

Anyagszerkezet, anyaghullám, atomi illetve molekuláris kölcsönhatások.

Példaként: Atomi erő mikroszkópia (AFM) és makroszkopikus modellje.

Kiss Balázs

kissb3@gmail.com



Nanobiotechnológia és Egyedi Molekula Kutatócsoport,
Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

2014. október 8.

Előadásvázlat

- atommodellek
- alapvető kölcsönhatások a fizikában
- atomszerkezet
- az elektron kettős természete
- szabad elektron terjedése
- kötött állapotú elektron
- atomi kölcsönhatások
 - elsődleges kötések
 - másodlagos kötések
- atomi erő mikroszkópia (AFM)
 - üzemmódok
 - pásztázás, képalkotás

Releváns kollokviumi tételek

8. A részecske-hullám kettősség bizonyítása az elektron esetében. Anyaghullámok szabad és kötött állapotban.

9. Az atomi és molekuláris kölcsönhatások általános leírása.

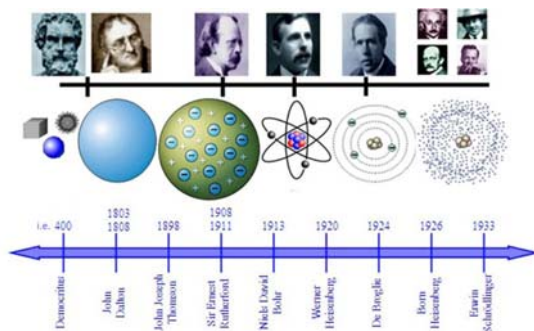
10. Az atomi erő mikroszkópia (AFM) alapelve, működési módjai, alkalmazási lehetőségei.

2

Atommodellek

TK. 23-37. oldal

- **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

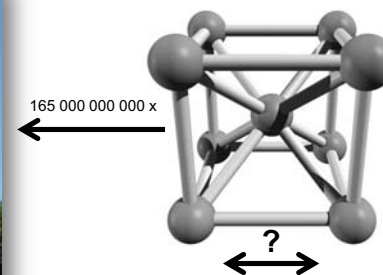


3

Hogyan jöhetnek létre stabil szerkezetek?



makroszkopikus méretskála: Atomium



nanovilág: Fe tércentrált köbös kristályrácsa

Általános vezérlő elv:

következmény: RENDEZETLENSÉG **taszító kölcsönhatás** \longleftrightarrow **vonzó kölcsönhatás** **RENDEZETTSÉG**

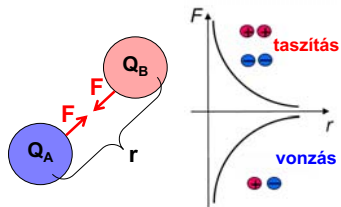
4

Alapvető kölcsönhatások a fizikában

Kölcsönhatás	Mire hat?	Hatótávolság (m)	Relatív erősség
gravitáció	minden részecskére	végtelen ($\sim 1/r^2$)	10^{-40}
elektromágneses (Coulomb)	elektromosan töltött részecskékre	végtelen ($\sim 1/r^2$)	10^{-2}
erős nukleáris	nukleonokra	10^{-15}	1
gyenge nukleáris	minden részecskére	10^{-18}	10^{-13}

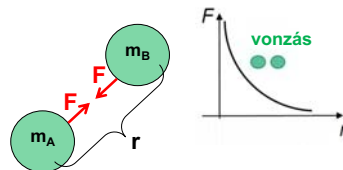
Coulomb-kölcsönhatás

$$F_C = k \cdot \frac{Q_A \cdot Q_B}{r^2} \quad k = 9 \cdot 10^9 \frac{\text{Nm}^2}{\text{C}^2}$$



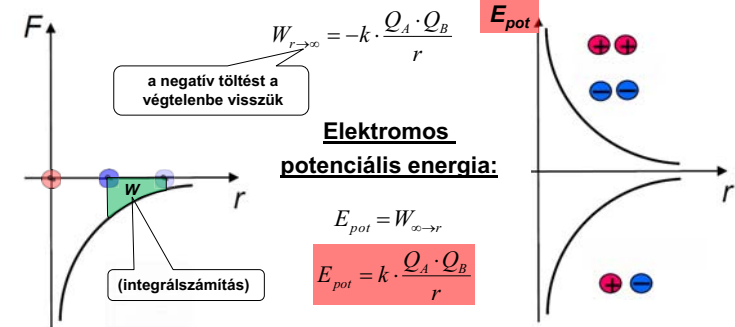
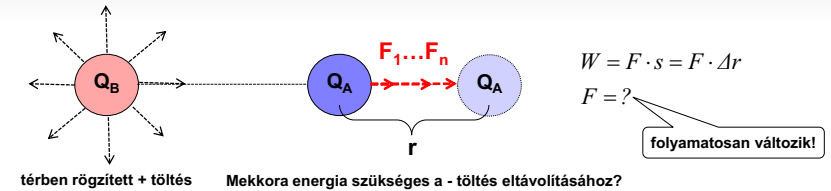
Gravitáció

$$F_g = G \cdot \frac{m_A \cdot m_B}{r^2} \quad G = 6,67 \cdot 10^{-11} \frac{\text{m}^3}{\text{kg} \cdot \text{s}^2}$$



