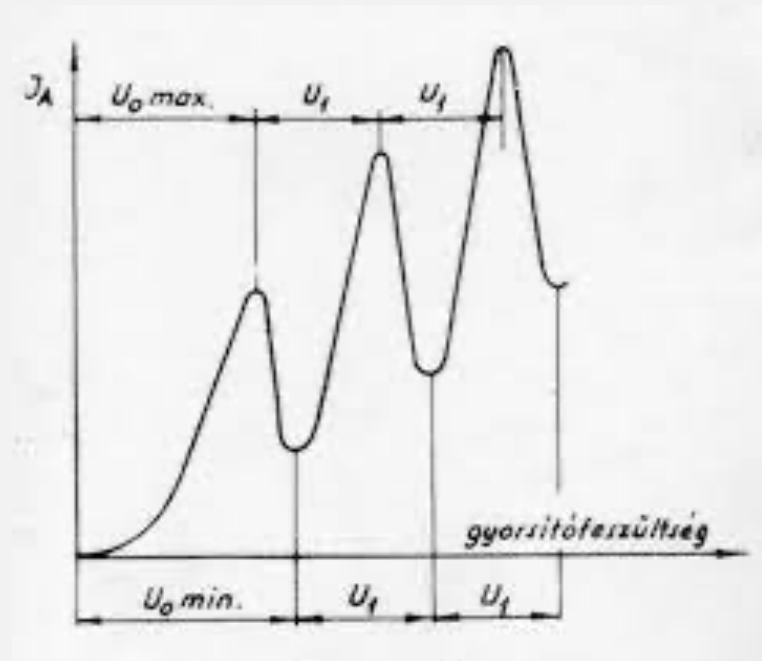
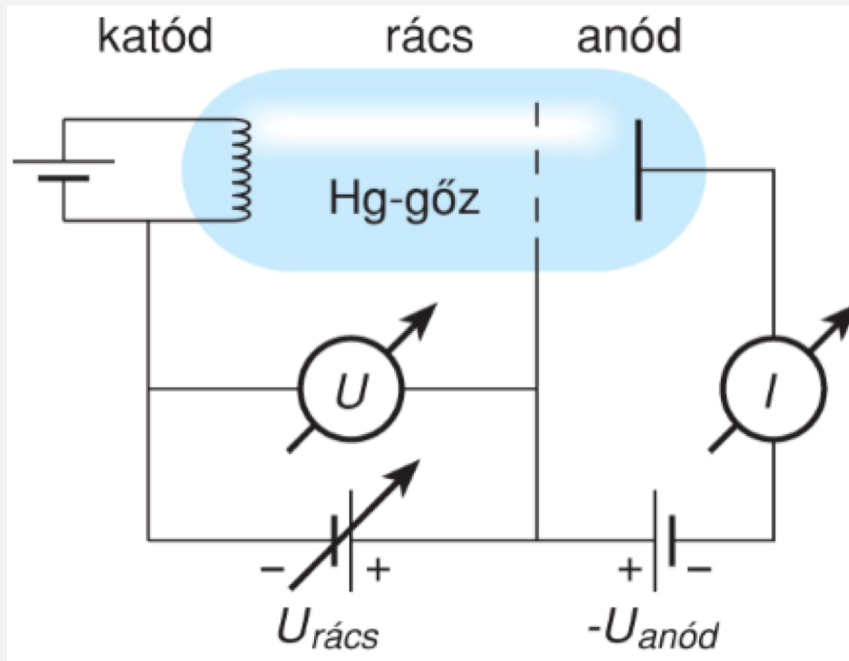
A hidrogén kibocsátási színe:



Niels Bohr (1913): Az atomban az elektronok stacionárius pályákon keringenek, nem sugároznak. A stacionárius pályák közötti átmenetek során az elektron a pályák energiakülönbségét kell felvegye, illetve azt sugározza ki. A stacionárius pályákat az elektron impulzusmomentumának kvantálási szabálya határozza meg.

