

Biofizika I

5. Anyagszerkezet: atomok, molekulák, kristályok

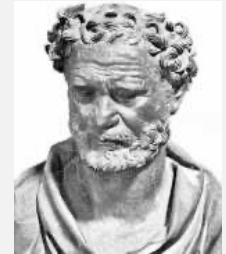
Liliom Károly

2024. 10. 02.

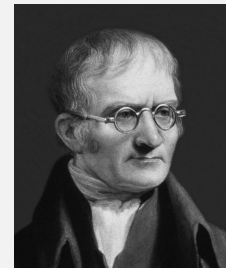
karoly.liliom.mta@gmail.com

Atommodellek fejlődése

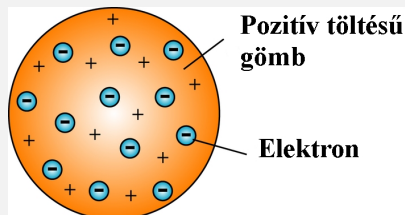
„Csupán hozzánk viszonyítva van édes, keserű, forró és szín, a valóságban csak atomok léteznek és az űr.” Démokritosz i.e. 460-370. Az atomok oszthatatlan örök létezők, súllyal, kiterjedéssel rendelkeznek, alakjukban sokfélék.



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)

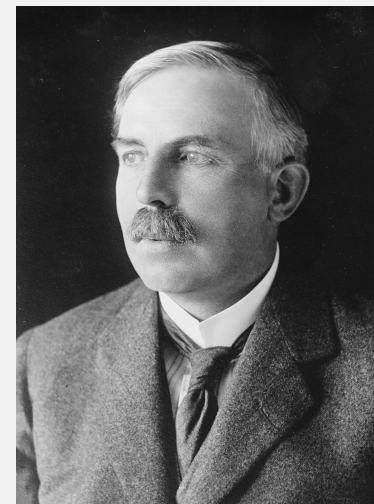
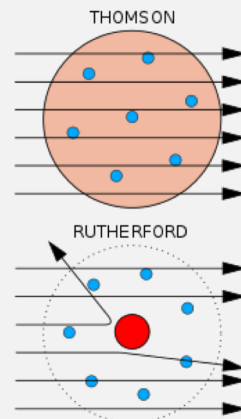
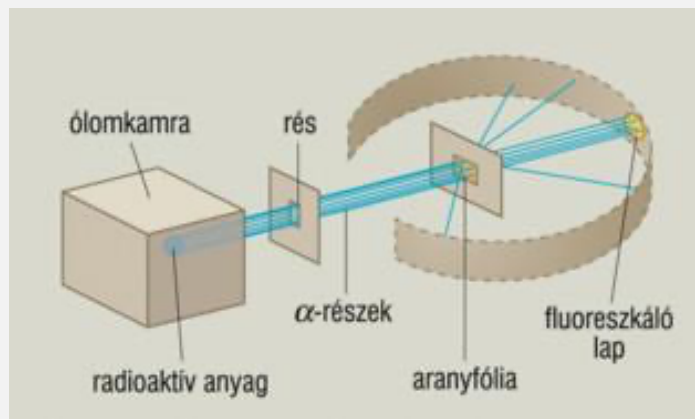


Az elektron felfedezése: Joseph John Thomson (1897, Nobel-díj 1906).
Katódsugár: azonos, kis tömegű részecskék, bármely anyagot is használjuk katódként, tehát ez a részecske minden elem atomjának alkotórésze.



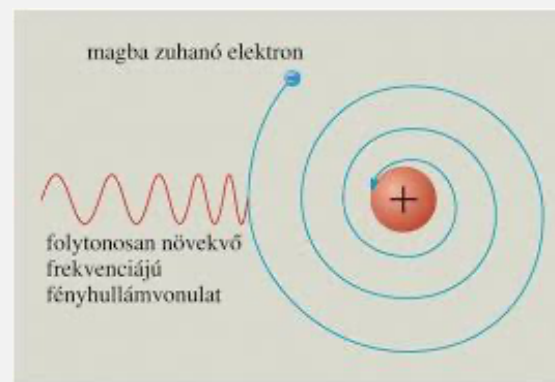
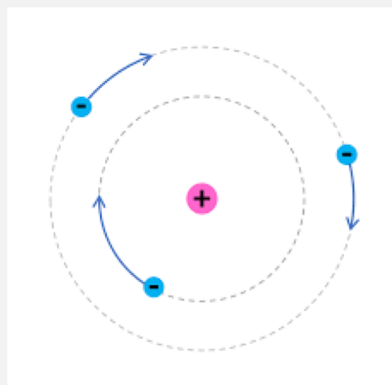
Az atomban egyenletesen oszlik el a tömeg nagyobb, pozitív töltésű része, és abban mozognak a kis tömegű elektronok.
Joseph John Thomson "mazsolás-puding modell" (1904)

