

Anyagszerkezet, kölcsonhatások, AFM

Orvosi Biofizika I. 2024. október 1.

Kellermayer Miklós

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet



SEMMELWEIS
EGYETEM 1769

BIOMOLEKULÁRIS RENDSZEREK MÉRETSKÁLÁJA

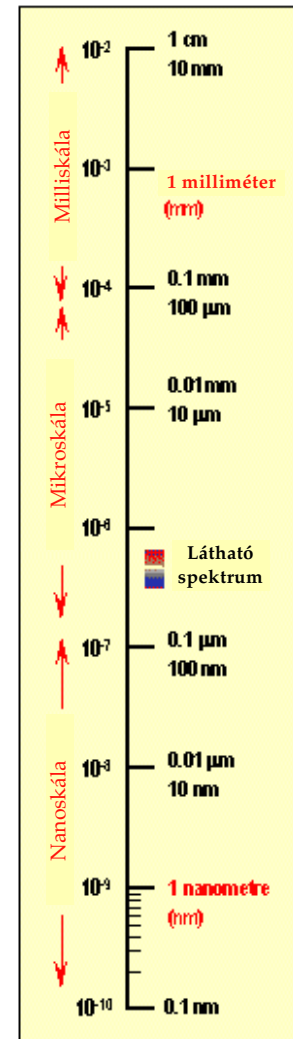
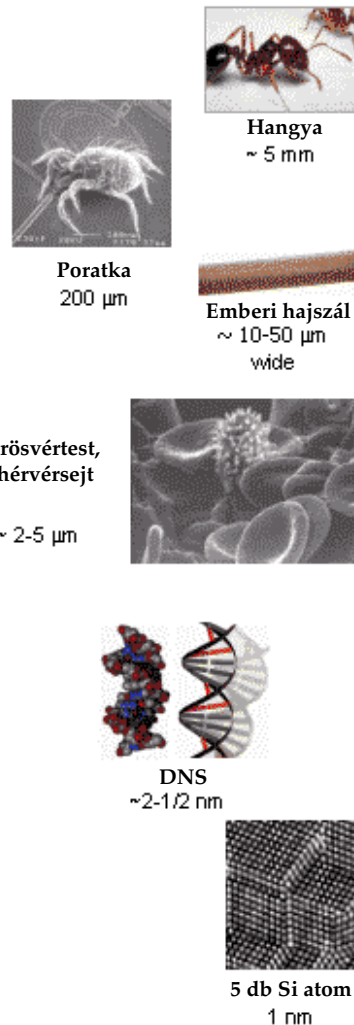
Termodinamika

10^{23} Atom

Mezoscála

Kvantumkémia

Kvantumfizika



10^{10} Atom

10^3 Atom

10^1 Atom

10^0 Atom

“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)

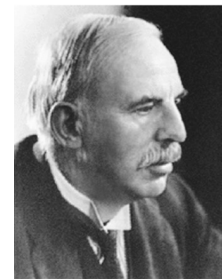
KORAI ATOMELMÉLETEK



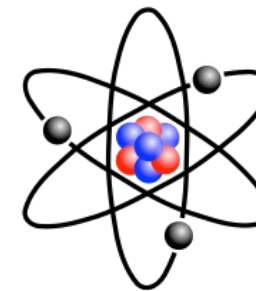
Démokritosz (Kr. e. 460-370)
Anyagi világ oszthatatlan
részecskékből (atomos) áll.



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



Ernest Rutherford
(1871-1937)



Rutherford-féle
atommodell:
parányi
naprendszer



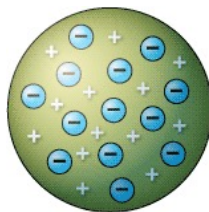
John Dalton (1766-1844)
Egy-egy elem azonos atomokból.



Dalton atomja



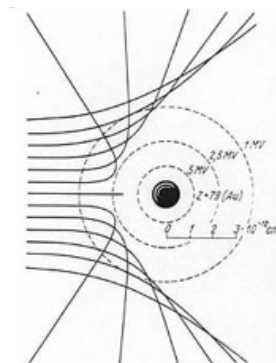
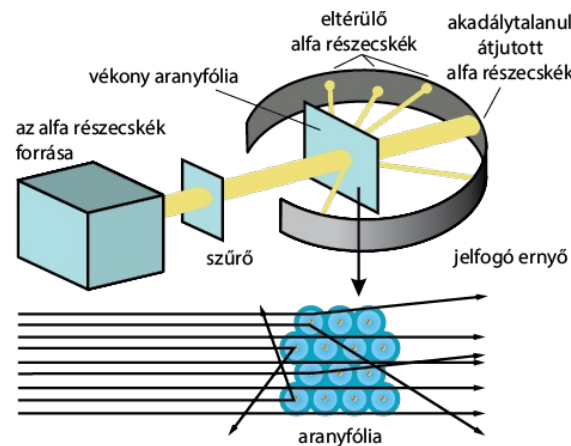
Katódsugár (elektronnyaláb)
vákuumcsőben.



“Mazsoláspuding”
atommodell

Rutherford-féle kísérlet

Az atommag átmérője az atomátmérő ~százezred része!



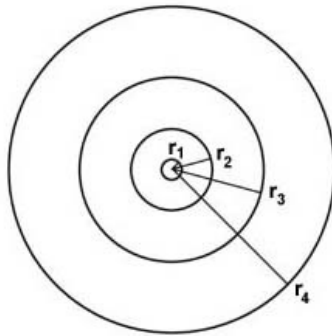
Probléma:

- instabil atom
- elektronok: centripetális gyorsulás - sugárzás - energiavesztés - atommagba zuhanás

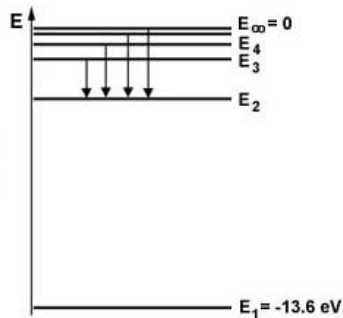
BOHR-FÉLE ATOMMODEL



Niels Bohr (1885-1962)



A hidrogén Bohr modellje



A hidrogén energiaszintjei Bohr szerint

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 (perdülete, L) a $h/2\pi$ egész számú többszöröse:

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

n = főkvantumszám. Az elektronpályák sugarai kiszámíthatóak. Az első pálya sugara $r_1 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ ("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 pályaenergia különbsége:

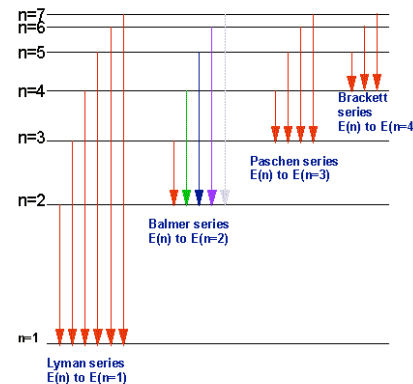
$$E_{\text{foton}} = h\nu = E_2 - E_1$$

A pályaenergiák kiszámíthatóak. Az első pálya energiája $E_1 = -13.6 \text{ eV}$. A további pályaenergiák:

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

Jelentőség

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



Hydrogen Absorption Spectrum

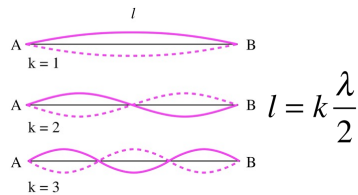


Hydrogen Emission Spectrum



ÁZ ELEKTRON MINT HULLÁM

Kvantáltság kifestített húron kialakuló állóhullámokban

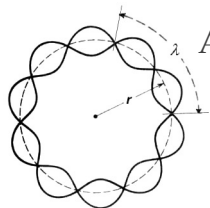


Elektron mint hullám



Louis V. de Broglie (1892-1978)

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



Atomi elektron mint állóhullám

Kvantumfeltétel:

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{mv}$$

Elektronhullám terjedési törvénye



Erwin Schrödinger (1887-1961)

Ψ (pszi) hullámfüggvény:

- $[\Psi(x,t)]$: elektronhullám helytől (x) és időtől (t) függő amplitudóját 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!)



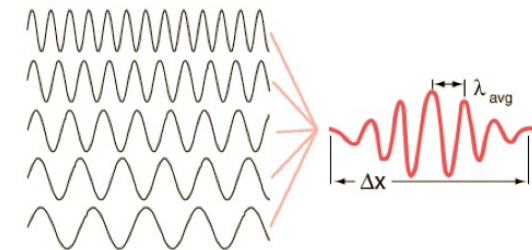
Szabadon terjedő részecske hullámfüggvénye
(helyzeti energia = 0)

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 szétkénődik az impulzus (Δp nő):

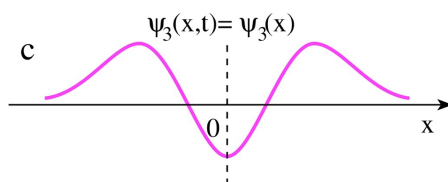
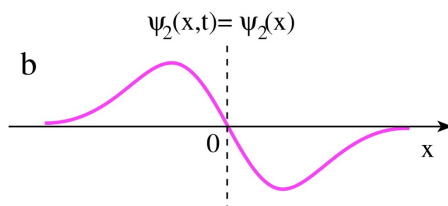
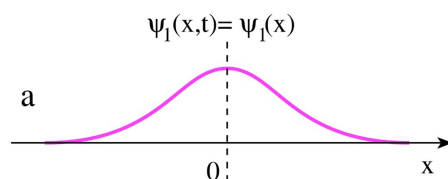
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi}$$

KVANTUMMECHANIKAI ATOMMODEL

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

Kvantummechanika:

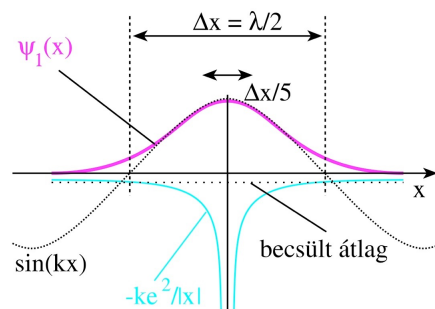
1. leírja az elektronok állapotát
(egy állapot \rightarrow egy hullámfüggvény, Ψ)



2. kiszámítja az elektron legvalószínűbb helyét (orbitál, r) és energiáját (E)

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

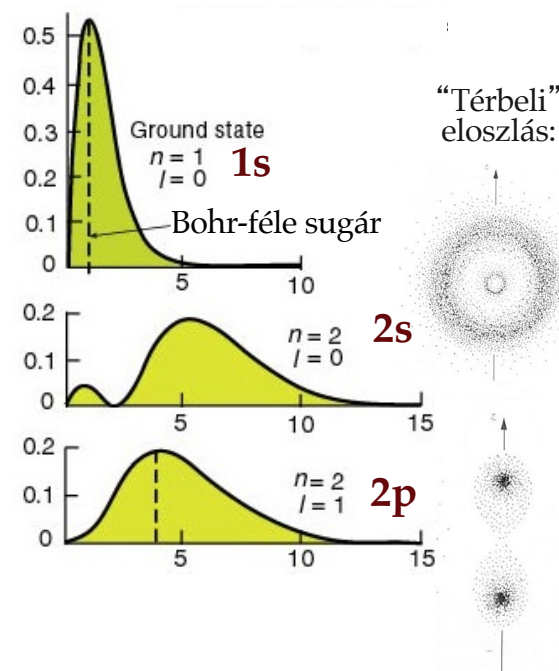
Az atomban a Coulomb vonzás határozza meg a helyzeti energiát:



Egyszerűsített Schrödinger egyenlet:

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

Elektron megtalálási valószínűség eloszlása hidrogénatomban:



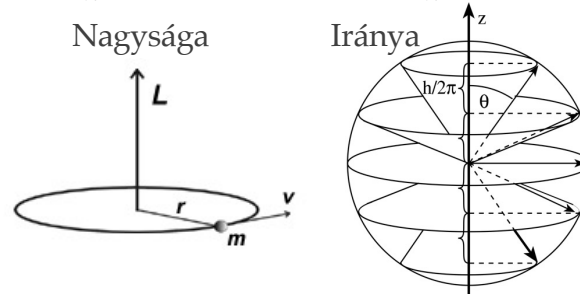
KVANTUMSZÁMOK

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

1. Energia

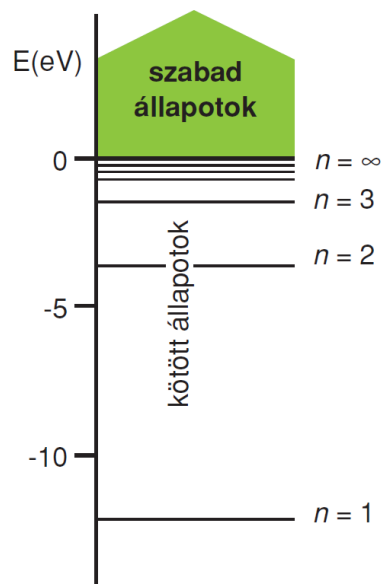
Az adott állapotban
tartózkodó elektron
energiája

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	$S_z = m_s \hbar$	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

SPINKVANTUMSZÁM

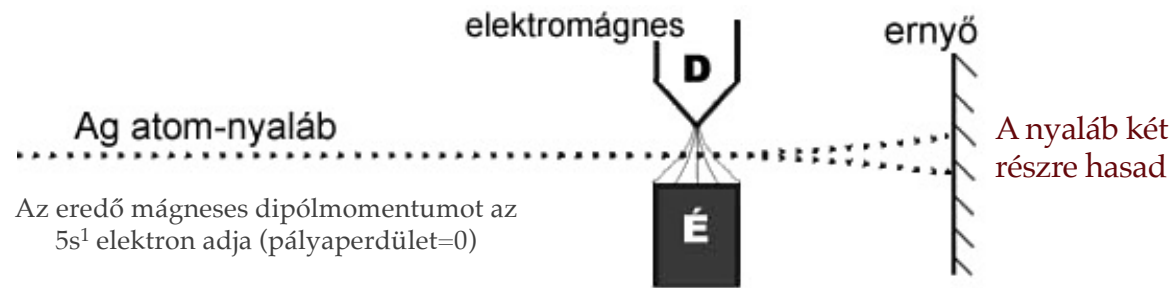
Stern-Gerlach kísérlet (1922)



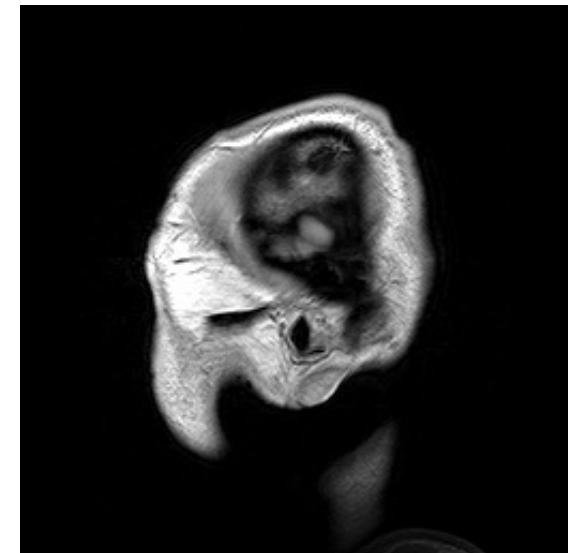
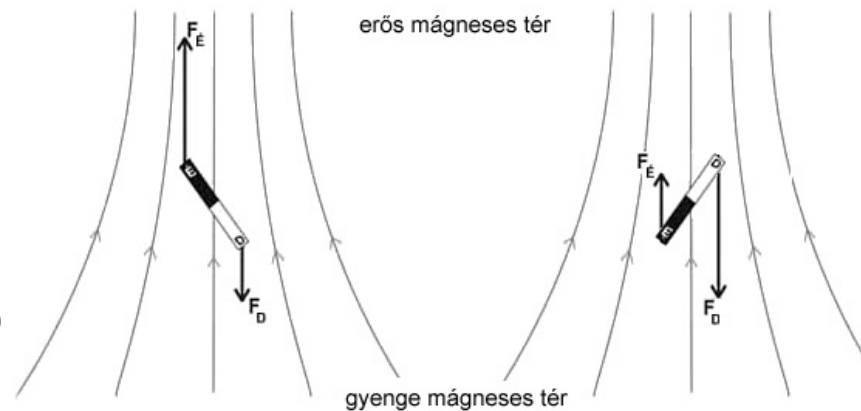
Otto Stern (1888-1969)



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

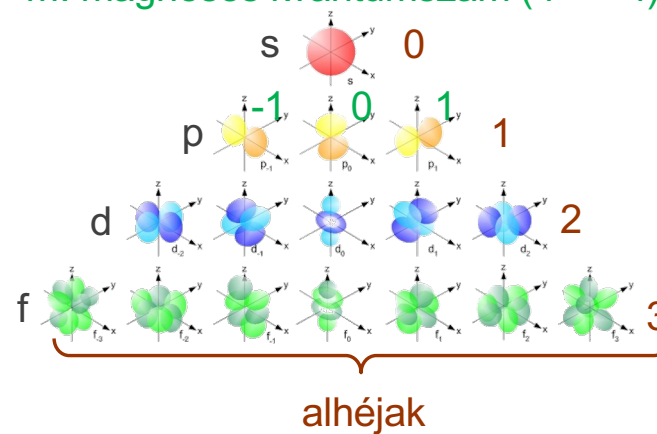


Wolfgang Pauli (1900-1958)

Pauli-elv:

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

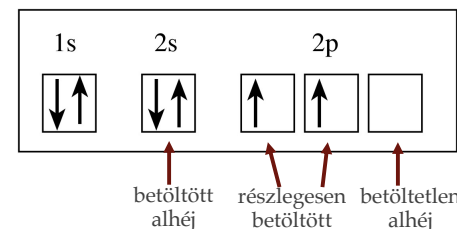
l : mellékkvantumszám ($n-1$)
 m : mágneses kvantumszám ($-l \rightarrow +l$)



Friedrich Hermann Hund
(1896-1997)

Hund-szabály:

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

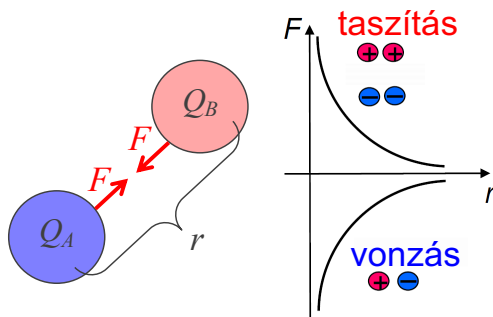


C atom elektronkonfigurációja
 s: "sharp", p: "principal", d:
 "deformed/diffuse"
 (spektroszkópiai jelölések)

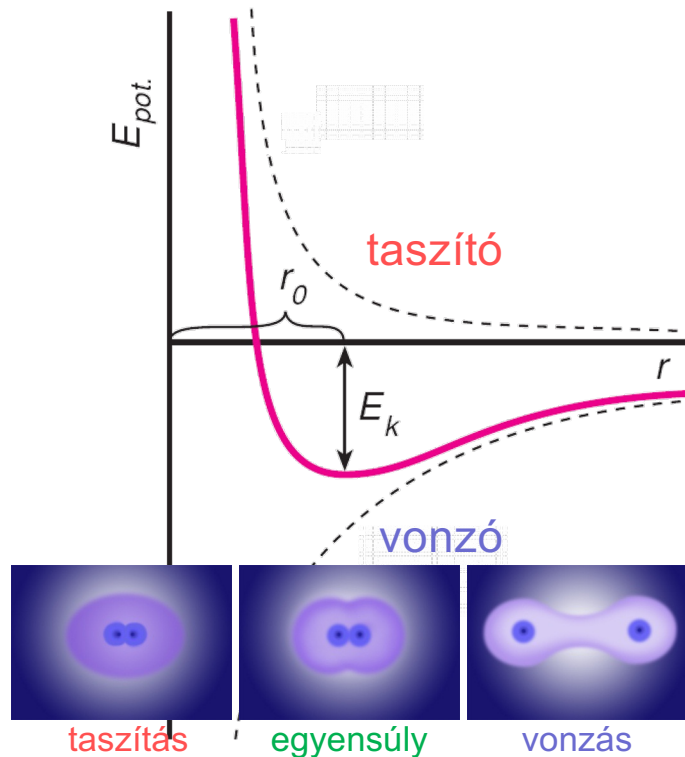
KÖLCSÖNHATÁSOK

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



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



$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító}$$

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

A, B: kölcsönhatásra jellemző állandók (atommól függ)

n (vonzó) < m (taszító)

r_0 : kötéstávolság

E_k : kötési energia

ELSŐDLEGES KÖTÉSEK

intramolekuláris

erős

elsődleges

intermolekuláris

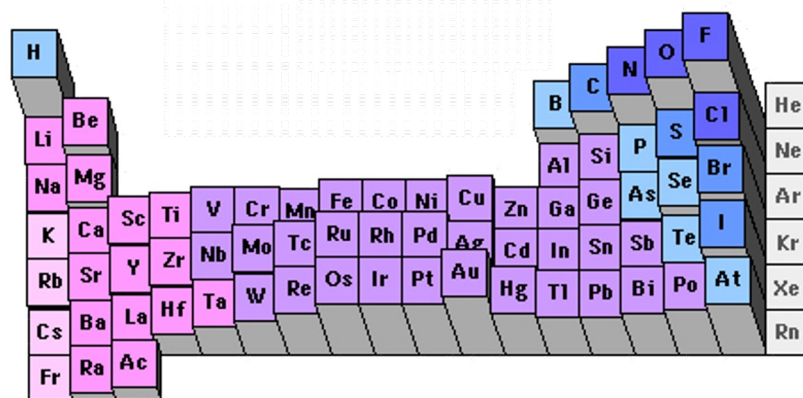
gyenge

másodlagos

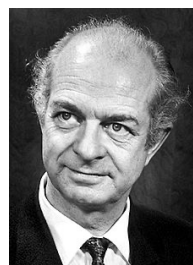
- **kovalens:** közös elektronpályák a részt vevő atommagok körül, erős: $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$
- **fémes kötés:** sokatomos rendszer, $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$
- **ionos kötés:** Coulomb-erők az ionok között, $E_{\text{köt}} > 1\text{eV}$

kialakulásuk az
elektronegativitás (EN)
függvénye

EN: kötésben lévő
atom elektronvonzó
képessége



EN értékek Linus
Pauling szerint

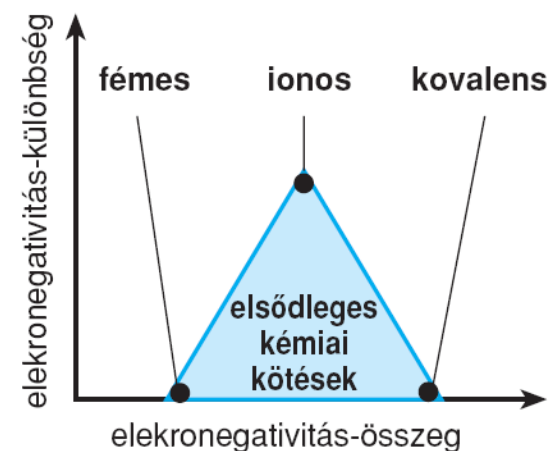


Linus Pauling
(1901-1994)

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

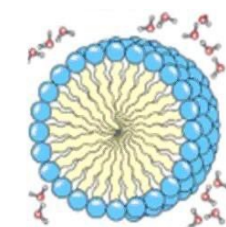
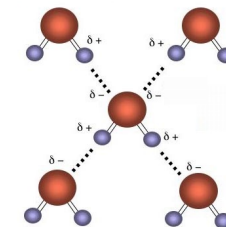
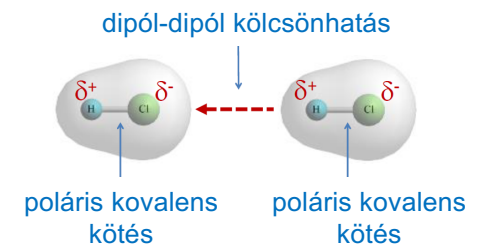
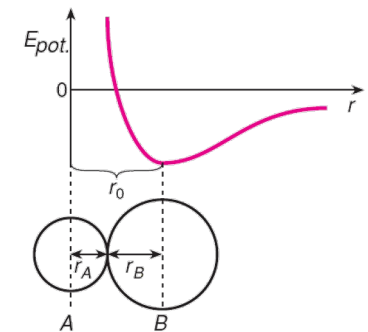
ionizációs
energia

