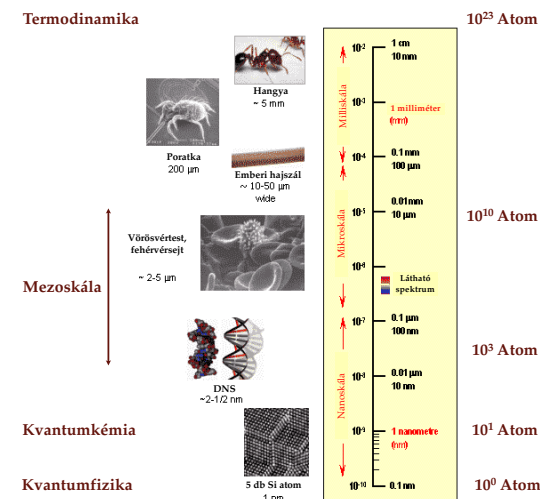


ANYAGSZERKEZET, KÖLCSÖNHATÁSOK, AFM

KELLERMAYER MIKLÓS

BIOMOLEKULÁRIS RENDSZEREK MÉRETSKÁLÁJA



“Ha egy világkatasztrófa következtében minden tudományos ismeretanyag megsemmisülne és csak egyetlenegy mondat maradna örökségül a következő civilizációra, mi lenne az a mondat, amely a legtömörebb megfogalmazásban a legtöbb információt sűrítene magában? Úgy vélem ennek a mondatnak az *atomok hipotézisét* (vagy ha úgy tetszik, az atomok létezésének *tényét*) kellene tartalmaznia: azt, hogy *minden dolog atomokból épül fel - állandóan mozgó kis részecskékből, amelyek vonzzák egymást ha kis távolságra vannak, és taszítják egymást, ha egyiket a másikba préselik*. ...ez a megállapítás hihetetlen mennyiségű információt tartalmaz a világról, csupán egy kis logika és fantázia kell hozzá.”

(Richard P. Feynman, Nobel-díjas fizikus)

KORAI ATOMELMÉLETEK

Demokritosz (Kr. e. 460-370)
Anyagi világ oszthatatlan részecskéiből (atomos) áll.

Joseph John Thomson (1856-1940)
Az elektron felfedezője.

Ernest Rutherford (1871-1937)

Rutherford-féle atommodell: parányi naprendszer

John Dalton (1766-1844)
Egy-egy elem azonos atomokból.

Katódsugár (elektronnyaláb) vákuumsőben.

Rutherford-féle kísérlet
Az atommag átmérője az atomátmérő ~százszerez része!

Dalton atomja

“Mazsoláspuding” atommodell

Problema:
-instabil atom
-elektronok: centripetális gyorsulás - sugárzás - energiavesztés - atommágba zuhanás

AZ ATOM ENERGÁJÁJA

KVANTUMOKBAN VÁLTOZIK

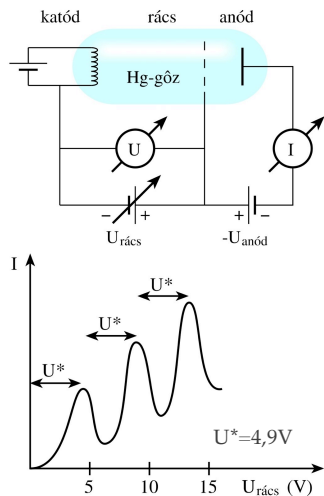
Franck-Hertz kísérlet (1914)



James Franck (1882-1964)



Gustav Ludwig Hertz (1887-1957)



A rácsfeszítéssel felgyorsított elektronok a Hg atomokkal való rugalmatlan ütközés során mozgási energiájukat diszkrét adagokban ("kvantum") veszítik el.