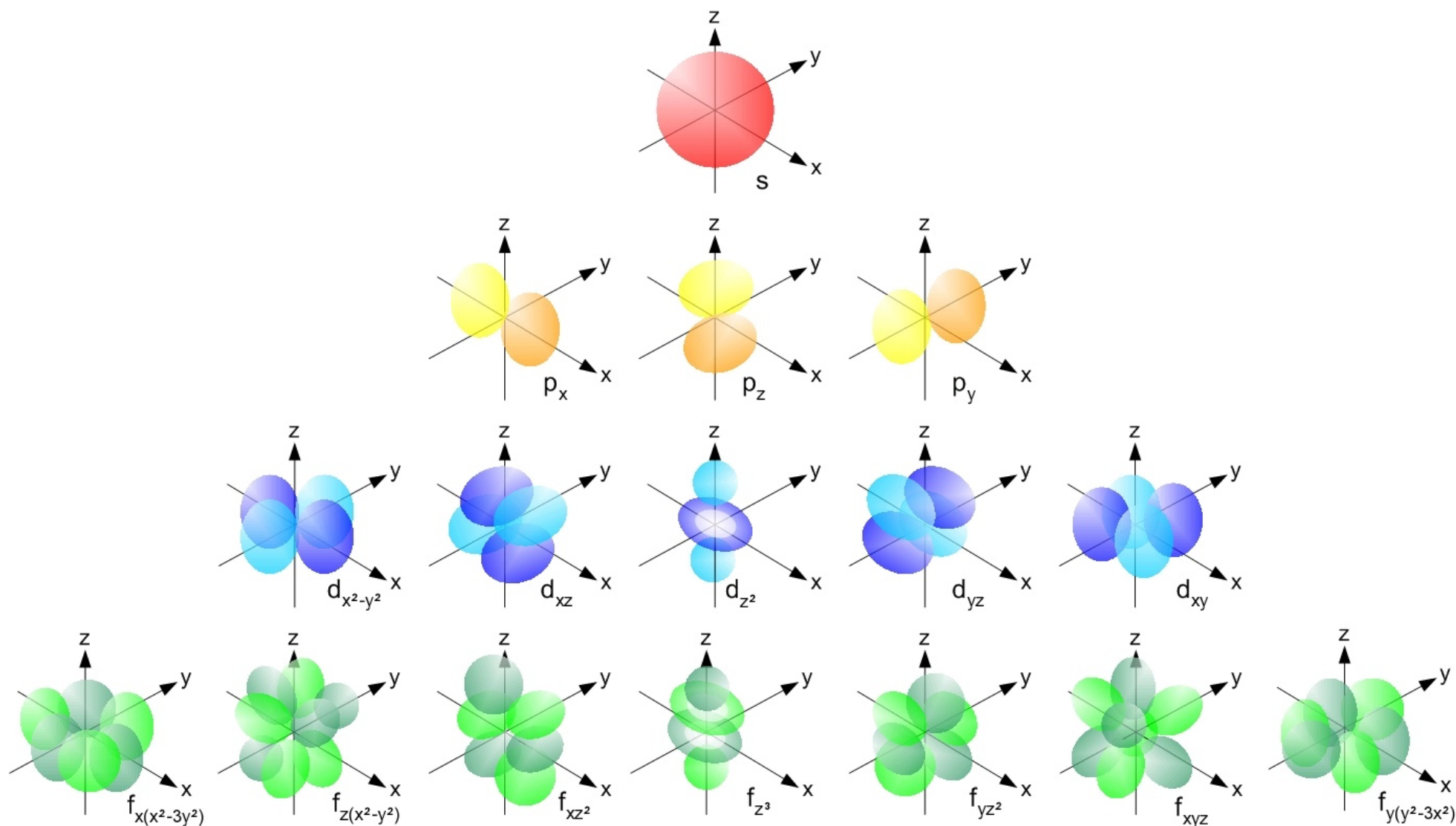


# Franck – Hertz kísérlet (1914)



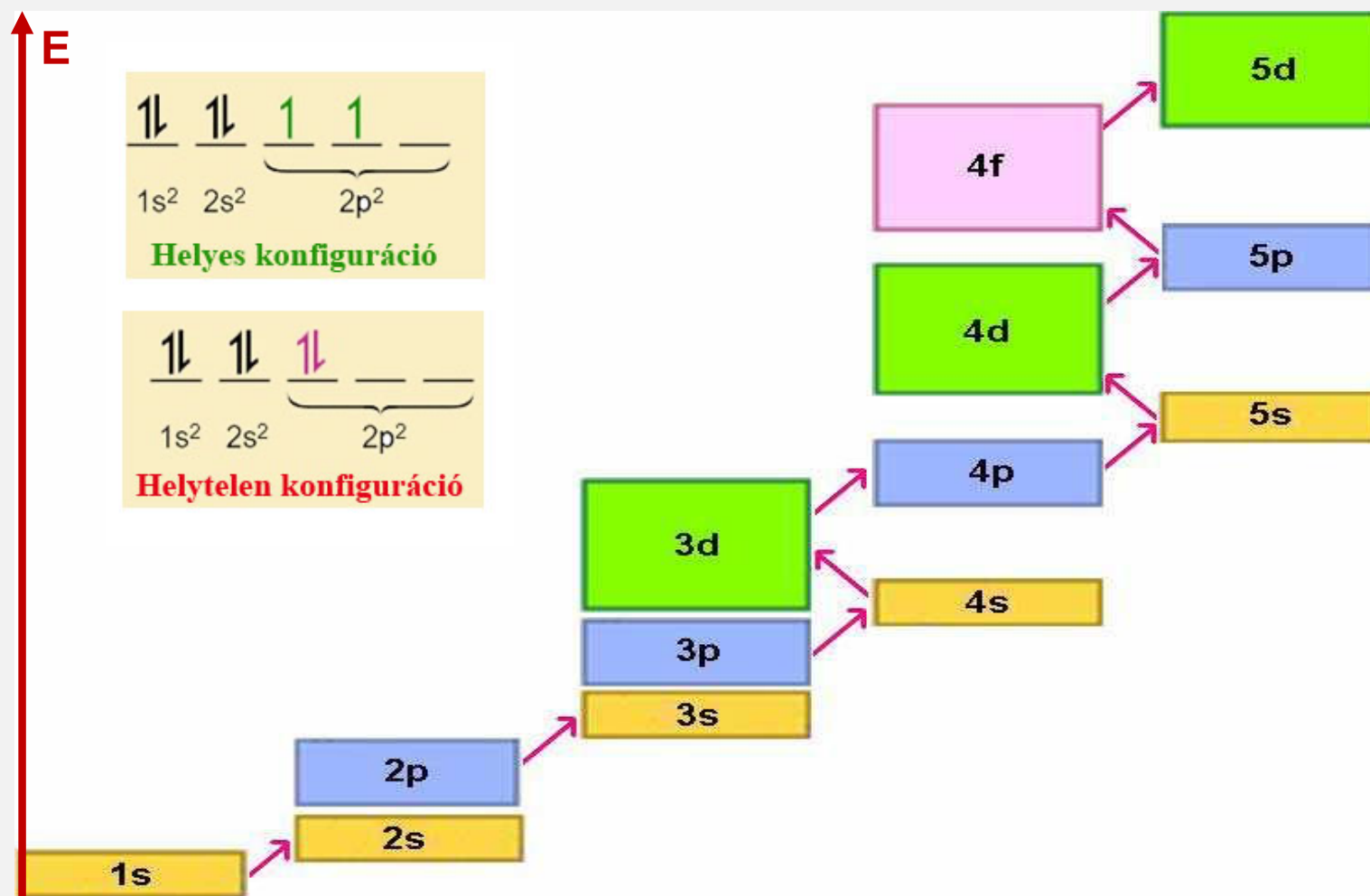
A rácsfeszültség növelésével az elektronok rugalmasan ütköznek a Hg-atomokkal, egészen addig, amíg a rácsfeszültség elegendően nagy értékénél az ütközés rugalmatlan lesz, az elektronok át tudják adni energiájukat a Hg-atomoknak, az energiaveszteség miatt azonban nem érik el az anódot, az anódáram lecsökken. Az atomok energiája nem változhat folytonosan, az atom csak diszkrét energia-kvantumokat képes átvenni az elektronoktól.

# Atommodellek fejlődése



Louis de Broglie: elektronhullám, Ervin Schrödinger: hullámfüggvény-hullámegyenlet  
Térben 4 kvantumszám (fő-, mellék-, mágneses- és spin-kvantumszám)

# Atommodellek fejlődése



**Pauli-elv:** több elektront tartalmazó rendszerben mindegyik elektron más kvantumállapotban van – egy atomon belül nem létezhet két olyan elektron, amelyek mind a négy kvantumszáma megegyezik. **Hund-szabály:** adott elektron-konfiguráció mellett a legnagyobb eredő spin-értékű állapotnak van a legalacsonyabb energiája.