elektron-
affinitás

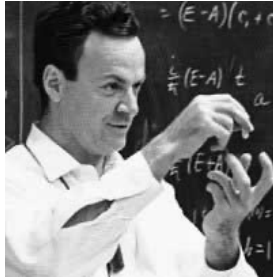


MÁSODLAGOS KÖTÉSEK

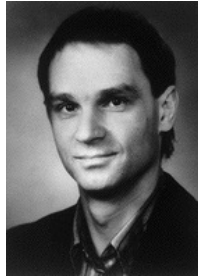
- **Van der Waals:** apoláris atomok között (állandó dipólusmomentum nélkül) ahol egy átmenetileg kialakuló dipólus hat egy apoláris molekulára vagy atomra, melyben polarizációt indukál (indukált dipólus)
 - Van der Waals sugár: $r_0 = r_A + r_B$
 - Intermolekuláris vagy intramolekuláris
 - Fontos biológiai funkció: szerves anyagok/szerkezetek kialakítása
 - Gyenge: ($E_{\text{köt}} \sim 0,02$ eV)
- **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 ($E_{\text{köt}} = 0,003-0,02$ eV).
- **H-kötés:** a H-atom két másik nagy elektronegativitású (F, O, N) atom között létesít kapcsolatot
 - $r \sim 0,23 - 0,35$ nm
 - $E \sim 0,2$ eV
- **Hidrofób kölcsönhatás:** gyenge Van der Waals kölcsönhatás lehetne ($E_{\text{köt}} = 0,003-0,02$ eV), de ezt a hőmozgás felszakítaná ($kT \sim 0,025$ eV)!
 - rendezett vízmolekulák az apoláris molekula körül (minimális határfelület)



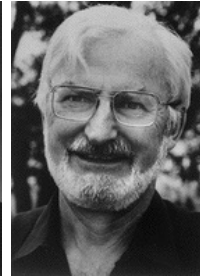
KÉPALKOTÁS KÖLCSSÖNHATÁSOK ALAPJÁN: ATOMI ERŐMIKROSKÓPIA (AFM)



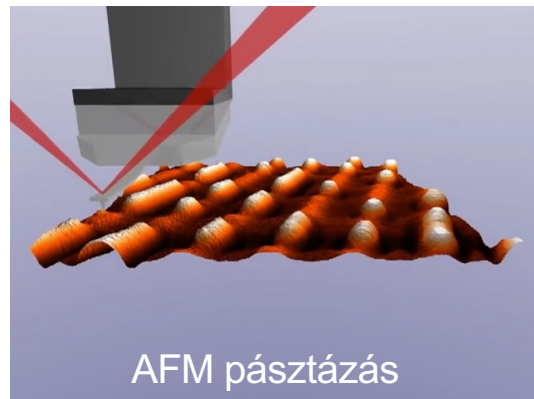
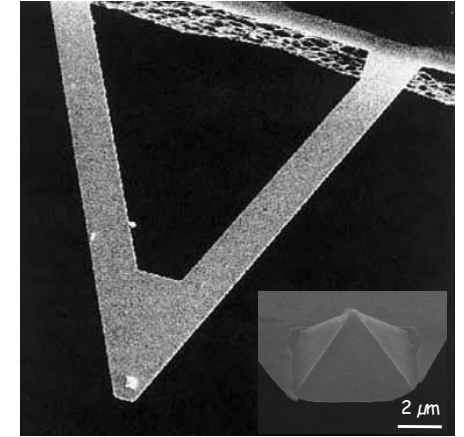
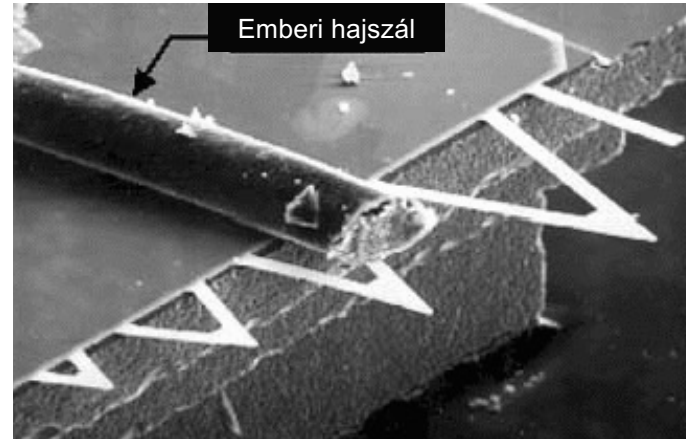
Richard P.
Feynman (1959)



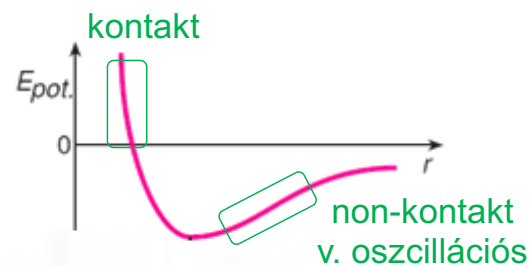
Gerd Binnig
Nobel-díj 1986



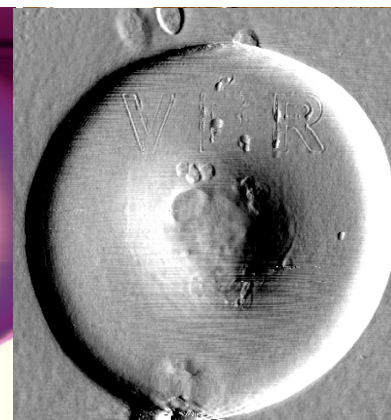
Heinrich Rohrer



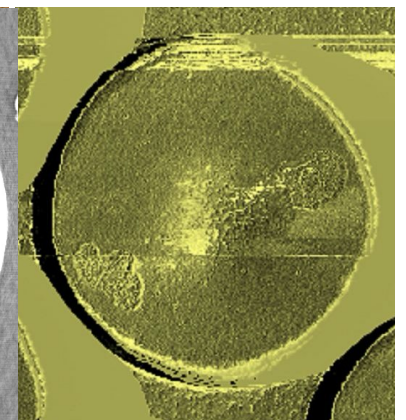
Az AFM feloldóképessége a
tű görbületi sugarától függ.