Atommodellek fejlődése

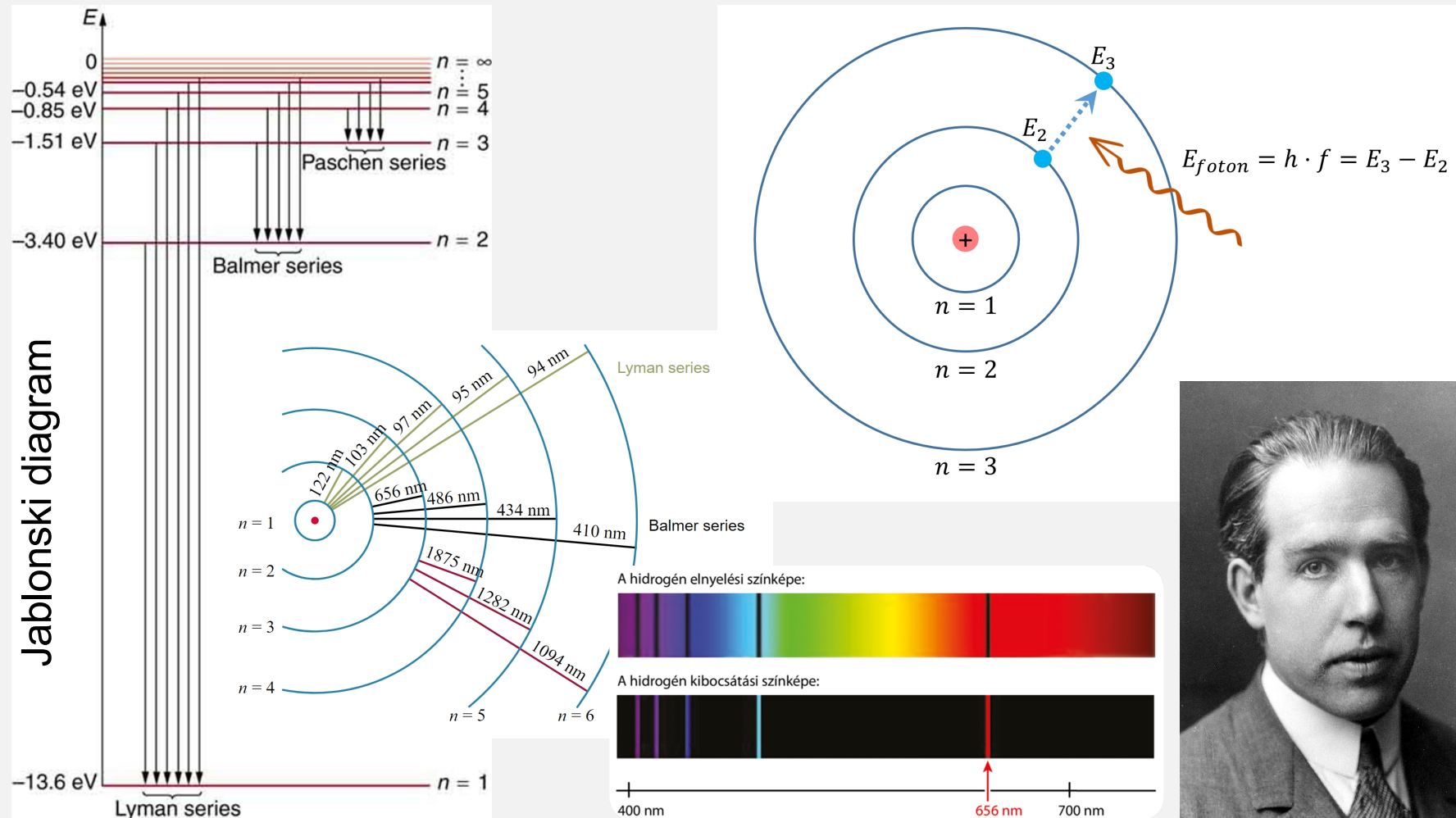


1909-1911: α -részecskék szóródásának mérése

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.

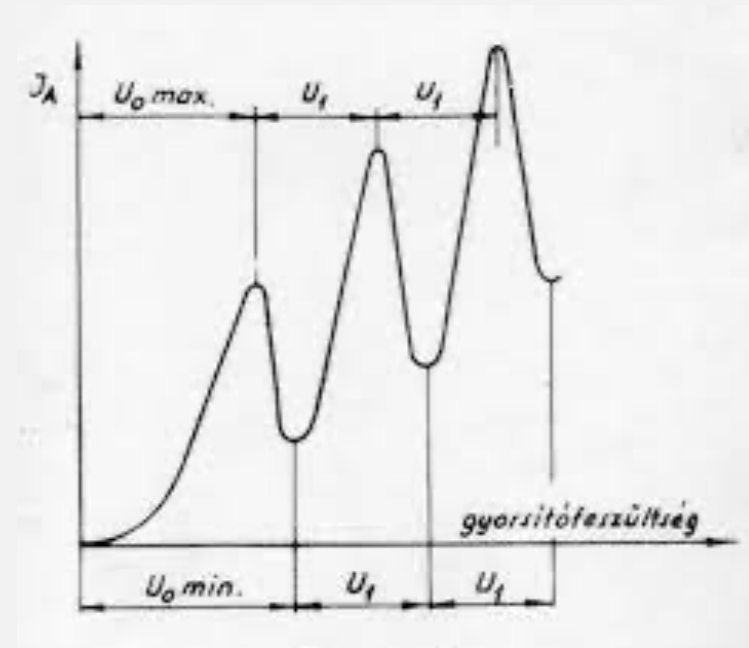
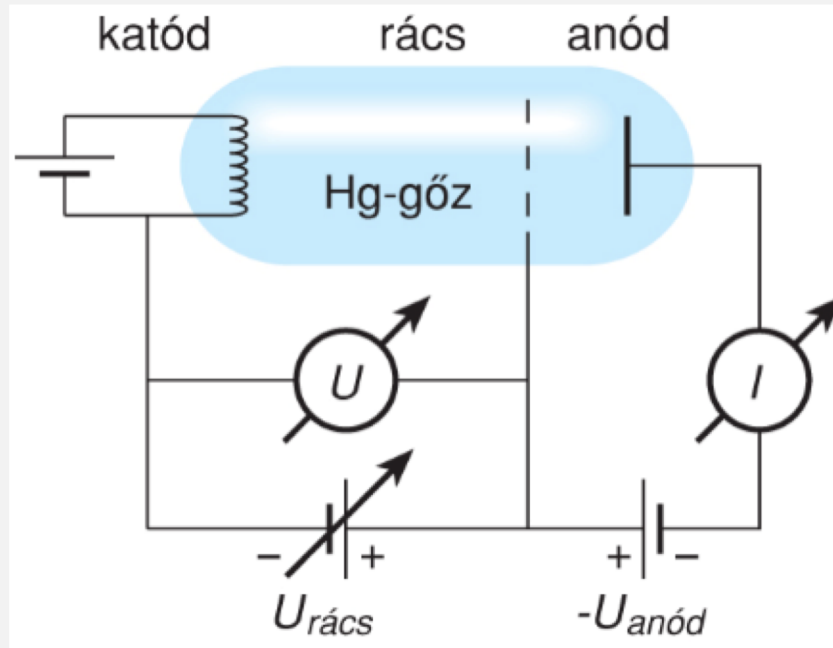