BOHR-FÉLE ATOMMODEL

Bohr-féle posztulátumok

1. Kvantumfeltétel:

- Az atom elektronjai csak meghatározott pályákon keringhetnek.
- Ezek a pályák az elektron nem sugároz, energiája állandó.
- A pályákon keringő elektron impulzusnyomatéka (peridület, L) a $h/2\pi$ egész számú többszöröse:

$$L = mvr = n \frac{h}{2\pi}$$

n – főkvantumszám. Az elektrópályák sugarai kiszámíthatók. Az első pálya sugara $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11}$ m ("Bohr-rádusz"). A további pályák sugarai:

$$r_n = n^2 r_1$$

2. Frekvenciafeltétel:

- Az atom csak akkor sugároz (i.e., fényt bocsát ki), ha az elektron az egyik pályáról a másikra ugrik.
- A kisugárzott energia nagysága a két pályenergia különbsége:

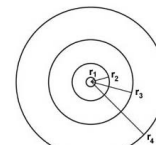
$$E_{\text{foton}} = h\nu = E_2 - E_1$$

A pály energiák kiszámíthatók. Az első pálya energiája $E_1 = -13,6$ eV. A további pály energiák:

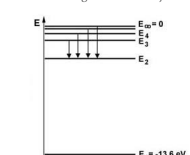
$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$



Niels Bohr (1885-1962)



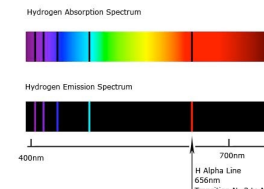
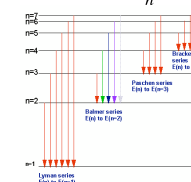
A hidrogén Bohr modellje



A hidrogén energiaszintjei Bohr szerint

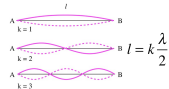
Jelentőség

- Megmagyarázta a hidrogén spektrumvonalait. De csak a hidrogénét.
- Abszorpciós/emissziós spektroszkópia
- Lézerműködés



AZ ELEKTRON MINT HULLÁM

Kvantálttság kifejlesztett húron kialakuló állóhullámokban

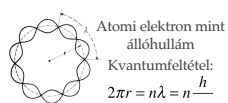


Elektron mint hullám



Louis V. de Broglie (1892-1978)

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



Atomi elektron mint állóhullám
Kvantumfeltétel:
 $2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{m_e v}$

Elektronhullám terjedési törvénye



Erwin Schrödinger (1887-1961)

Ψ (psi) hullámfüggvény:

- $|\Psi(x,t)|^2$: elektronhullám helytől (x) és időtől (t) függő amplitúdóját adja meg.
- Ψ^2 : megadja az elektron találati valószínűségét.
- Ψ^2 : integrálva a teljes térre = 1 (i.e., az elektron valahol biztosan megtalálható).
- Ψ a Schrödinger egyenlet segítségével megadja az elektron energiáját.
- Szabad elektronra Ψ szinuszfüggvény: impulzus pontosan meghatározott ($p=h/\lambda$), hely (x) teljesen bizonytalan (határozatlansági reláció!)



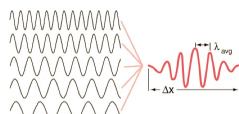
Szabadon terjedő részecske hullámfüggvénye (helyzeti energia = 0)

Határozatlansági reláció



Werner Heisenberg (1901-1976)

A helymeghatározás pontosításához különböző hosszúságú (λ) hullámokat szuperponálunk:



Minél szélesebb λ eloszlása ($\Delta\lambda$), annál pontosabb a helymeghatározás (Δx csökken), azonban annál jobban szétkenődik az impulzus (Δp nő):

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

KVANTUMMECHANIKAI ATOMMODEL

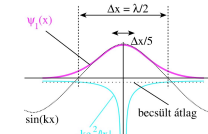
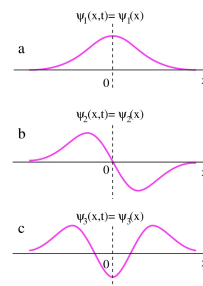
Az atomban minden elektron adott állapotban létezik, megtalálási valószínűsége a mag körül adott mintázatot alkot.