Magasság kontraszt

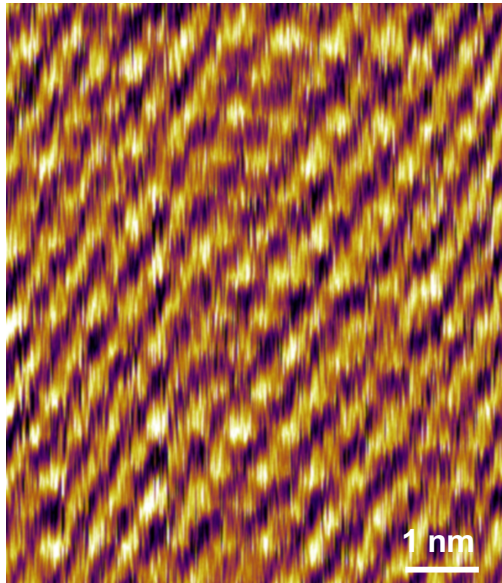


Amplitúdó kontraszt

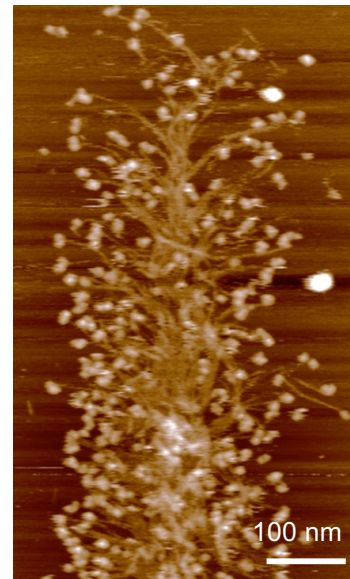


Fázis kontraszt

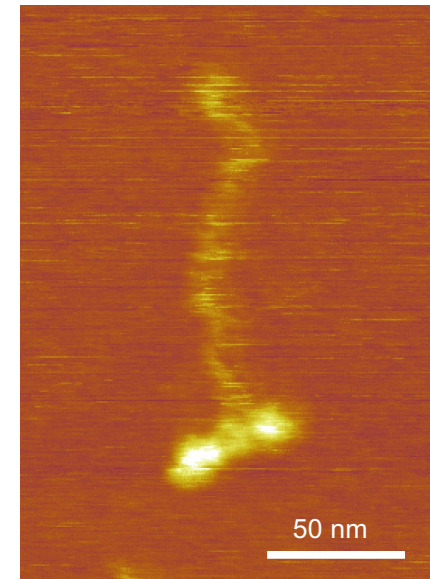
AZ AFM ATOMI-MOLEKULÁRIS FELBONTÁSSAL RENDELKEZIK