Atommodellek fejlődése



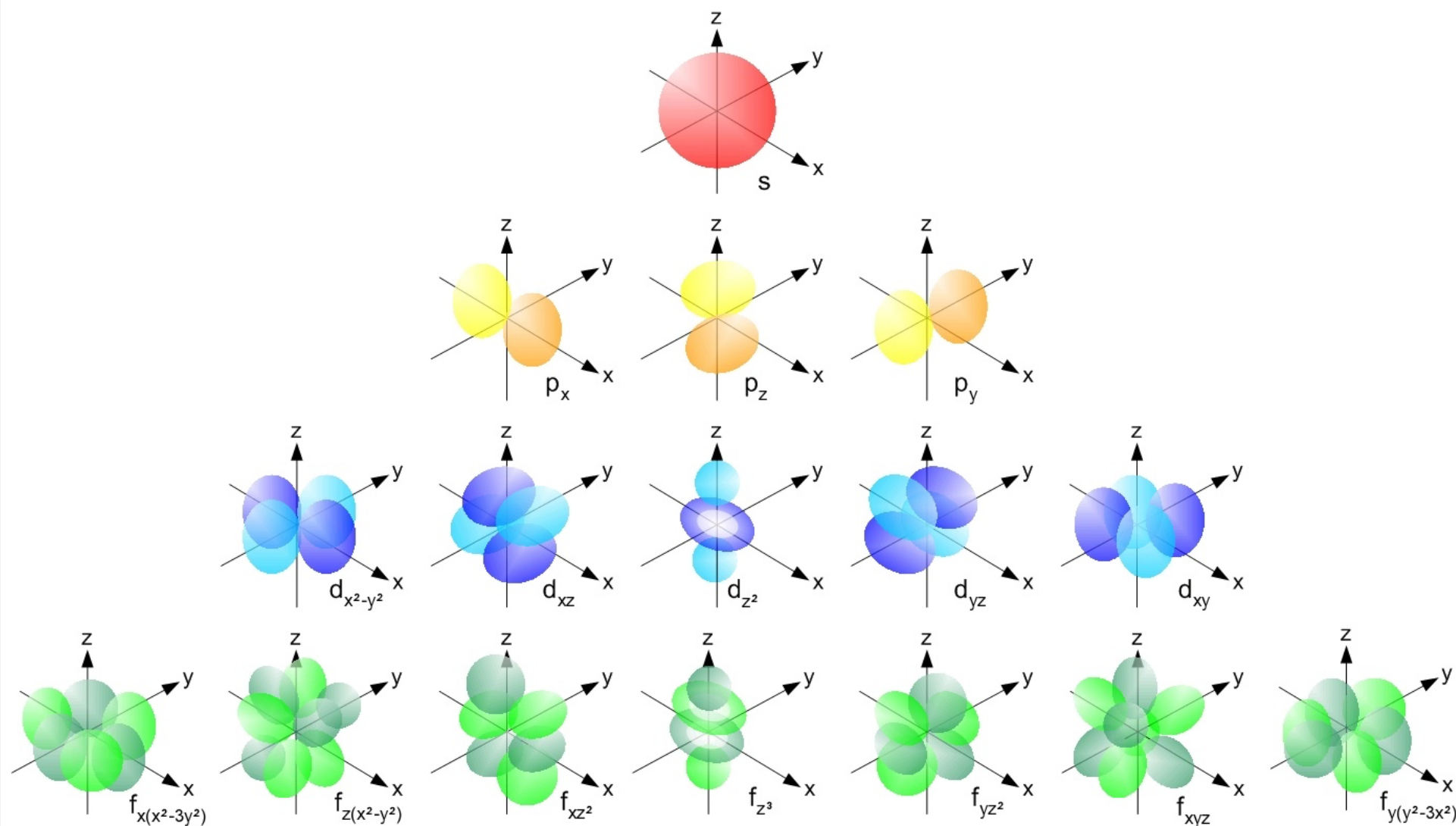
Niels Bohr (1913): Az atomban az elektronok stacionárius pályákon keringenek, nem sugároznak. A stacionárius pályák közötti átmenetek során az elektron a pályák energiakülönbségét kell felvegye, illetve azt sugározza ki. A stacionárius pályákat az elektron impulzusmomentumának kvantálási szabálya határozza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

Franck – Hertz kísérlet (1914)



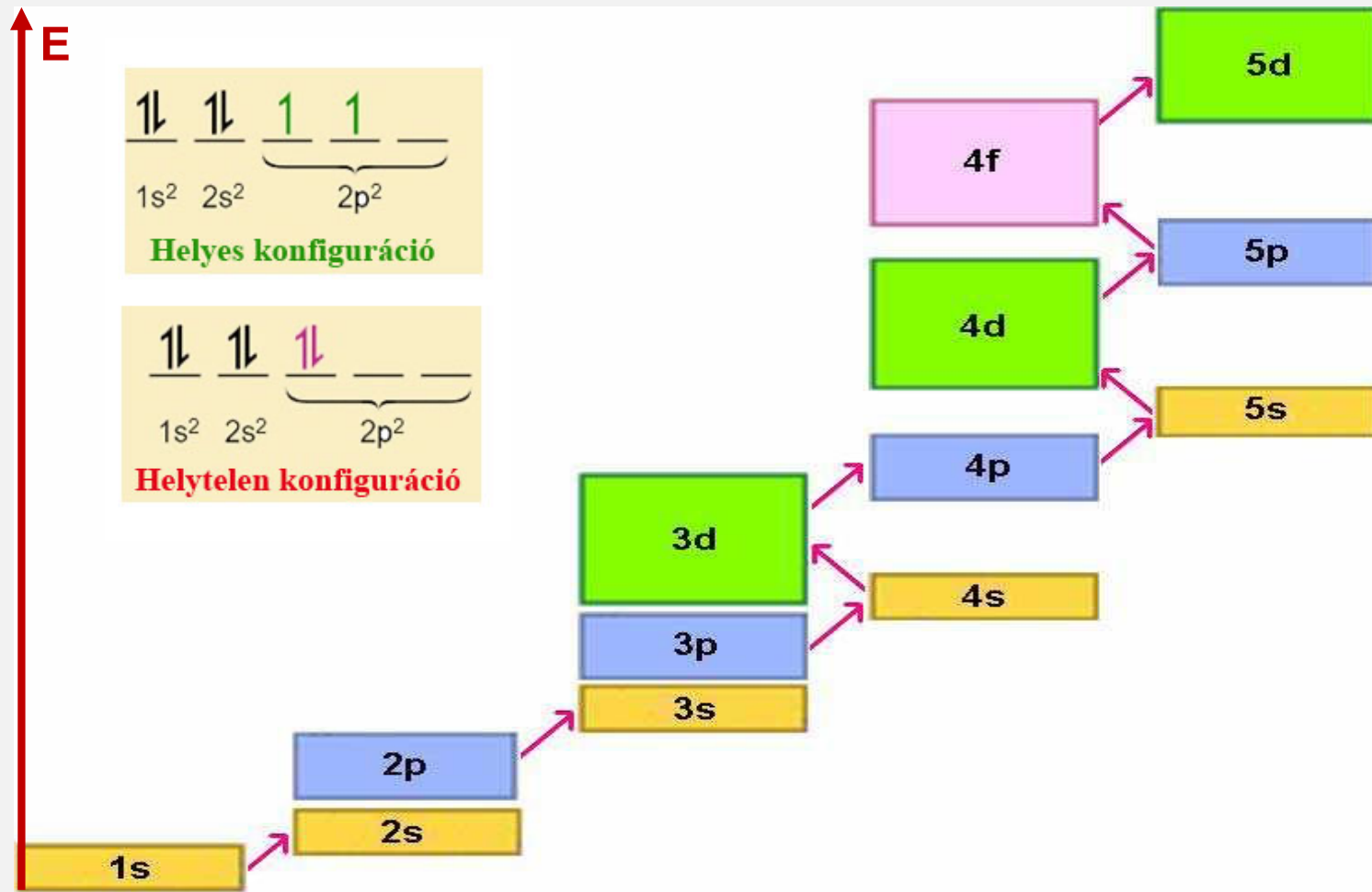
A rácsfeszültség növelésével az elektronok rugalmasan ütköznek a Hg-atomokkal, egészen addig, amíg a rácsfeszültség elegendően nagy értékénél az ütközés rugalmatlan lesz, az elektronok át tudják adni energiájukat a Hg-atomoknak, az energiaveszteség miatt azonban nem érik el az anódot, az anódáram lecsökken. 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-hullámgyenlet
Térben 4 kvantumszám (fő-, mellék-, mágneses- és spin-kvantumszám)