Kvantummechanika:

- leírja az elektronok állapotát (egy állapot \rightarrow egy hullámfüggvény, Ψ)
- kiszámítja az elektron legvalószínűbb helyét (orbitál, r) és energiáját (E)

$$E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r}$$

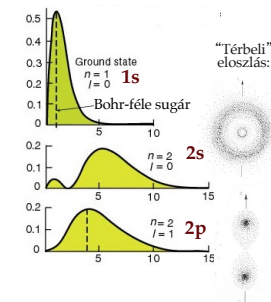
Az atomban a Coulomb vonzás határozza meg a helyzeti energiát:



Egyszerűsített Schrödinger egyenlet:

$$\left(\frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} \right) \Psi = E\Psi$$

Elektron megtalálási valószínűség eloszlása hidrogénatomban:



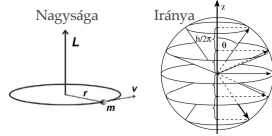
KVANTUMSZÁMOK

A kvantumszámok az elektron állapotát leíró **fizikai mennyiségeket** jellemeznek:

1. Energia

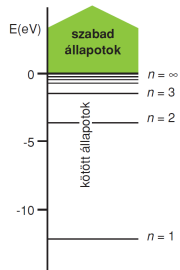
Az adott állapotban tartózkodó elektron energiája

2. Impulzusmomentum (perdület)



3. Saját perdület (spin)

Forgásból származó perdület, nagyság, irány

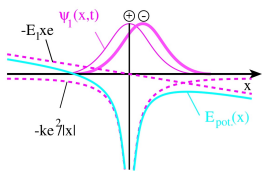


Kvantumszám	Jele	Kvantált mennyiség	Képlet	Lehetséges egész értékek
fő	n	energia	$E_n = \frac{E_1}{n^2}$	1, 2, 3, ...
mellék	l	perdület nagysága	$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar$	0, 1, ..., $n-1$
mágneses	m	perdület iránya	$L_z = m \hbar$	$-l, ..., 0, ..., l$
spin	s	saját perdület nagysága	$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar$	$\frac{1}{2}$
mágneses spin	m_s	saját perdület iránya	$S_z = m_s \hbar$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

KÜLSŐ ELEKTROMOS TÉR HATÁSA AZ ATOMI ELEKTRONRA

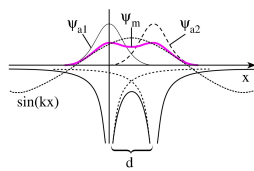
Gyenge külső elektromos térben ($-E_1 x e$):

- Ψ eltolódik
- az atom polarizálódik



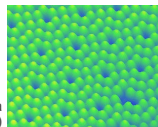
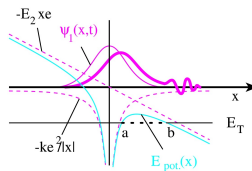
Közelben levő atommag hatására:

- Közbülső Ψ alakul ki
- az elektron mindkét atommaghoz tartozik
- kovalens kötés alakul ki



Erős külső elektromos térben ($-E_2 x e$):

- Ψ torzul
- az elektron szabaddá válik, gerjesztés nélkül
- alagút effektus (tunneling)



Pásztázó alagúteffektus mikroszkópia (Scanning Tunneling Microscopy, STM)

Si atomok

SPINKVANTUMSZÁM

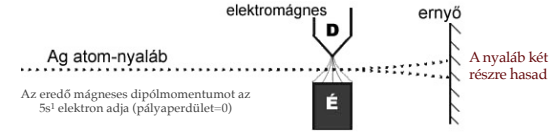
Stern-Gerlach kísérlet (1922)



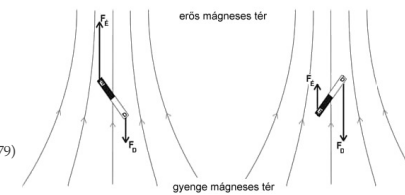
Otto Stern (1888-1969)



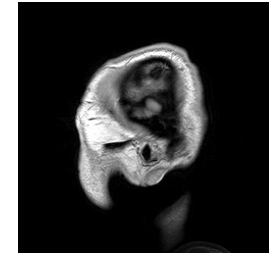
Walther Gerlach (1889-1979)



Inhomogén mágneses térben nemcsak forgatónyomaték, hanem eredő erő is hat a mágneses dipólra:



A spin mágneses momentum két értéket vehet fel.