Csillám atomi szerkezete



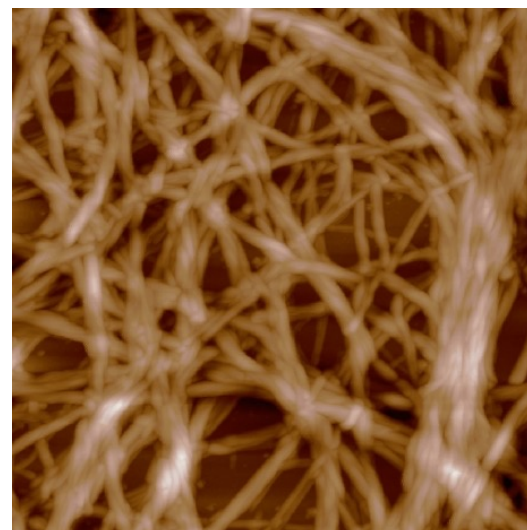
Miozin filamentum



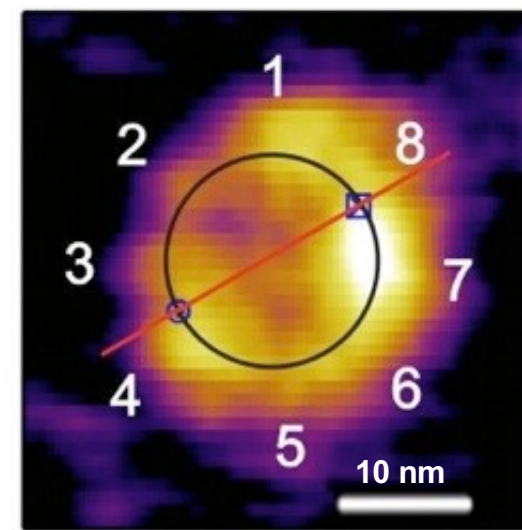
Miozinmolekula



Dezmin filamentum

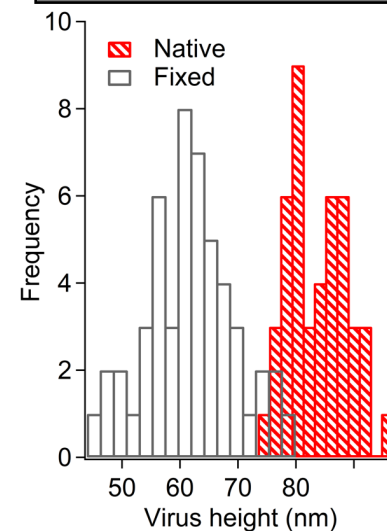
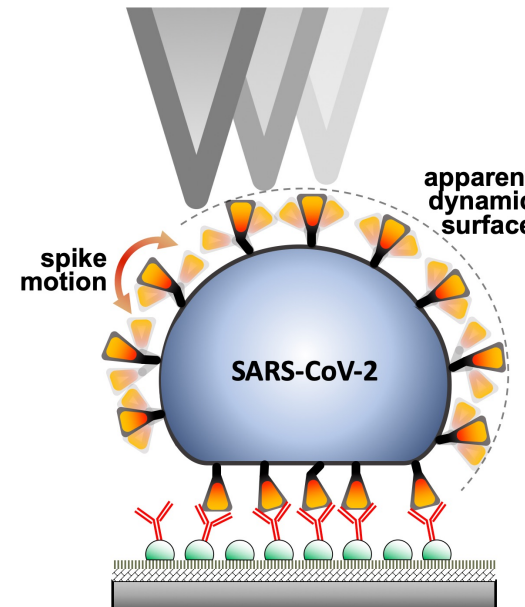
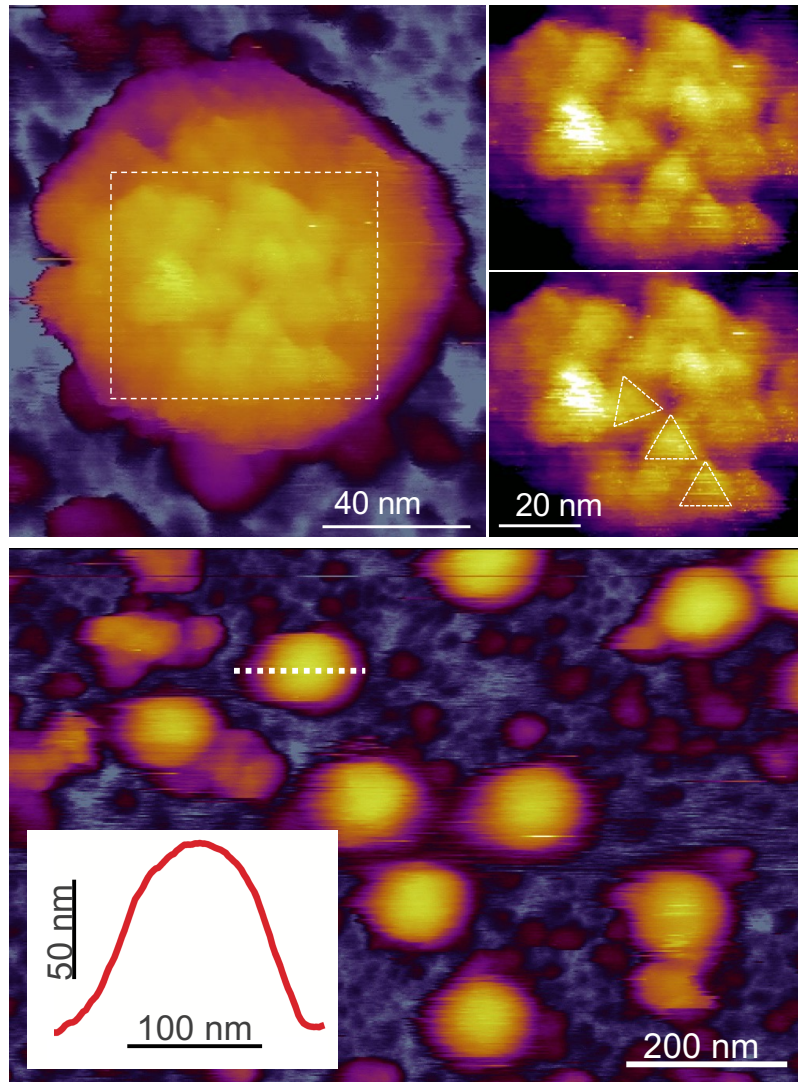