Atommodellek fejlődése



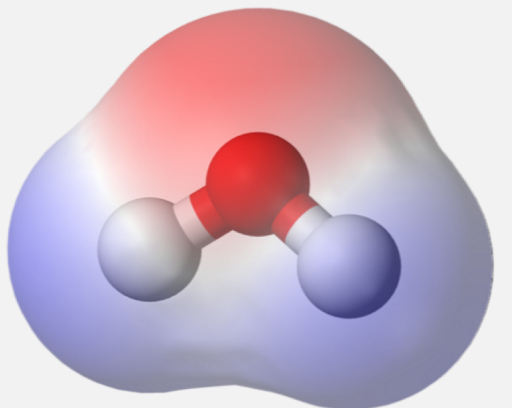
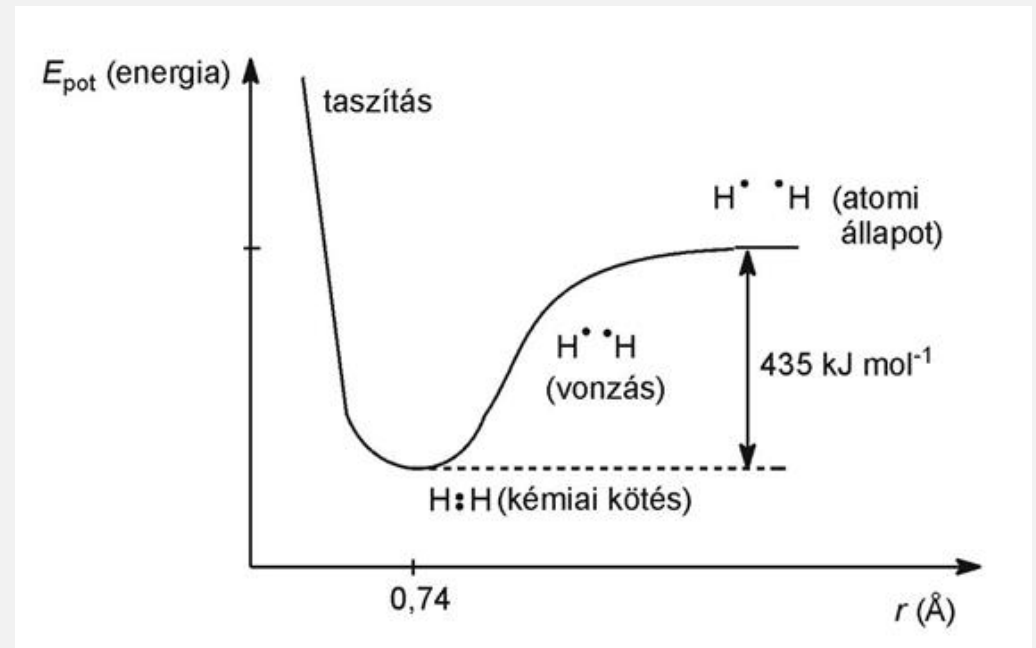
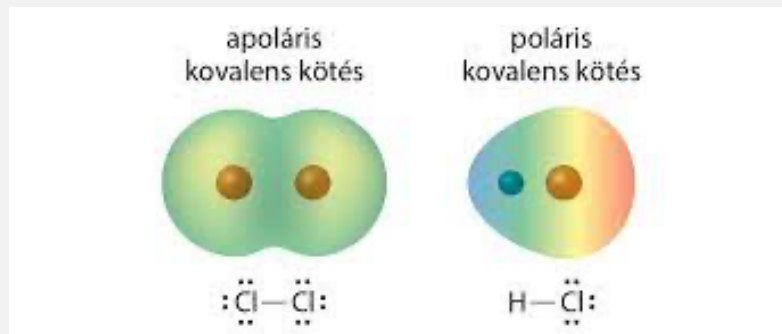
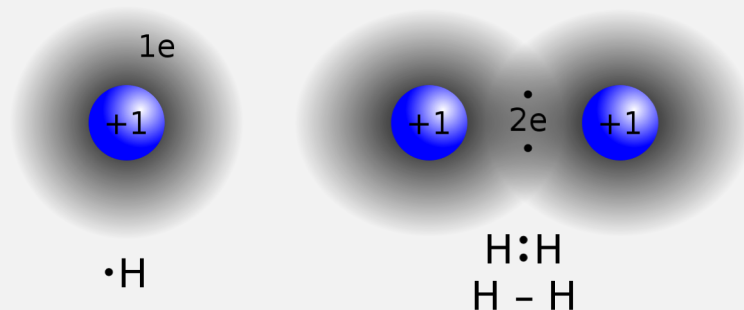
Pauli-elv: több elektront tartalmazó rendszerben mindegyik elektron más kvantumállapotban van – egy atomon belül nem létezhet két olyan elektron, amelyek mind a négy kvantumszáma megegyezik. **Hund-szabály:** adott elektron-konfiguráció mellett a legnagyobb eredő spin-értékű állapotnak van a legalacsonyabb 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	1,01 H 1 Hidrogén		<div>relativ atomtömeg — 26,98</div> <div>vegyjel — Al³₈²</div> <div>rendszám — 13 — az elektronok eloszlása az energiaszinteken</div> <div>Alumínium</div>																													4,00 He 2 Hélium
L 2	6,94 Li 3 Lítium	9,01 Be 4 Berillium																	10,81 B 5 Bór	12,01 C 6 Szén	14,01 N 7 Nitrogén	16,00 O 8 Oxigén	19,00 F 9 Fluor	20,18 Ne 10 Neon								
M 3	22,99 Na 11 Nátrium	24,31 Mg 12 Magnézium																	26,98 Al 13 Alumínium	28,09 Si 14 Szilícium	30,97 P 15 Foszfor	32,07 S 16 Kén	35,45 Cl 17 Klór	39,95 Ar 18 Argon								
N 4	39,10 K 19 Kálium	40,08 Ca 20 Kalcium	d-elemek III IV V VI VII VIII VIII I II																69,72 Ga 31 Gallium	72,59 Ge 32 Germánium	74,92 As 33 Arzén	78,96 Se 34 Szelén	79,90 Br 35 Bróm	83,80 Kr 36 Kripton								
			44,96 Sc 21 Szkandium	47,90 Ti 22 Titán	50,94 V 23 Vanádium	52,00 Cr 24 Króm	54,94 Mn 25 Mangán	55,85 Fe 26 Vas	58,93 Co 27 Kobalt	58,71 Ni 28 Nikkel	63,55 Cu 29 Réz	65,39 Zn 30 Cink																				
O 5	85,47 Rb 37 Rubídium	87,62 Sr 38 Stroncium	88,91 Y 39 Ittrium	91,22 Zr 40 Cirkónium	92,91 Nb 41 Nióbium	95,94 Mo 42 Molibdén	98,91 Tc 43 Technécium	101,07 Ru 44 Ruténium	102,91 Rh 45 Ródium	106,4 Pd 46 Palládium	107,87 Ag 47 Ezüst	112,41 Cd 48 Kadmium	114,82 In 49 Indium	118,71 Sn 50 Ón	121,75 Sb 51 Antimon	127,60 Te 52 Tellúr	126,90 I 53 Jód	131,30 Xe 54 Xenon														
P 6	132,91 Cs 55 Cézium	137,33 Ba 56 Bárium	57-71	178,49 Hf 72 Háfnium	180,95 Ta 73 Tantál	183,85 W 74 Volfrám	186,21 Re 75 Rénium	190,2 Os 76 Ozmium	192,22 Ir 77 Iridium	195,09 Pt 78 Platina	196,97 Au 79 Arany	200,59 Hg 80 Higány	204,37 Tl 81 Tallium	207,2 Pb 82 Ólom	208,98 Bi 83 Bizmut	209 Po 84 Polónium	210 At 85 Asztácium	222 Rn 86 Radon														
Q 7	223 Fr 87 Francium	226,03 Ra 88 Rádium	89-103	261 Rf 104 Rátherfordium	262 Ha 105 Hanium	263 Unh 106 Unnihexium	262 Uns 107 Unnilseptium	265 Uno 108 Unniloctium	266 Une 109 Unnilennium	*Az elemek ideiglenes elnevezése –104 Rf–Ratherfordium – 104 Ku–Kurtschatovium –105 Ha–Hanium – 105 Ns–Nielsbohrium																						
			f-elemek																													
LANTANOIDÁK			138,91 La 57 Lantán	140,12 Ce 58 Cérium	140,91 Pr 59 Praezodimium	144,24 Nd 60 Neodimium	145 Pm 61 Promethium	150,4 Sm 62 Szamárium	151,96 Eu 63 Europium	157,25 Gd 64 Gadolínium	158,93 Tb 65 Terbium	162,50 Dy 66 Diszprózium	164,93 Ho 67 Holmium	167,26 Er 68 Erbium	168,93 Tm 69 Túlium	173,04 Yb 70 Ítterbium	174,97 Lu 71 Lutécium															
AKTINOIDÁK			227,03 Ac 89 Aktínium	232,04 Th 90 Tórium	231,04 Pa 91 Protaktínium	238,03 U 92 Urán	237,05 Np 93 Neptúnium	244 Pu 94 Plutónium	243 Am 95 Americium	247 Cm 96 Kúrium	247 Bk 97 Berkélium	251 Cf 98 Kalifornium	254 Es 99 Einsteinium	257 Fm 100 Fermium	258 Md 101 Mendelévium	259 No 102 Nobélium	260 Lr 103 Laurencium															