# Az elemek periódusos rendszere

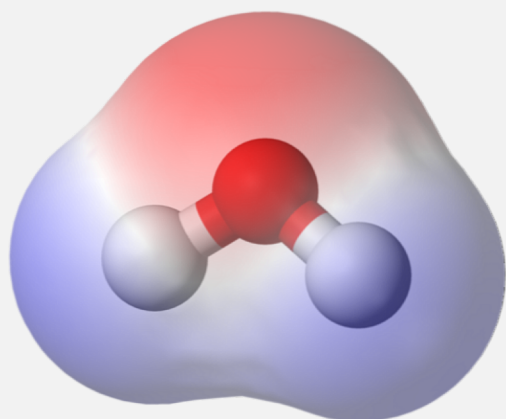
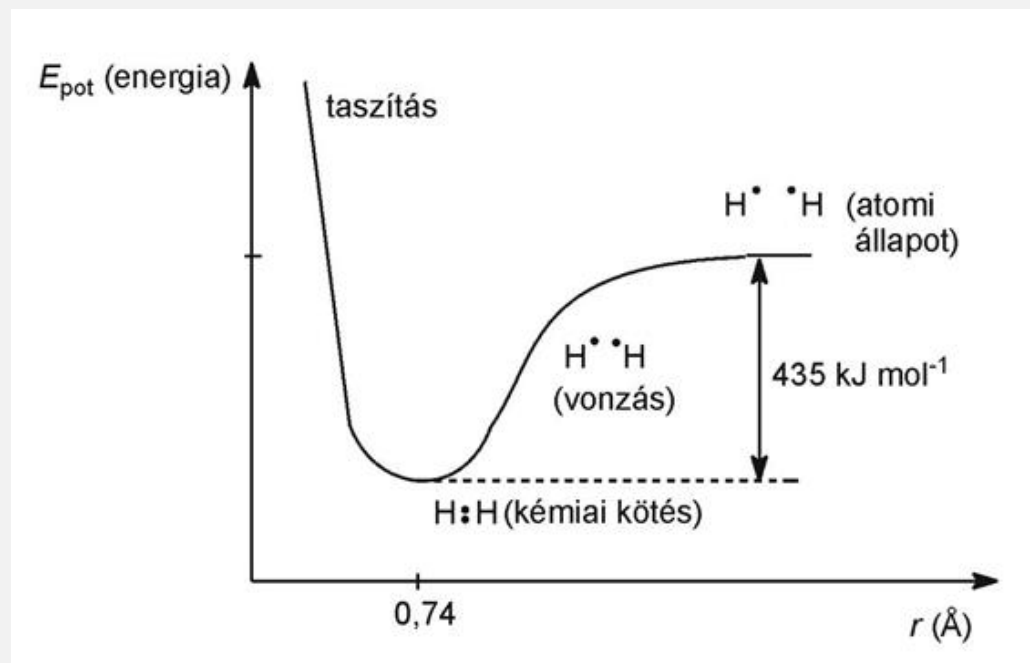
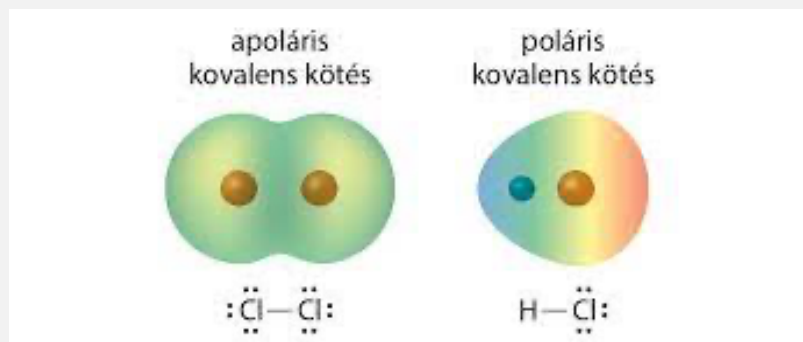
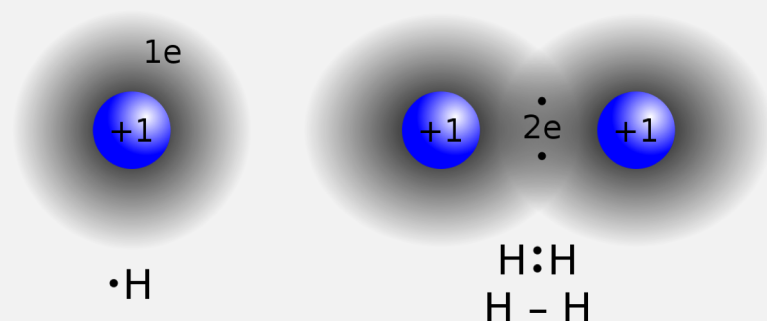
PERIÓDUS CSOPORT	s-elemek I II		AZ ELEMÉK PERIÓDUSOS RENDSZERE																III	IV	p-elemek V VI		VII	0									
K	1	<div>1,01</div> <div><b>H</b></div> <div>1 Hidrogén</div>	<div>relativ atomtömeg — 26,98</div> <div>vegyjel — <div><div><b>Al</b></div><div>3 8 2</div></div></div> <div>rendszám — 13 — az elektronok eloszlása az energiaszinteken</div> <div>Alumínium</div>																														<div>4,00</div> <div><b>He</b></div> <div>2 Hélium</div>
L	2	<div>6,94</div> <div><b>Li</b></div> <div>3 Lítium</div>	<div>9,01</div> <div><b>Be</b></div> <div>4 2 Berillium</div>																	<div>10,81</div> <div><b>B</b></div> <div>5 2 Bór</div>	<div>12,01</div> <div><b>C</b></div> <div>6 2 Szén</div>	<div>14,01</div> <div><b>N</b></div> <div>7 2 Nitrogén</div>	<div>16,00</div> <div><b>O</b></div> <div>8 2 Oxigén</div>	<div>19,00</div> <div><b>F</b></div> <div>9 2 Fluor</div>	<div>20,18</div> <div><b>Ne</b></div> <div>10 2 Neon</div>								
M	3	<div>22,99</div> <div><b>Na</b></div> <div>11 2 Nátrium</div>	<div>24,31</div> <div><b>Mg</b></div> <div>12 2 Magnézium</div>																	<div>26,98</div> <div><b>Al</b></div> <div>13 3 Alumínium</div>	<div>28,09</div> <div><b>Si</b></div> <div>14 2 Szilícium</div>	<div>30,97</div> <div><b>P</b></div> <div>15 3 Foszfor</div>	<div>32,07</div> <div><b>S</b></div> <div>16 2 Kén</div>	<div>35,45</div> <div><b>Cl</b></div> <div>17 2 Klór</div>	<div>39,95</div> <div><b>Ar</b></div> <div>18 2 Argon</div>								
				d-elemek																													
				III	IV	V	VI	VII	VIII	VIII	VIII	I	II																				
N	4	<div>39,10</div> <div><b>K</b></div> <div>19 2 Kálium</div>	<div>40,08</div> <div><b>Ca</b></div> <div>20 2 Kalcium</div>	<div>44,96</div> <div><b>Sc</b></div> <div>21 2 Szkandium</div>	<div>47,90</div> <div><b>Ti</b></div> <div>22 2 Titán</div>	<div>50,94</div> <div><b>V</b></div> <div>23 2 Vanádium</div>	<div>52,00</div> <div><b>Cr</b></div> <div>24 2 Króm</div>	<div>54,94</div> <div><b>Mn</b></div> <div>25 2 Mangán</div>	<div>55,85</div> <div><b>Fe</b></div> <div>26 2 Vas</div>	<div>58,93</div> <div><b>Co</b></div> <div>27 2 Kobalt</div>	<div>58,71</div> <div><b>Ni</b></div> <div>28 2 Nikkel</div>	<div>63,55</div> <div><b>Cu</b></div> <div>29 2 Réz</div>	<div>65,39</div> <div><b>Zn</b></div> <div>30 2 Cink</div>	<div>69,72</div> <div><b>Ga</b></div> <div>31 2 Gallium</div>	<div>72,59</div> <div><b>Ge</b></div> <div>32 2 Germánium</div>	<div>74,92</div> <div><b>As</b></div> <div>33 2 Arzén</div>	<div>78,96</div> <div><b>Se</b></div> <div>34 2 Szelén</div>	<div>79,90</div> <div><b>Br</b></div> <div>35 2 Brom</div>	<div>83,80</div> <div><b>Kr</b></div> <div>36 2 Kripton</div>														
O	5	<div>85,47</div> <div><b>Rb</b></div> <div>37 2 Rubídium</div>	<div>87,62</div> <div><b>Sr</b></div> <div>38 2 Stroncium</div>	<div>88,91</div> <div><b>Y</b></div> <div>39 2 Ittrium</div>	<div>91,22</div> <div><b>Zr</b></div> <div>40 2 Cirkónium</div>	<div>92,91</div> <div><b>Nb</b></div> <div>41 2 Niobium</div>	<div>95,94</div> <div><b>Mo</b></div> <div>42 2 Molibdén</div>	<div>98,91</div> <div><b>Tc</b></div> <div>43 2 Technécium</div>	<div>101,07</div> <div><b>Ru</b></div> <div>44 2 Ruténium</div>	<div>102,91</div> <div><b>Rh</b></div> <div>45 2 Ródium</div>	<div>106,4</div> <div><b>Pd</b></div> <div>46 2 Palládium</div>	<div>107,87</div> <div><b>Ag</b></div> <div>47 2 Ezüst</div>	<div>112,41</div> <div><b>Cd</b></div> <div>48 2 Kadmium</div>	<div>114,82</div> <div><b>In</b></div> <div>49 2 Indium</div>	<div>118,71</div> <div><b>Sn</b></div> <div>50 2 Ón</div>	<div>121,75</div> <div><b>Sb</b></div> <div>51 2 Antimon</div>	<div>127,60</div> <div><b>Te</b></div> <div>52 2 Tellúr</div>	<div>126,90</div> <div><b>I</b></div> <div>53 2 Jód</div>	<div>131,30</div> <div><b>Xe</b></div> <div>54 2 Xenon</div>														
P	6	<div>132,91</div> <div><b>Cs</b></div> <div>55 2 Cézium</div>	<div>137,33</div> <div><b>Ba</b></div> <div>56 2 Bárium</div>	<div>57-71</div>	<div>178,49</div> <div><b>Hf</b></div> <div>72 2 Háfnium</div>	<div>180,95</div> <div><b>Ta</b></div> <div>73 2 Tantál</div>	<div>183,85</div> <div><b>W</b></div> <div>74 2 Volfrám</div>	<div>186,21</div> <div><b>Re</b></div> <div>75 2 Rénium</div>	<div>190,2</div> <div><b>Os</b></div> <div>76 2 Ozmium</div>	<div>192,22</div> <div><b>Ir</b></div> <div>77 2 Iridium</div>	<div>195,09</div> <div><b>Pt</b></div> <div>78 2 Platina</div>	<div>196,97</div> <div><b>Au</b></div> <div>79 2 Arany</div>	<div>200,59</div> <div><b>Hg</b></div> <div>80 2 Higany</div>	<div>204,37</div> <div><b>Tl</b></div> <div>81 2 Tallium</div>	<div>207,2</div> <div><b>Pb</b></div> <div>82 2 Ólom</div>	<div>208,98</div> <div><b>Bi</b></div> <div>83 2 Bizmut</div>	<div>209</div> <div><b>Po</b></div> <div>84 2 Polónium</div>	<div>210</div> <div><b>At</b></div> <div>85 2 Asztácium</div>	<div>222</div> <div><b>Rn</b></div> <div>86 2 Radon</div>														
Q	7	<div>223</div> <div><b>Fr</b></div> <div>87 2 Francium</div>	<div>226,03</div> <div><b>Ra</b></div> <div>88 2 Rádium</div>	<div>89-103</div>	<div>261</div> <div><b>Rf</b></div> <div>104 2 Raterfordium</div>	<div>262</div> <div><b>Ha</b></div> <div>105 2 Hanium</div>	<div>263</div> <div><b>Unh</b></div> <div>106 2 Unnilhexium</div>	<div>262</div> <div><b>Uns</b></div> <div>107 2 Unnilseptium</div>	<div>265</div> <div><b>Uno</b></div> <div>108 2 Unniloctium</div>	<div>266</div> <div><b>Une</b></div> <div>109 2 Unnilennium</div>																							
<div>*Az elemek ideiglenes elnevezése</div> <div>– 104 Rf–Ratherfordium – 104 Ku–Kurtschatovium</div> <div>– 105 Ha–Hanium – 105 Ns–Nielsbohrium</div>																																	