Amiloid β 1-40 fibrillumok

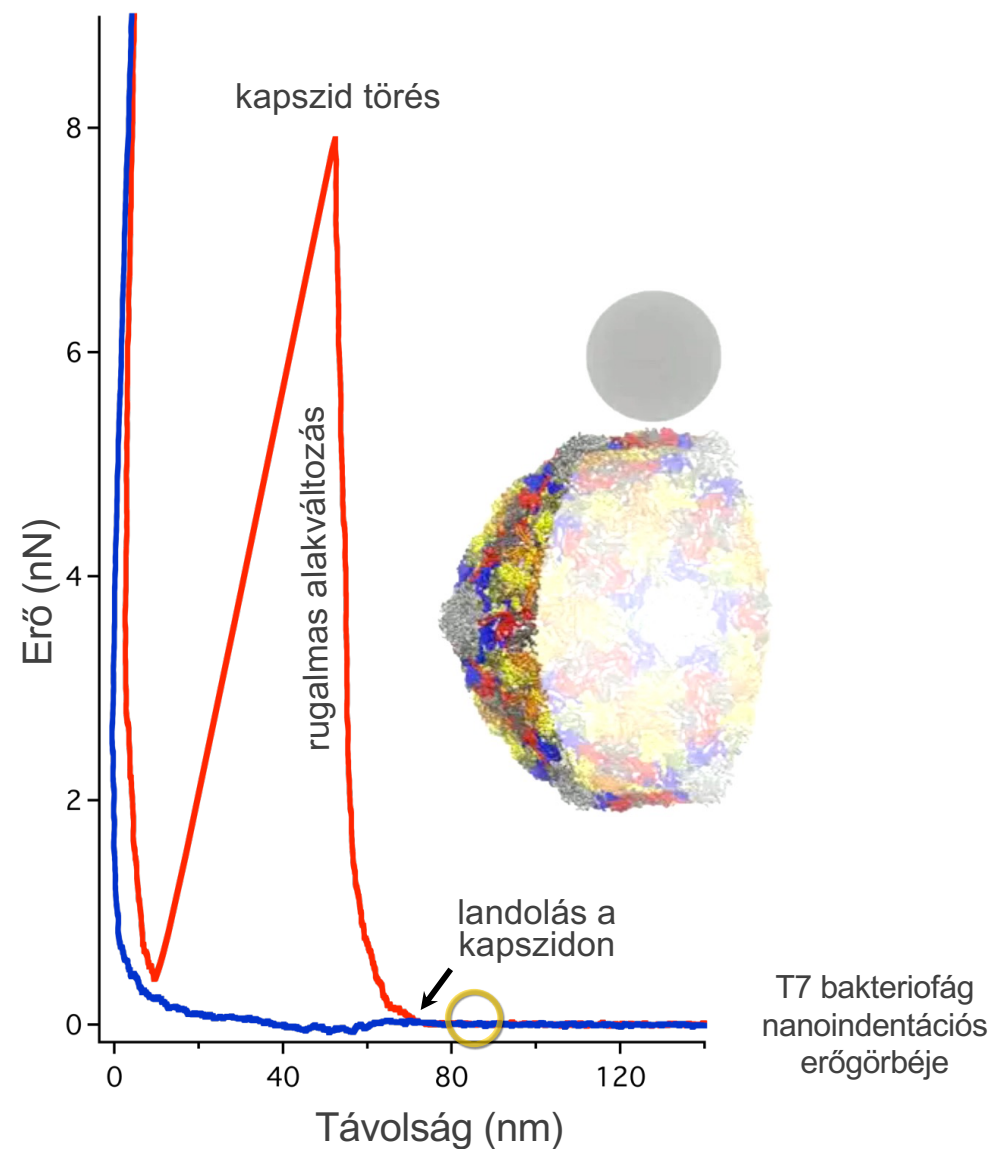


TTR gyűrű oligomer

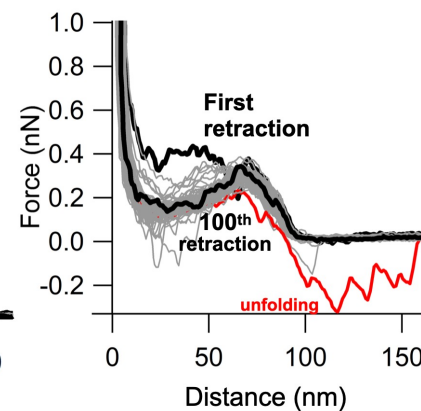
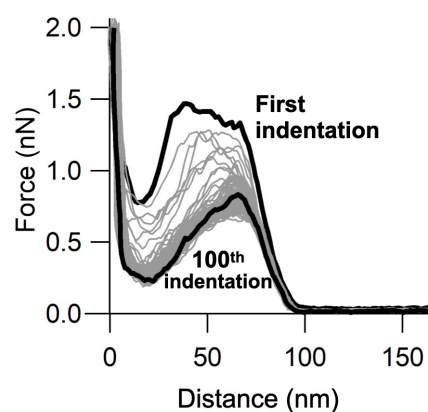
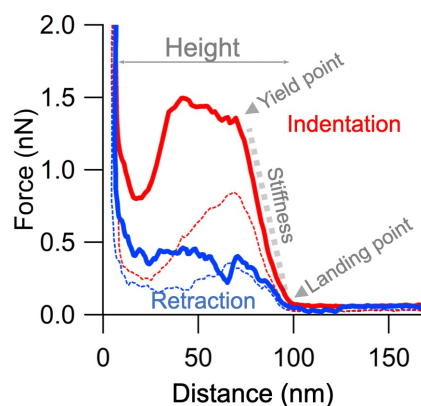
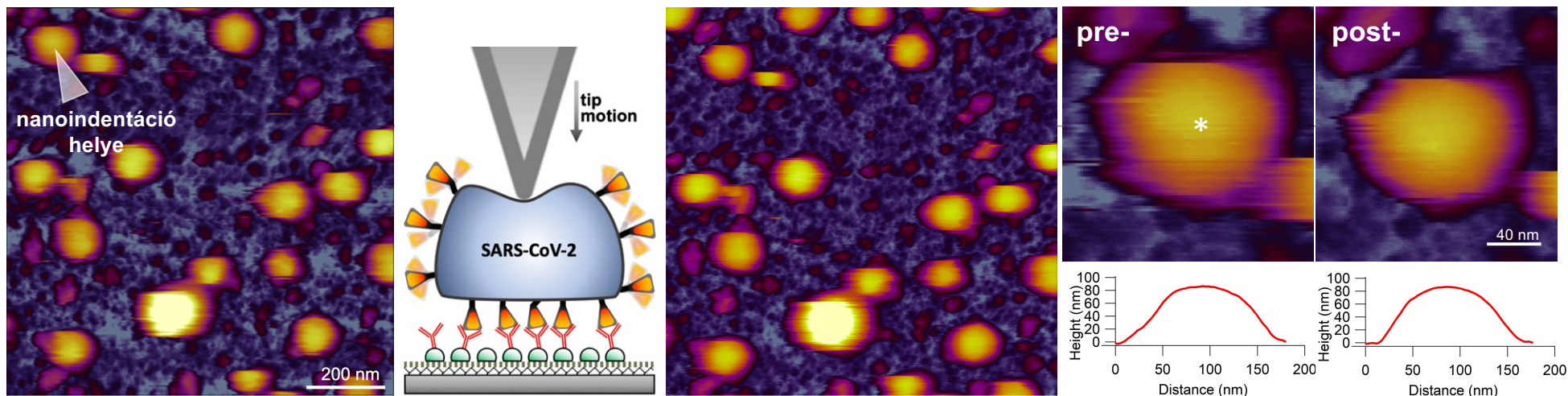
AZ AFM ALKALMAS A VÍRUSSZERKEZET MÉRÉSÉRE



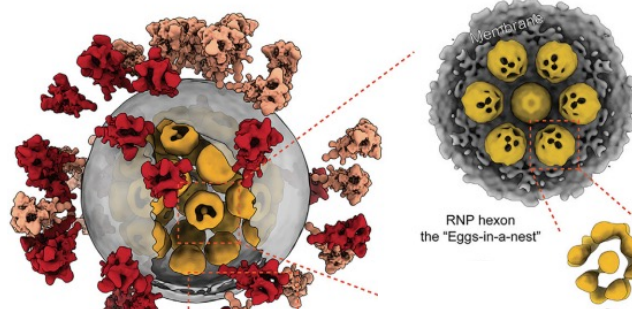
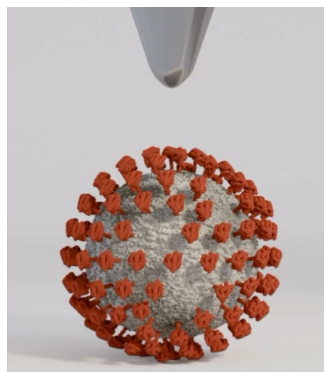
VÍRUS MECHANIKA FELTÁRZHATÓ AFM NANOINDENTÁCIÓVAL



KORONAVÍRUS NANOMECHANIKA



Gumilabda-szerű viselkedés



Yao, et al. Cell, 2020

Az RNP fészekszerű elrendeződése a SARS-CoV-2 virionban ellenállhat a nanoindentációnak

OMHV



<https://feedback.semmelweis.hu/feedback/pre-show-qr.php?type=feedback&qr=7XR260HGC6VKNIA1>