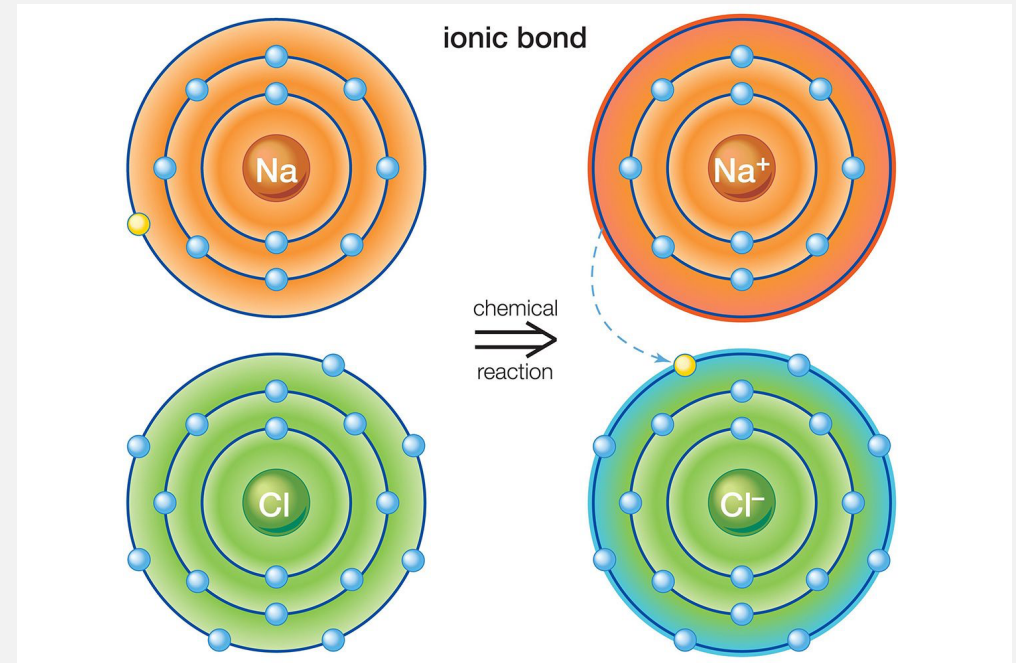
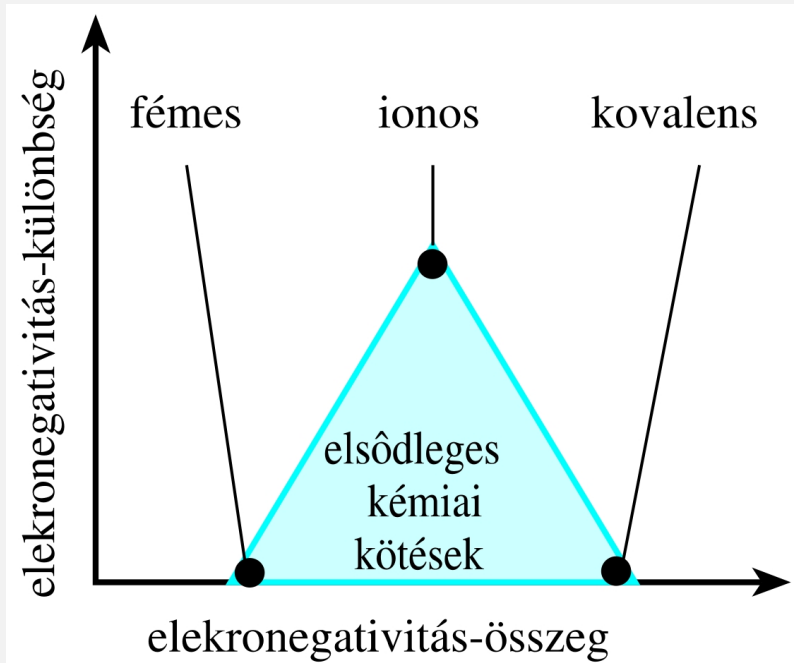
Vegyértékelektronok: a legnagyobb főkvantumszámú héj s és p állapotú elektronjai.