f-elemek															
LANTANOIDÁK	138,91	140,12	140,91	144,24	145	150,4	151,96	157,25	158,93	162,50	164,93	167,26	168,93	173,04	174,97
	<b>La</b> 57 Lantán	<b>Ce</b> 58 Cérium	<b>Pr</b> 59 Praezodimium	<b>Nd</b> 60 Neodimium	<b>Pm</b> 61 Promethium	<b>Sm</b> 62 Szamárium	<b>Eu</b> 63 Europium	<b>Gd</b> 64 Gadolínium	<b>Tb</b> 65 Terbium	<b>Dy</b> 66 Diszprózium	<b>Ho</b> 67 Holmium	<b>Er</b> 68 Erbium	<b>Tm</b> 69 Túlium	<b>Yb</b> 70 Íterbium	<b>Lu</b> 71 Lutécium
AKTINOIDÁK	227,03	232,04	231,04	238,03	237,05	244	243	247	247	251	254	257	258	259	260
	<b>Ac</b> 89 Aktínium	<b>Th</b> 90 Tórium	<b>Pa</b> 91 Protaktínium	<b>U</b> 92 Urán	<b>Np</b> 93 Neptúnium	<b>Pu</b> 94 Plutónium	<b>Am</b> 95 Americium	<b>Cm</b> 96 Kúrium	<b>Bk</b> 97 Berkélium	<b>Cf</b> 98 Kalifornium	<b>Es</b> 99 Einsteinium	<b>Fm</b> 100 Fermium	<b>Md</b> 101 Mendeléviium	<b>No</b> 102 Nobélium	<b>Lr</b> 103 Laurencium

Vegyértékelektronok: a legnagyobb főkvantumszámú héj s és p állapotú elektronjai.