MRI

A PERIÓDUSOS RENDSZER FELÉPÜLÉSE

Kötött atomi elektronállapot egyértelmű jellemzése: n, l, m_l, m_s kvantumszámokkal

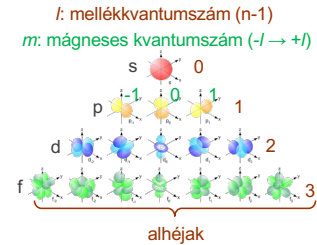
$n \rightarrow$ elektronhéj
 $n, l \rightarrow$ elektron-alhéj
 $n, l, m_l \rightarrow$ elektronpálya



Wolfgang Pauli (1900-1958)

Pauli-elv:

- Minden kvantumállapotot csak egyetlen elektron tölthet be.
- Egy atomon belül nem létezhet két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik.



Friedrich Hermann Hund (1896-1997)

Hund-szabály:

- Kvantumállapotok betöltésének sorrendje.
- Az az állapot rendelkezik a legalacsonyabb energiával, amelynek eredő spinértéke a legnagyobb.

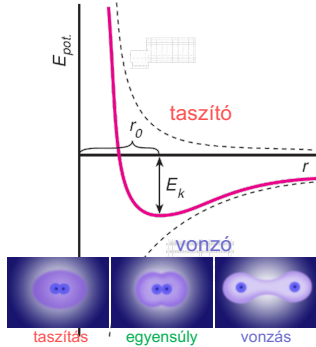
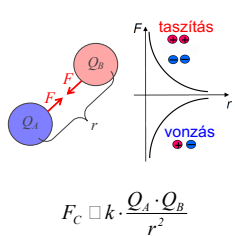
1s	2s	2p
$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$
betöltött alhéj	teljesen betöltött	betöltetlen alhéj

C atom elektronkonfigurációja
s: "sharp", p: "principal", d: "diffuse", f: "fuzzy"
(spektroszkópiai jelölések)

KÖLCSÖNHATÁSOK

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



$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító}$$

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

A, B: kölcsönhatásra jellemző állandók (atomtól függ)
n (vonzó) < m (taszító)

r_0 : kötéstávolság
 E_k : kötési energia

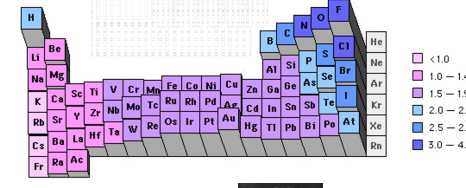
ELSŐDLEGES KÖTÉSEK

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: kötésben lévő atom elektronvonzó képessége



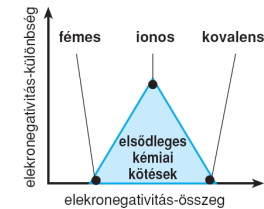
EN értékek Linus Pauling szerint



Linus Pauling (1901-1994)

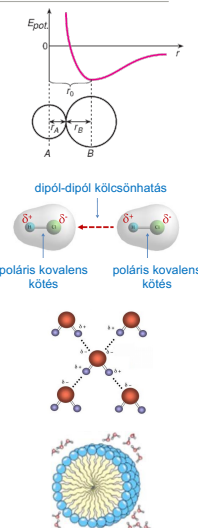
$$EN = |E_i| + |E_{ea}|$$

ionizációs energia elektron-affinitás

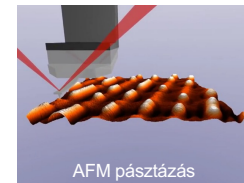
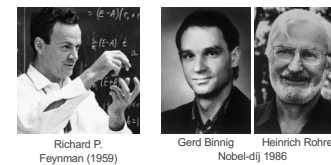


MÁSODLAGOS KÖTÉSEK

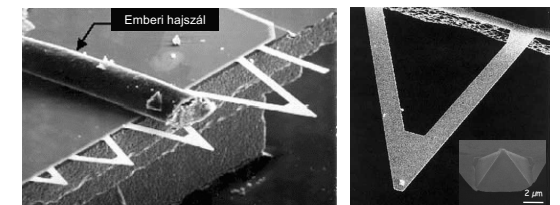
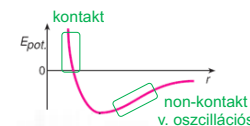
- Van der Waals:** apoláris atomok között (állandó dipólusmomentum nélkül) ahol egy átmenetileg kialakuló dipólus hat egy apoláris molekulára vagy atomra, melyben polarizációt indukál (indukált dipólus)
 - Van der Waals sugár: $r_0 = r_A + r_B$
 - Intermolekuláris vagy intramolekuláris
 - Fontos biológiai funkció: szerves anyagok/szerkezetek kialakítása
 - Gyenge: ($E_{köt} \sim 0,02\text{eV}$)
- Dipól-dipól kölcsönhatás:** A molekulában (vagy egy részében) állandó töltésmegosztás van jelen.
 - Polarizált (+) és (-) töltésű molekularészeket elektrosztatikus kölcsönhatás (Coulomb-erő) tart össze.
 - Intra/intermolekuláris,
 - Gyenge kölcsönhatás ($E_{köt} = 0,003-0,02\text{eV}$).
- 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 ($E_{köt} = 0,003-0,02\text{eV}$), de ezt a hőmozgás felszakítaná ($kT \sim 0,025\text{eV}$)!
 - rendezett vízmolekulák az apoláris molekula körül (minimális határfelület)