Elsődleges kémiai kötések



Kovalens kötés: molekulapályák alakulnak ki a vegyértékelektronok 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



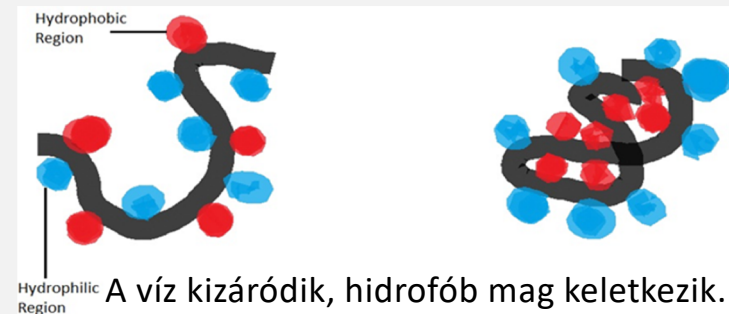
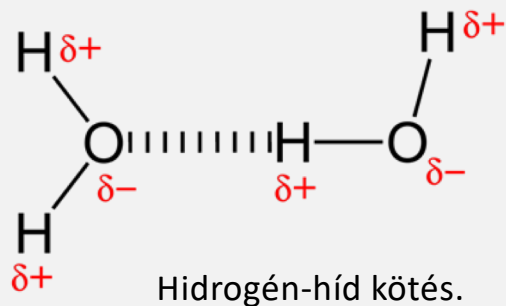
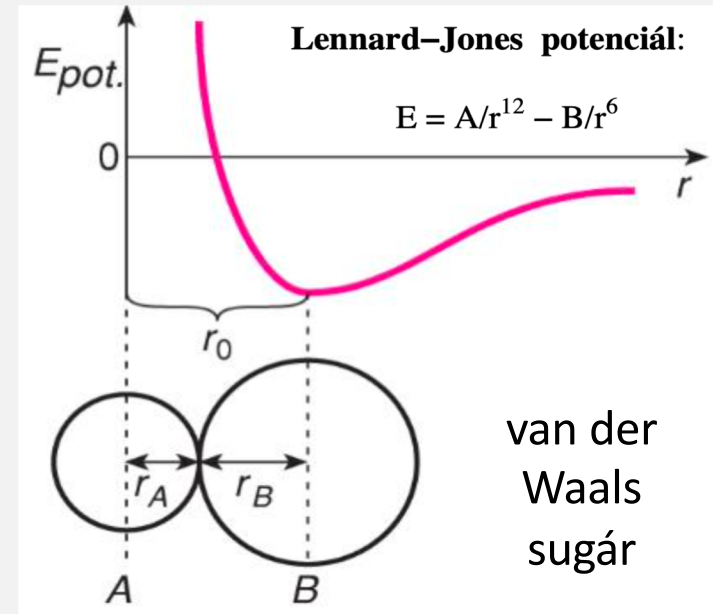
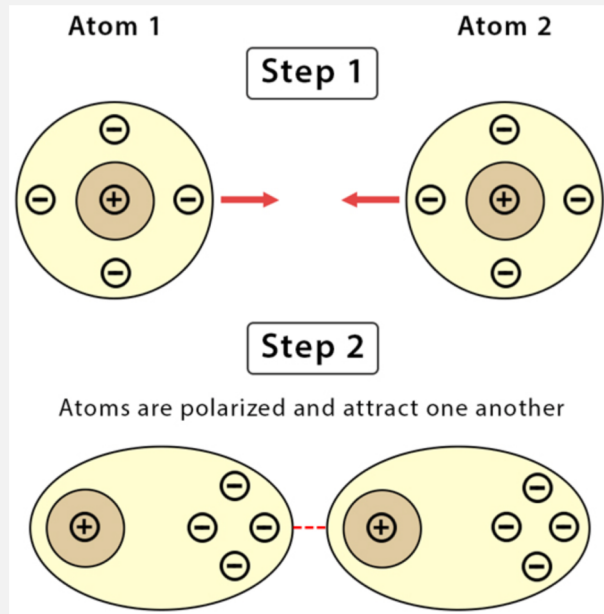
Elektronegativitás (Linus Pauling): a semleges atomból előállított pozitív, illetve negatív ionok létrehozásához szükséges energiák abszolút értékeinek összege.

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

Fémek 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

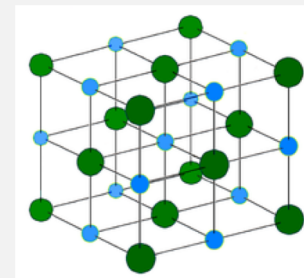
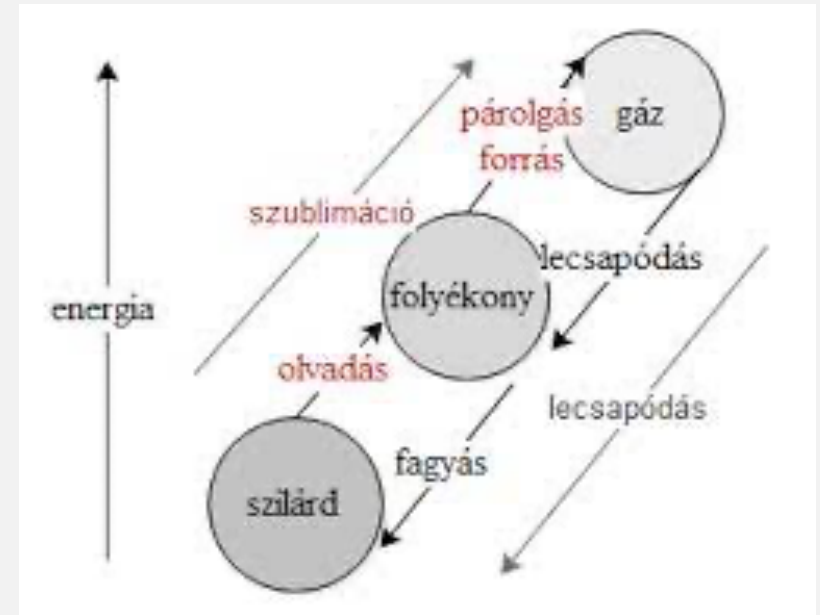