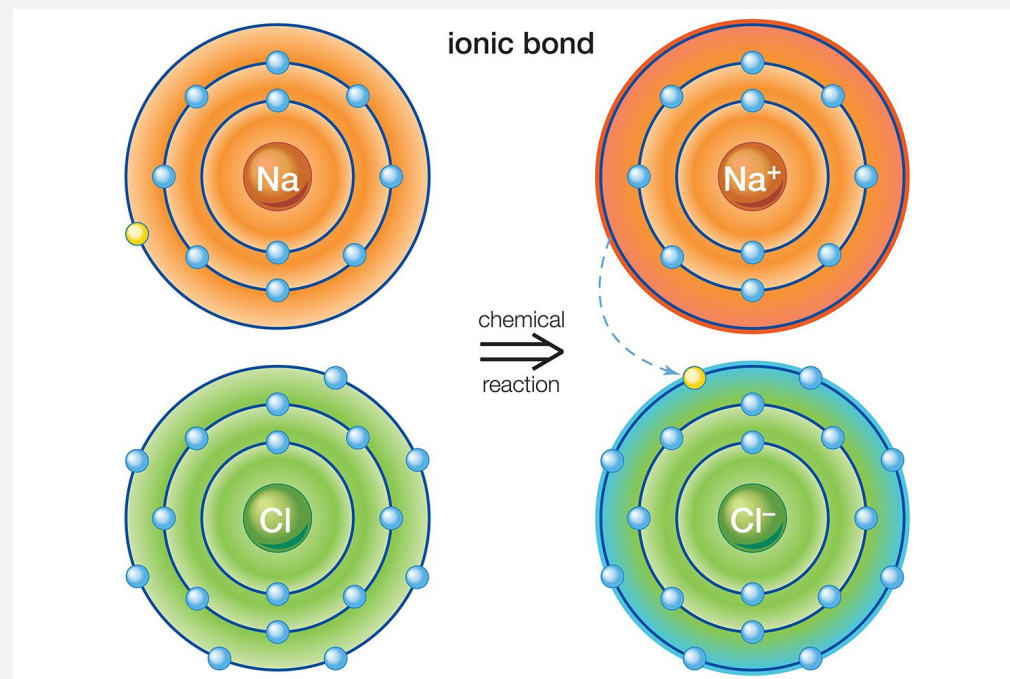
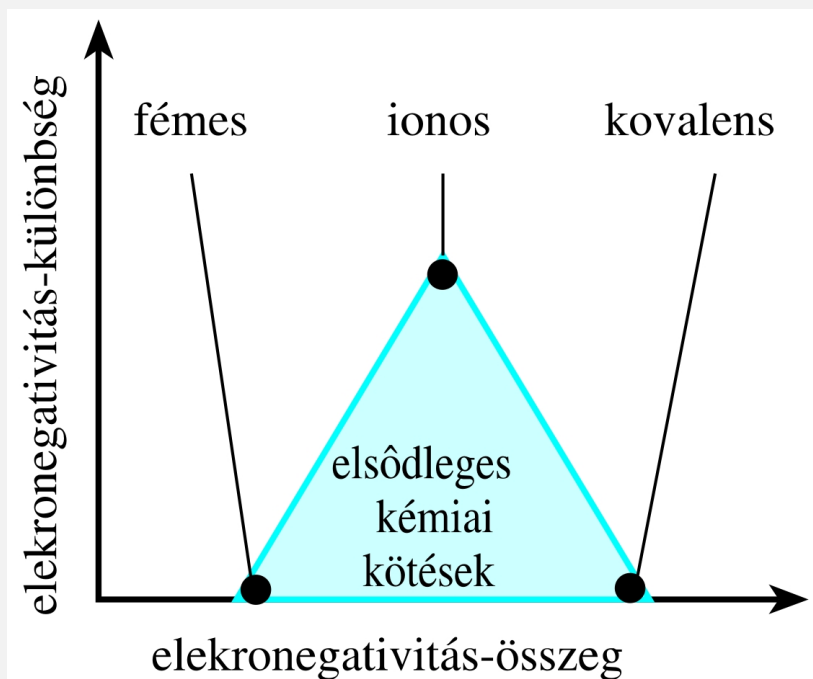


# Elsődleges kémiai kötések



Kovalens kötés: molekulapályák alakulnak ki a vegyérték-elektronok között (kötőelektronok). Többatomos molekulák térszerkezetét (egyensúlyi kötéstávolságok, kötésszögek) a kötőelektronok atomi elektronállapotainak szimmetriája határozza meg. Tisztán kovalens kötés csak akkor alakul ki, ha a molekulában a pozitív és a negatív töltések súlypontjai egybeesnek. Ha ez nem teljesül, akkor az elektrosztatikus kölcsönhatás is szerepet játszik a kötés kialakításában.

# Elsődleges kémiai kötések



Elektronegativitás (Linus Pauling): a semleges atomból előállított pozitív, illetve negatív ionok létrehozásához szükséges energiák abszolút értékeinek összege.