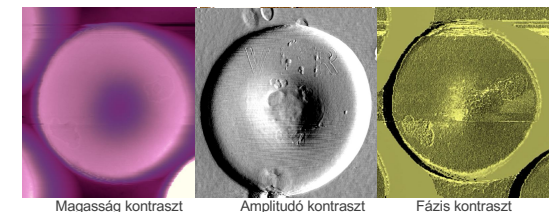
ATOMI ERŐMIKROSZKÓPIA (AFM)



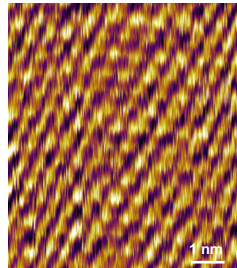
Az AFM feloldóképessége a tű görbületi sugarától függ.



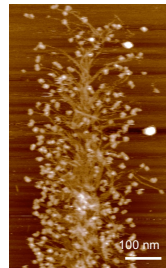
Oscillációs vezérlő jel → rugólapka → Detektált jel



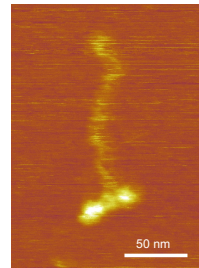
AFM FELVÉTELEK



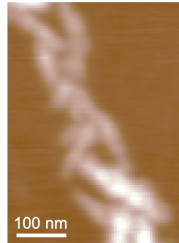
Csillám atomi szerkezete



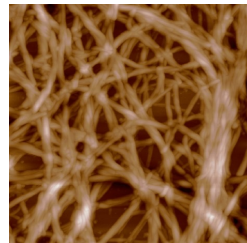
Miozin filamentum



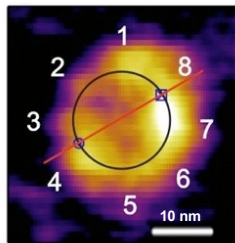
Miozinmolekula



Dezmin filamentum

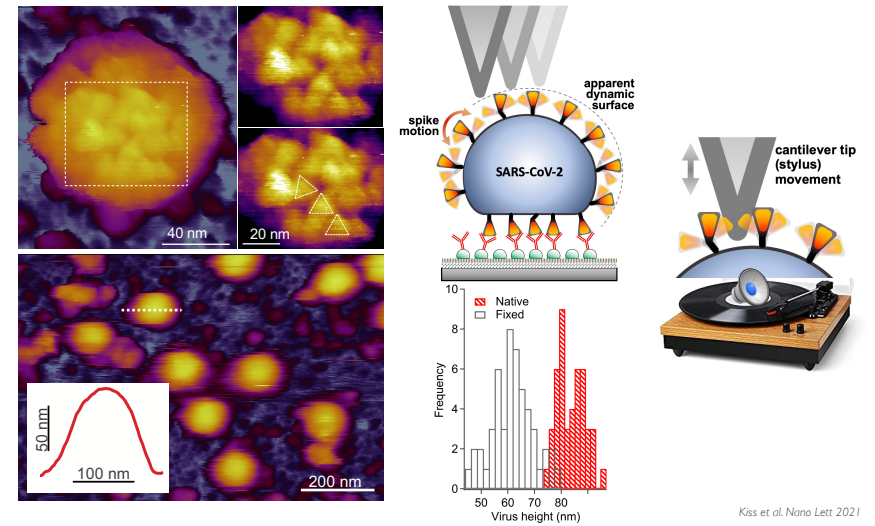


Amiloid β 1-40 fibrillumok