Halmazállapotok

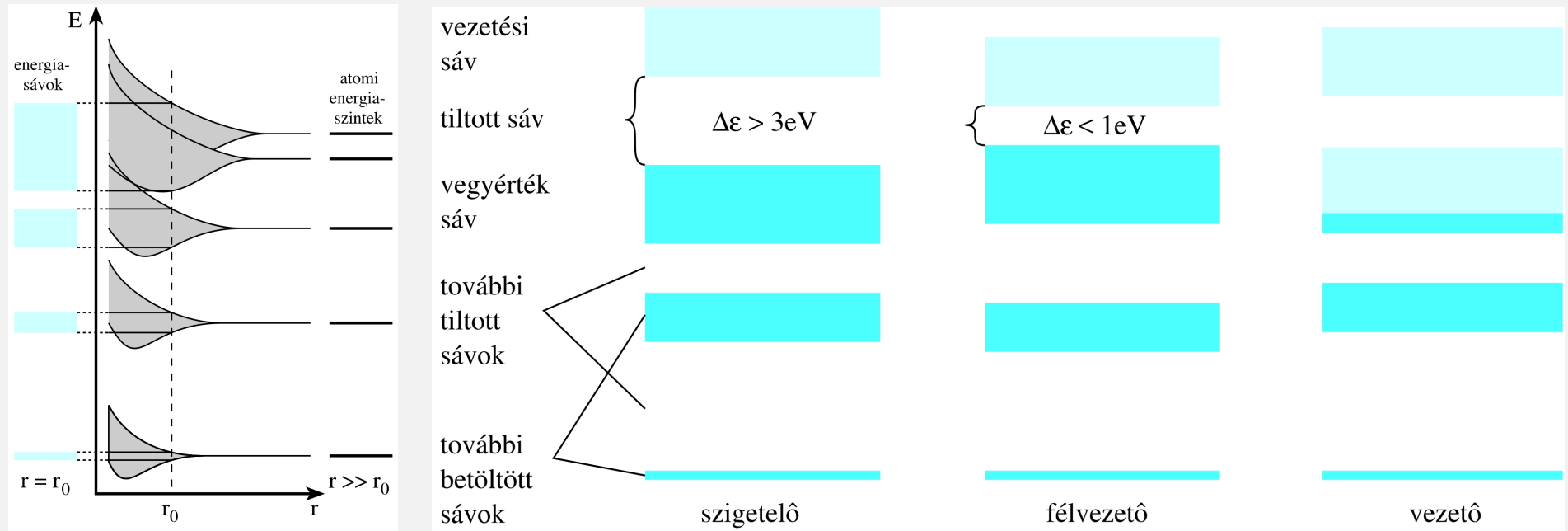
Gáz (légnemű): a gázcsepscék között ideális esetben nincs kölcsönhatás, csak rugalmasan ütköznek egymással és az edény falával.

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.



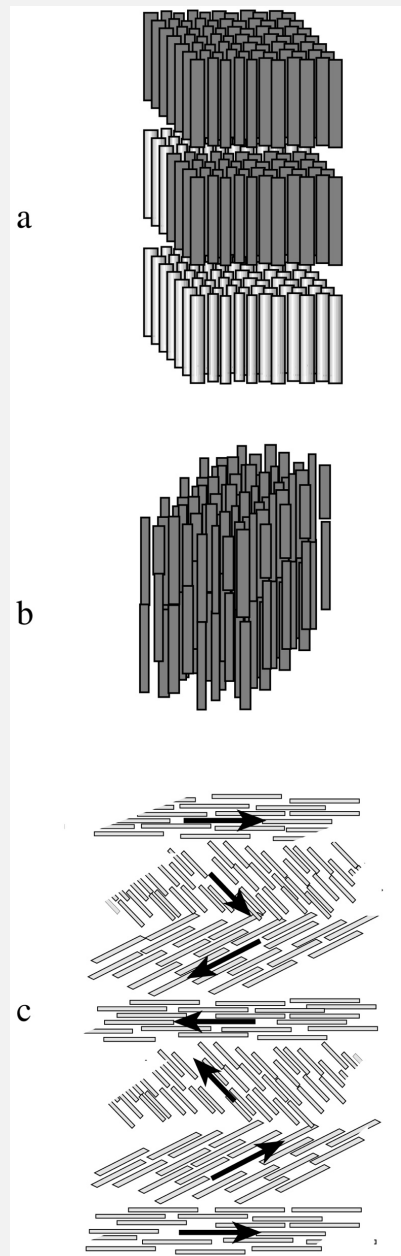
Kristályos anyagok sávszerkezete



Ha vegyértéksáv betöltött és a tiltott sáv széles ($>3\text{ eV}$), akkor az elektronok nem jutnak fel a vezetési sávba, a kristály szigetelő. Ha a tiltott sáv keskenyebb ($\sim 1\text{ eV}$), 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 ($>3,1\text{ eV}$), mint a látható fény fotonenergiája ($1,5\text{--}3,1\text{ eV}$), 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