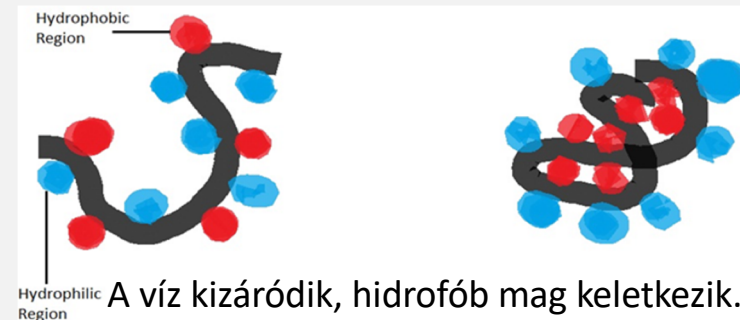
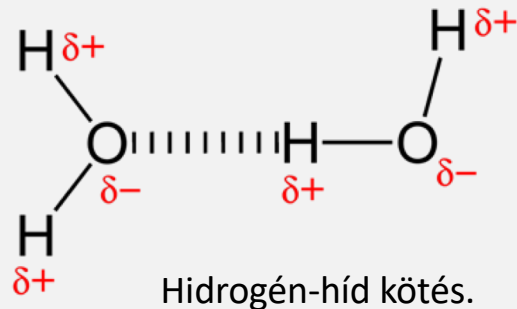
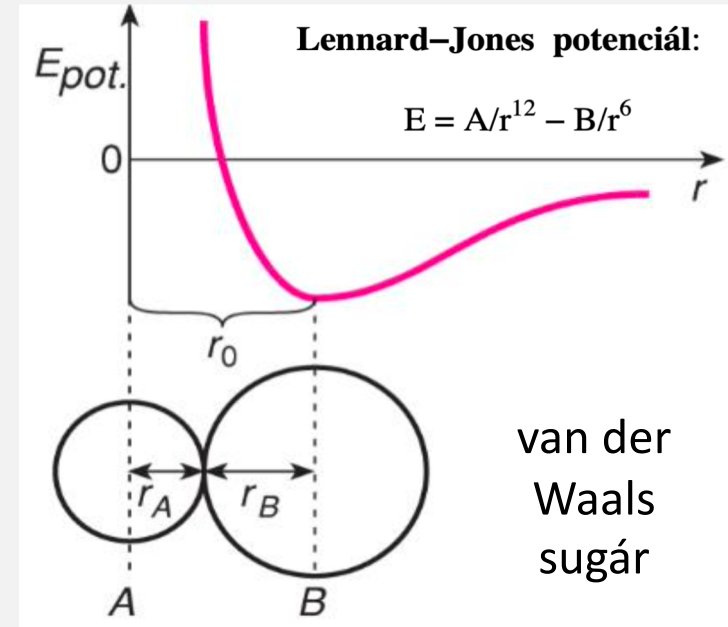
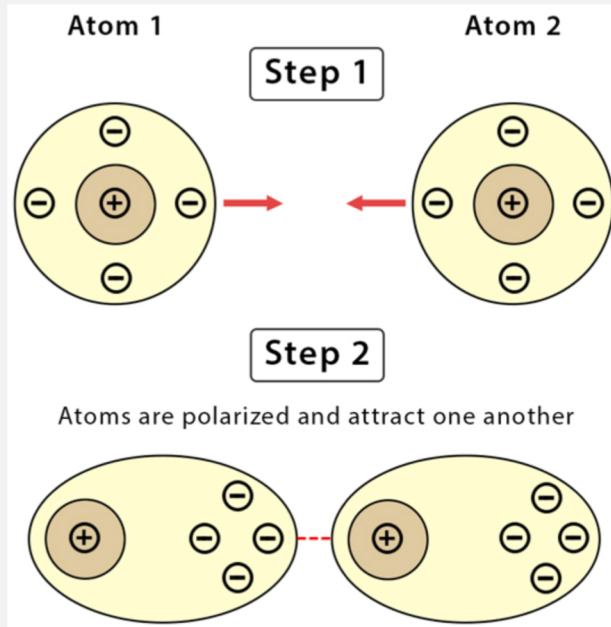
Ionos kötés: nagyon különböző elektronegativitású atomok között (pl. NaCl).

Fémies kötés: kristályos rendben elhelyezkedő fémionokat az egész rendszerre kiterjedő (delokalizált) vegyérték-elektronok tartják össze.



# Másodlagos kölcsönhatások

dipólus-dipólus, van der Waals, H-híd, hidrofób  
egy-két nagyságrenddel gyengébbek

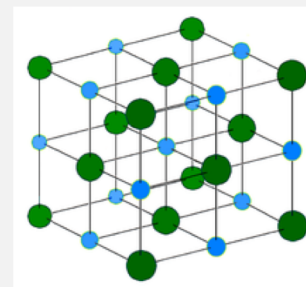
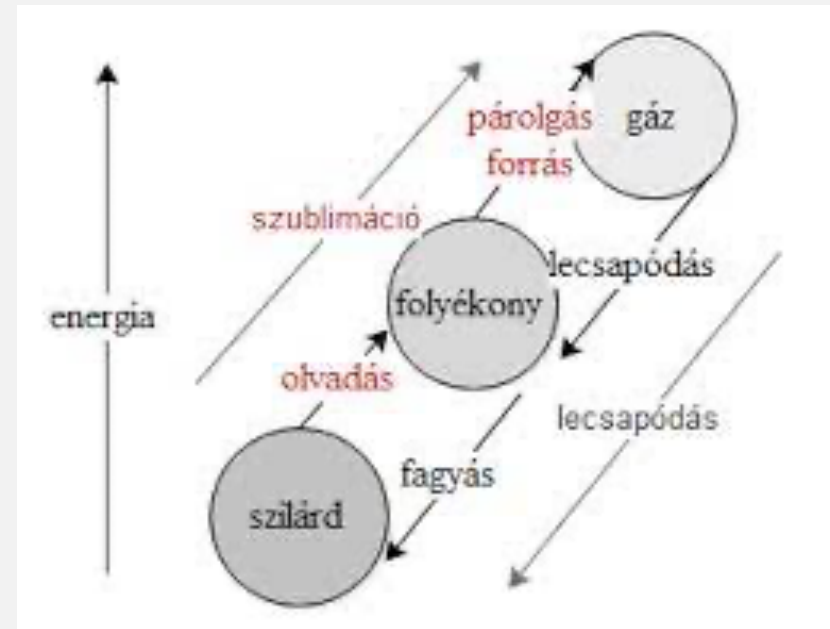


# Halmazállapotok

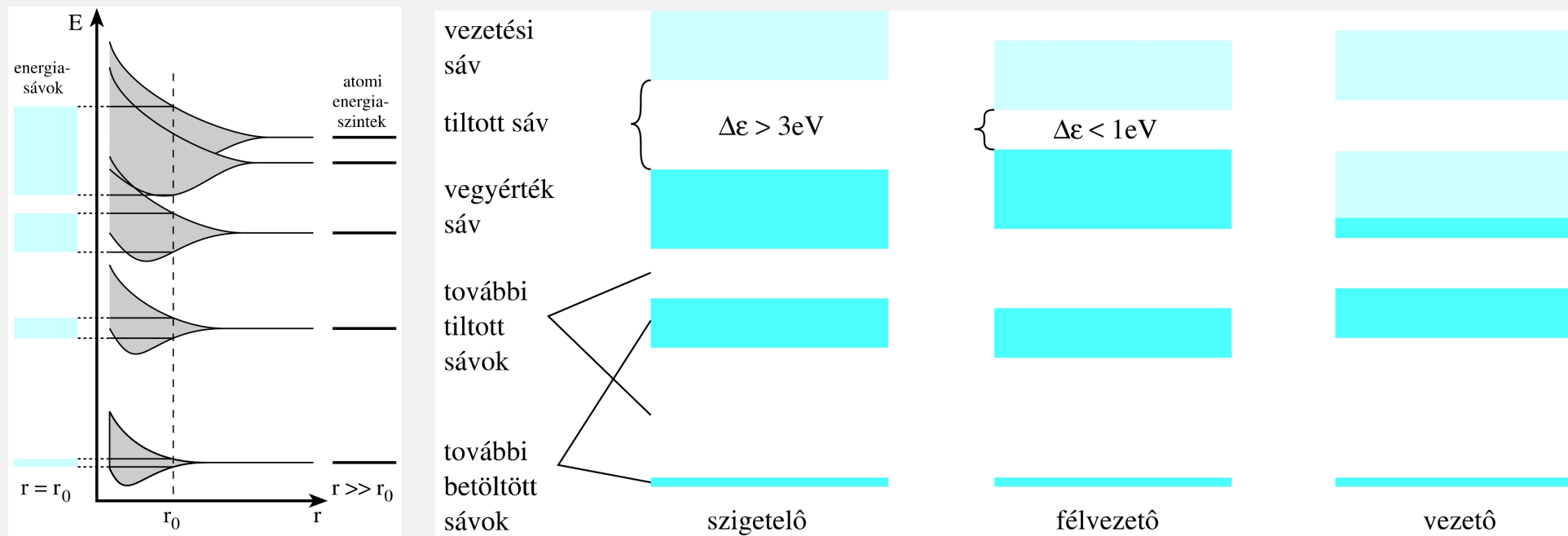
Gáz (légnemű): a gázcseppkék között ideális esetben nincs kölcsönhatás, csak rugalmasan ütköznek egymással és az edény falával.