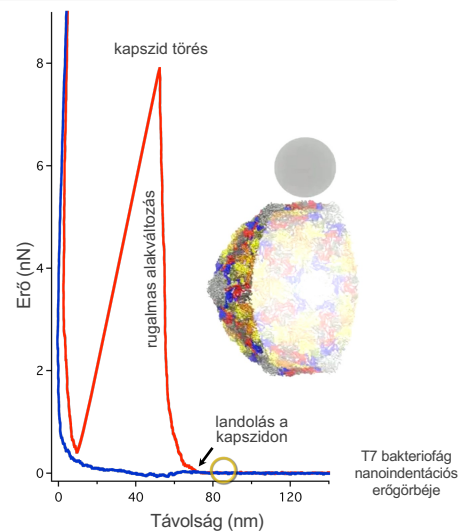
TTR gyűrű oligomer

A KORONAVÍRUS AFM KÉPE (ÉS HANGJA...)

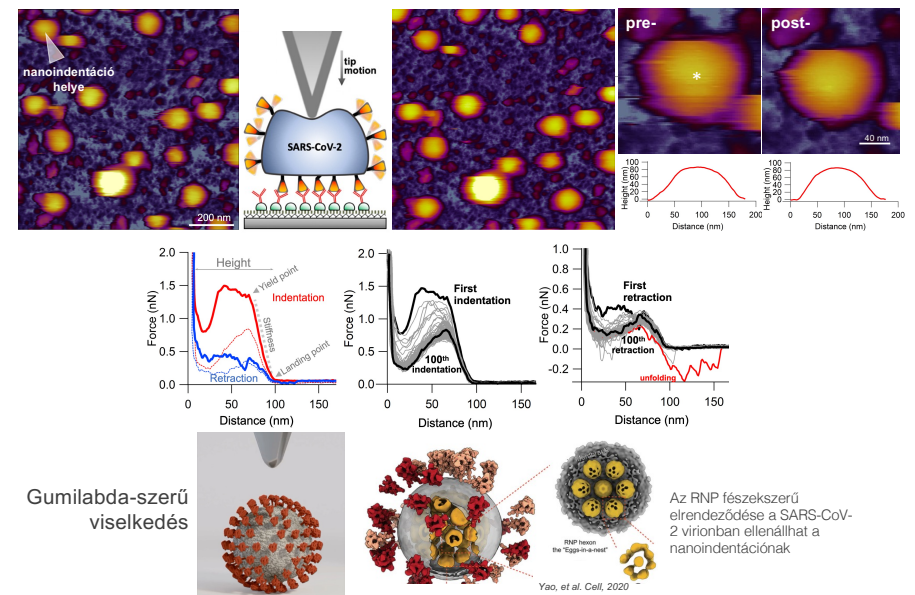


Kiss et al. Nano Lett 2021

VÍRUS MECHANIKA FELTÁRHATÓ NANOINDENTÁCIÓVAL



KORONAVÍRUS NANOMECHANIKA



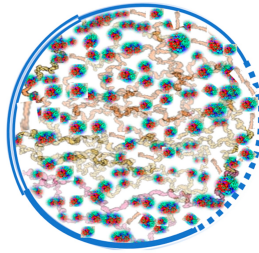
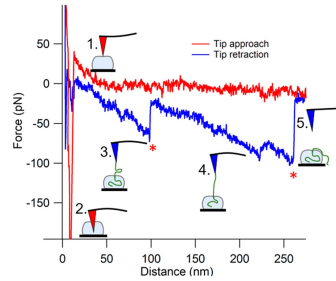
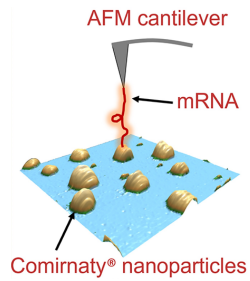
Yao, et al. Cell, 2020

Kiss et al. Nano Lett 2021

ORVOSI NOBEL-DÍJ 2023



Drew Weissman és Karikó Katalin



Szebeni et al, ACS Nano, 2023

OMHV



<https://feedback.semmelweis.hu/feedback/index.php?feedback-qr=RKT7810GHX0093O4>