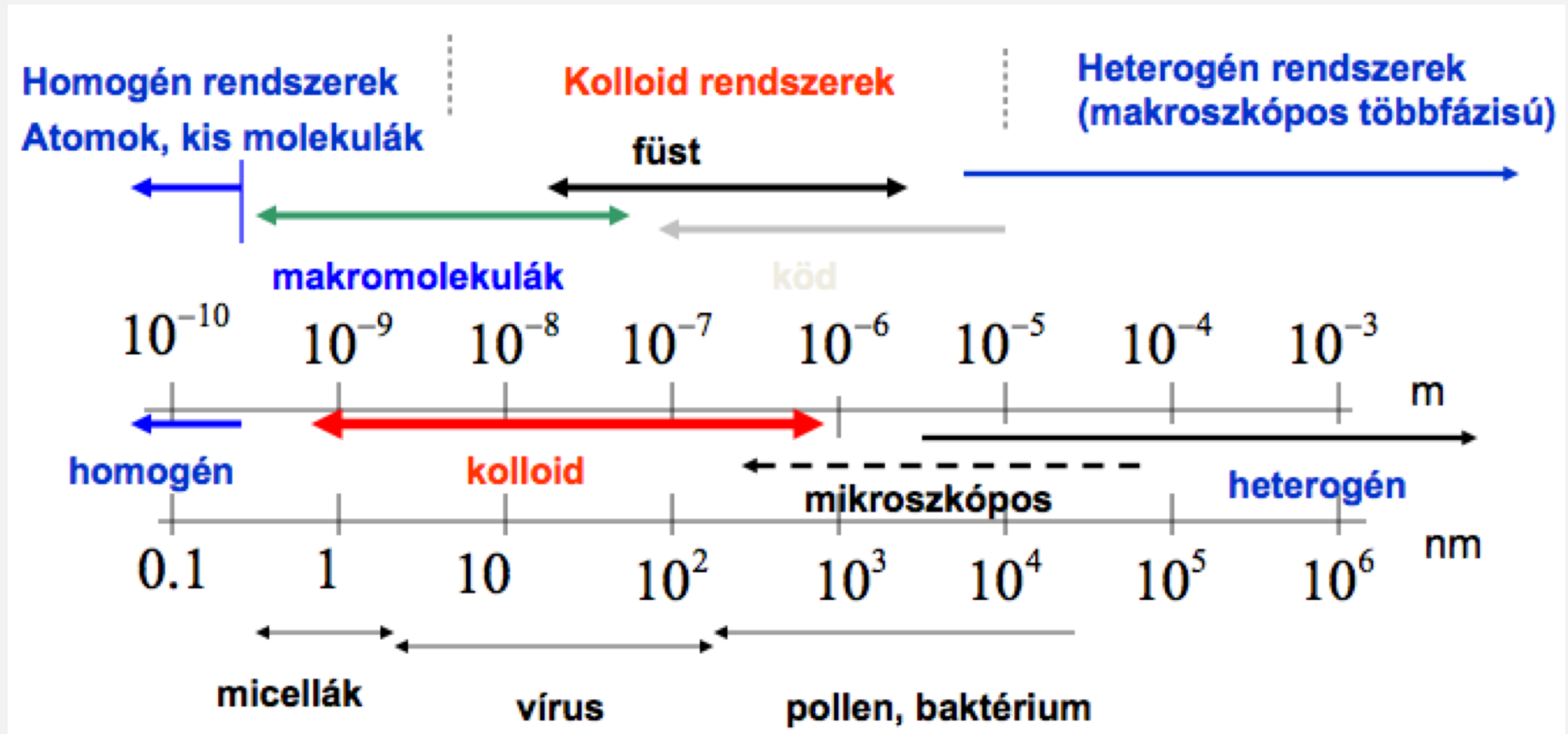
Két vagy több komponensből álló keverék két szélső állapotot vehet fel:

- 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.

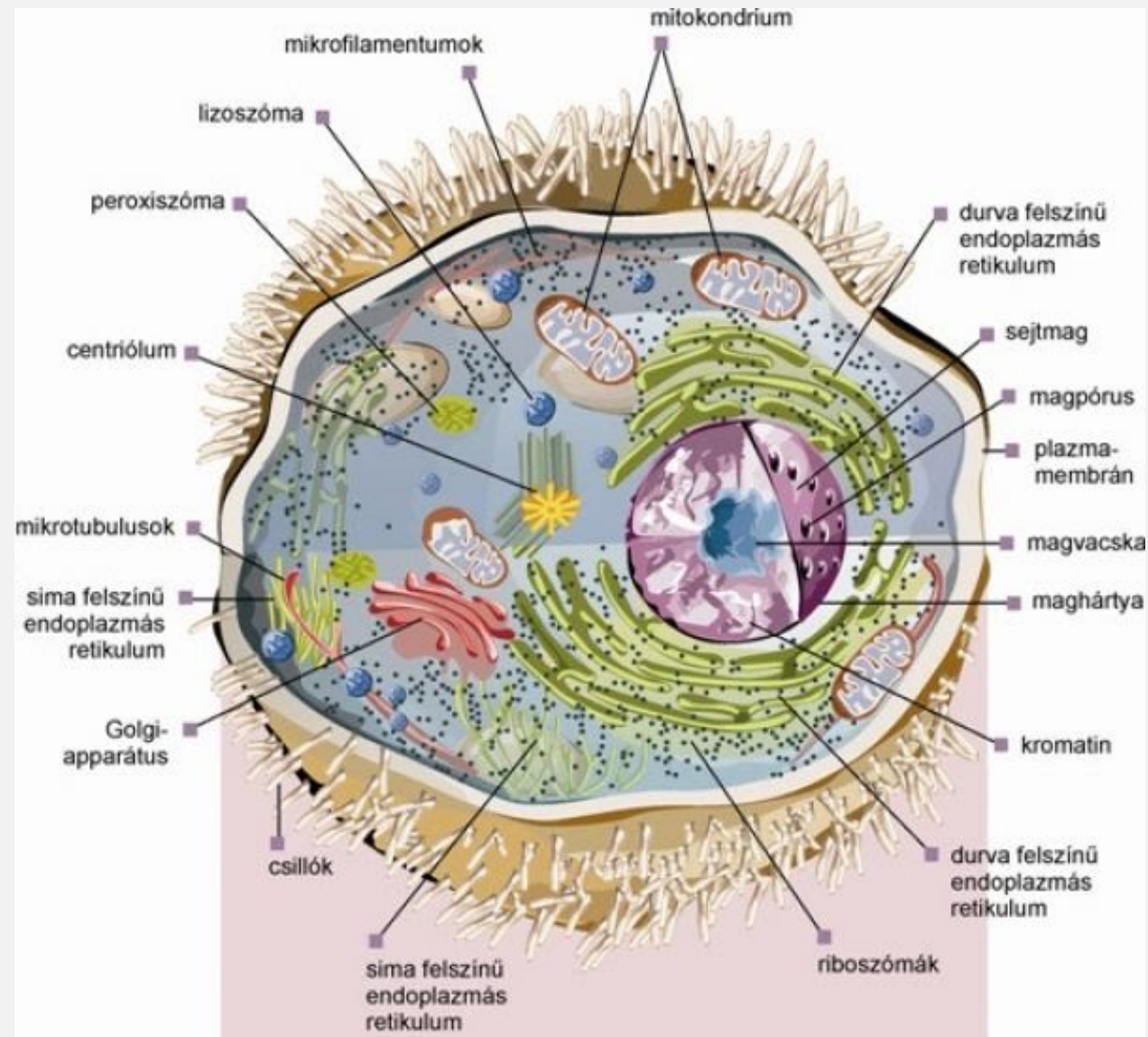
Biológiában fontos kolloidok: makromolekulás kolloidok (fehérjék, poliszaharidok) és asszociációs kolloidok (sejtmembrán).

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	