Folyadék: a részecskék rövid hatótávolságú, nem irányított kölcsönhatásba lépnek, csak rövid távú rendezettség lehet, amely dinamikus természetű.

Kristályos anyagok: hosszú távú, periodikus rendezettség, anizotróp. A szerkezet az elemi cellák periodikus ismétlődésével felépülő térrács.



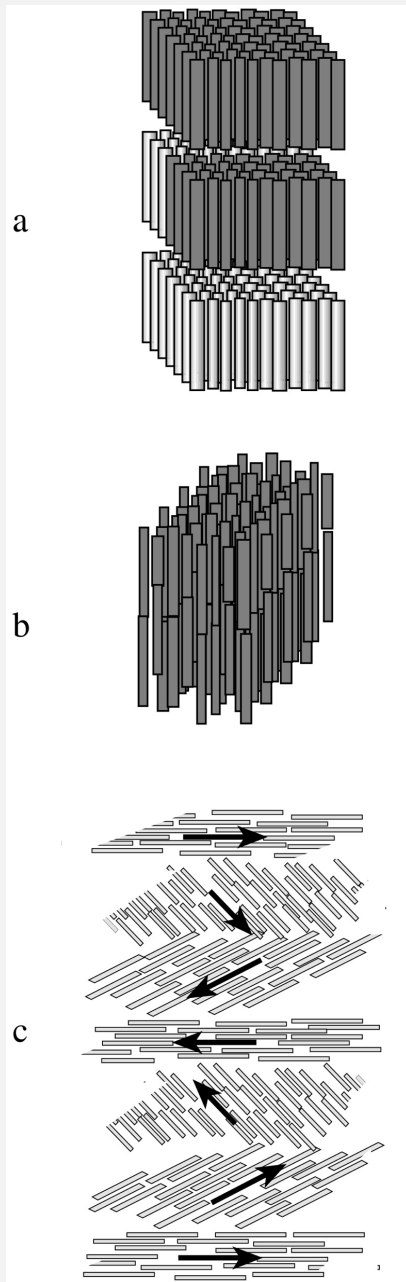
# Kristályos anyagok sávszerkezete



Ha vegyértéksáv betöltött és a tiltott sáv széles ( $>3$  eV), akkor az elektronok nem jutnak fel a vezetési sávba, a kristály szigetelő. Ha a tiltott sáv keskenyebb ( $\sim 1$  eV), akkor az elektronok egy része feljut a vezetési sávba, az ilyen kristályos anyag félvezető. Ha a vegyértéksáv csak részlegesen betöltött, akkor az anyag jól vezeti az elektromosságot.

Ha a tiltott sáv szélesebb ( $>3,1$  eV), mint a látható fény fotonenergiája (1,5-3,1 eV), akkor a kristályos anyag átlátszó. A vezetők átlátszatlanok, mert a vegyértéksáv végéig folytonosan gerjeszthetők az elektronjaik (fémes kötés: delokalizált elektronok).

# Folyadékkristályok



**Mezomorf állapot:** aszimmetrikus molekulák részben kristályos, részben folyadék jellegű kölcsönhatásokkal végbemenő szerveződése. **Transzlációs rend:** a molekulák tömegközéppontjai síkokat alkotnak, amelyekben a molekulák periodikusan helyezkednek el. **Orientációs rend:** a molekulatengelyek azonos irányban állnak.

a) **szmektikus** folyadékkristály: mindkét rendezettség jelen van

b) **nematikus** folyadékkristály: csak orientációs rend van

c) **koleszterikus** folyadékkristály: hasonló a nematikus állapothoz, de az egymás fölötti rétegek adott szöggel elfordulnak egymáshoz képest (csavart nematikus állapot).

**Termotrop** folyadékkristály rendezettsége a hőmérséklettől függ.

**Liotrop** folyadékkristályok rendezettsége a komponensek koncentráció-arányainak függvénye, például amfifil molekulák vízben spontán kettősréteget képeznek.

# Kolloidok

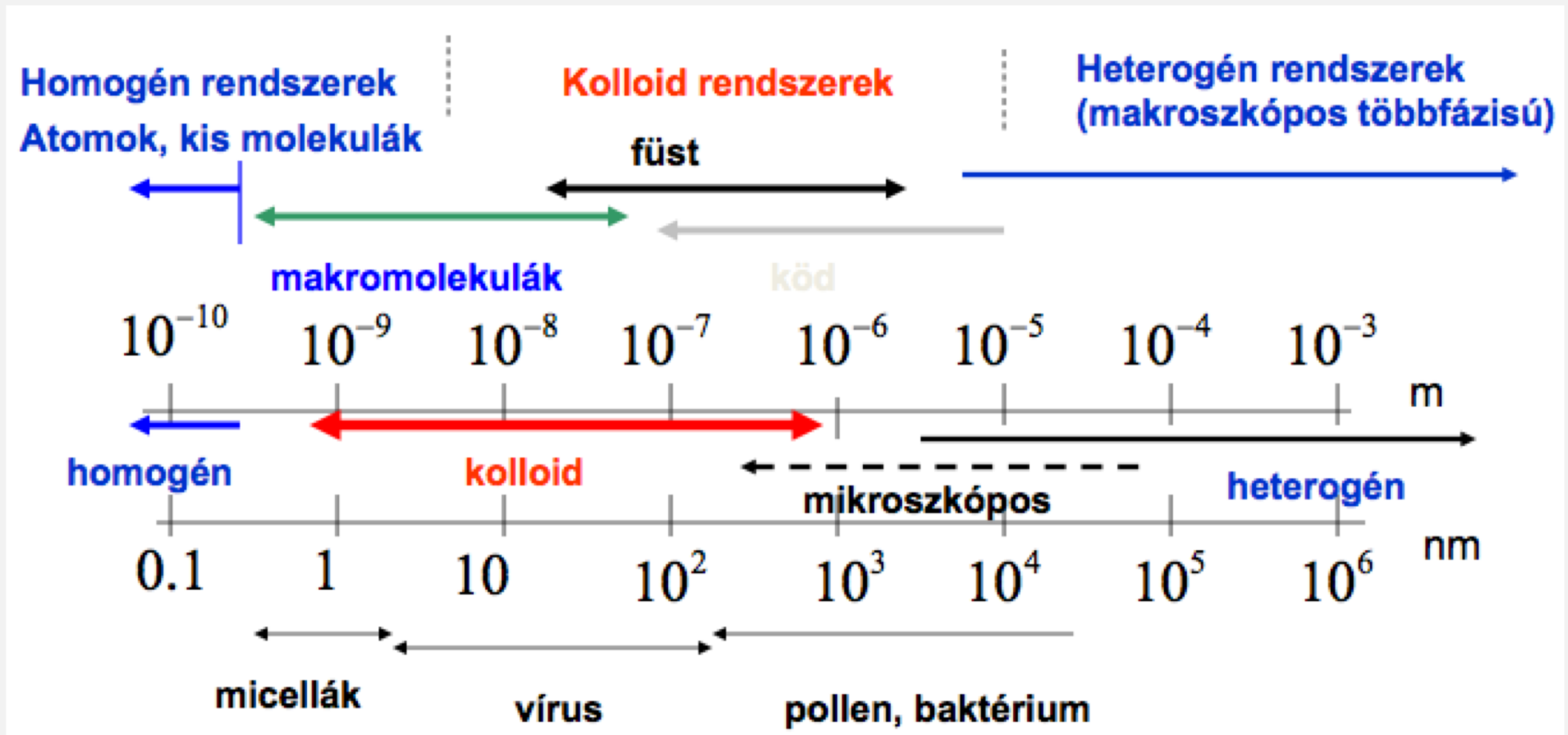
Két vagy több komponensből álló keverék két szélső állapotot vehet fel:

- az egyik komponens egyenletesen eloszlik a másikban (homogén rendszer, valódi oldat)
- a komponensek szétválnak (heterogén rendszer, fázisszeparáció)

Kolloid rendszer: az egyik komponens olyan asszociátumokat képez a másikban, amelyeknek valódi felülete van.

Biológiában fontos kolloidok: makromolekulás kolloidok (fehérjék, poliszaharidok) és asszociációs kolloidok (sejtmembrán).

# Kolloid rendszerek mérete

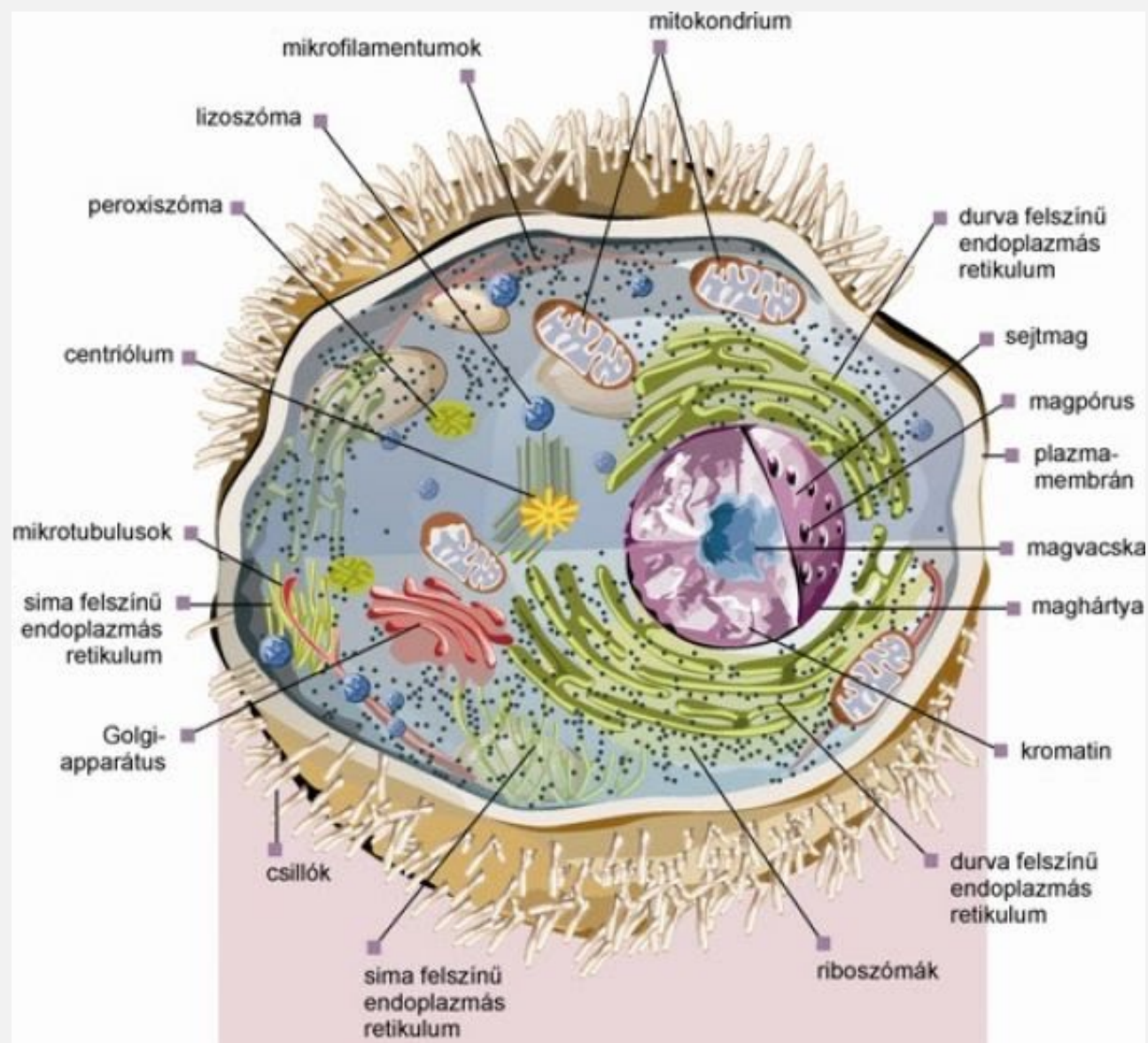


**Bármilyen anyag kolloid állapotba hozható.**

A kolloid állapot egy mérettől függő állapot, nincs kémiai összetételhez vagy anyagi tulajdonsághoz kötve.



# Az élő anyag kolloid rendszer



# Ellenőrző kérdések

atommodellek fejlődése

diszkrét energiaszintek

Franck-Hertz kísérlet

H atom spektruma

kvantumszámok

Pauli-elv, Hund-szabály

kötéstípusok

gáz, folyadék, szilárd állapot

folyadékkristályok

kolloidok

## Kapcsolódó fejezetek:

*Damjanovich, Fidy, Szöllősi: Orvosi Biofizika*

### I. fejezet

1.1.1	3.1.1
1.1.2	3.2.1
1.2.1	3.3.1
1.2.2	3.3.2
1.3.1	3.3.3
1.3.3	3.4.1
1.4.1	3.4.2
1.4.2	4.1.1
1.4.3	4.1.2
2.1.1	4.1.3
2.1.2	
2.1.3	
2.1.4	
2.1.5	