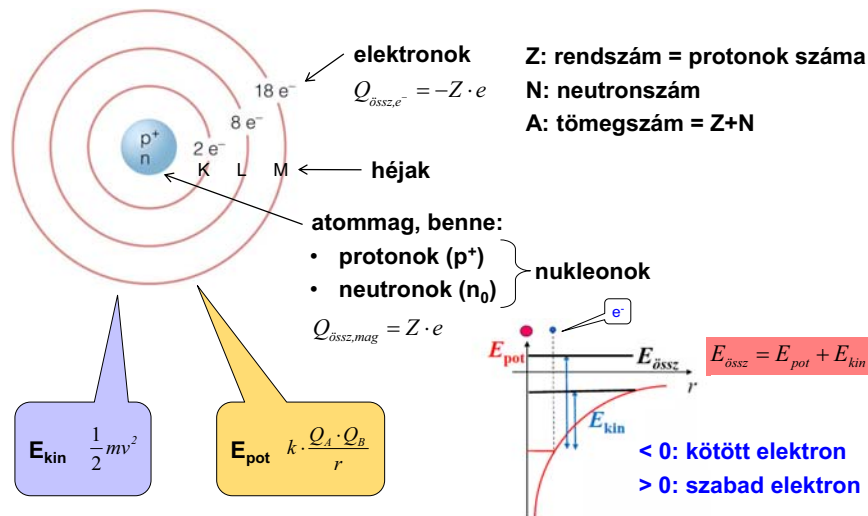
5

Elektromos potenciális energia (E_{pot})



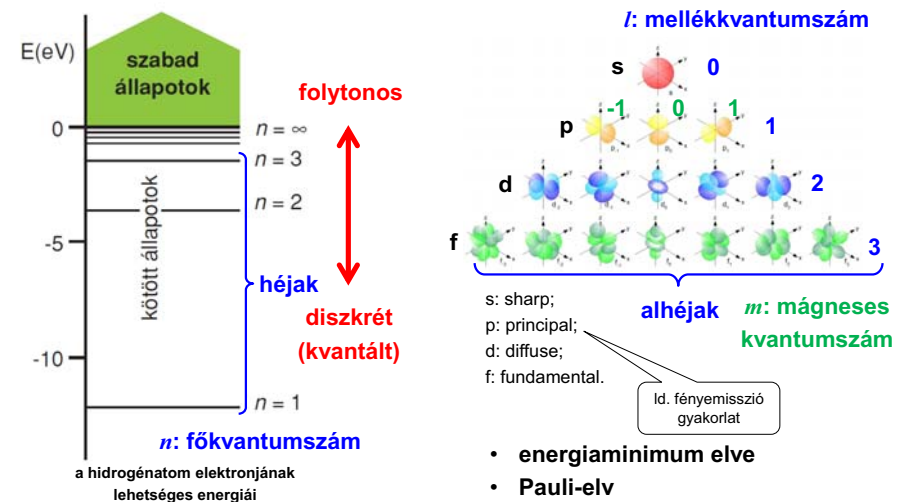
6

Az atom felépítése



7

Az elektron energiaállapotai



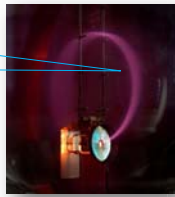
8

Az elektron kettős természete

v.ö.: „fény kettős természete”

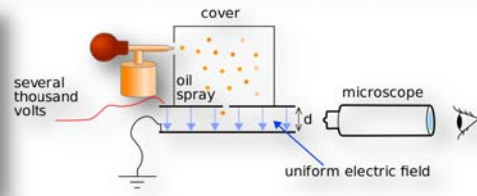
e^- nyaláb
eltérülése
mágneses térben

részecske



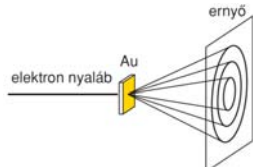
tömeg

(Thomson, 1897; m/e hányados)
 $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg

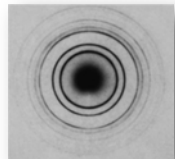


töltés

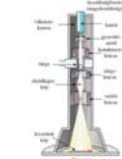
(Millikan, 1910)
 $e = -1,6 \cdot 10^{-19}$ C



Davisson és Germer, 1927



nagy sebességű elektronok
aranyfólián történő elhajlása

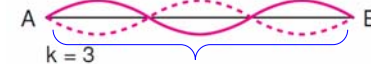


elektronmikroszkóp
(ismétlés)

hullám

9

Az elektron leírása hullámfüggvénnyel



analógia: kifeszített húron kialakuló állóhullámok

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

csak diszkrét
értékeket vehet fel!

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

λ : anyaghullám
hullámhossza



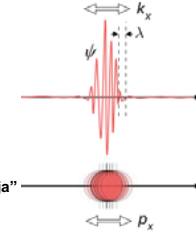
De Broglie, 1923

Elektron állapotfüggvénye:

$$\psi(x, t)$$

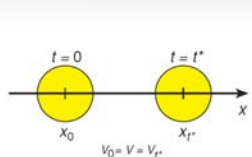
(Schrödinger)

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

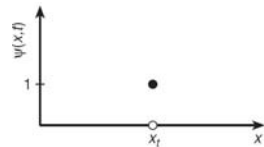


10

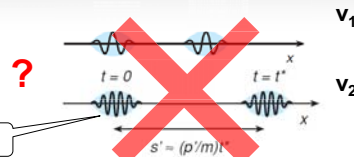
A szabad elektron terjedése



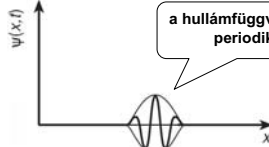
klasszikus tömegpont haladó mozgása



a tömegpont helye egyértelműen megadható



elektron „terjedése” kisebb és nagyobb sebességgel



az elektron állapotfüggvénye

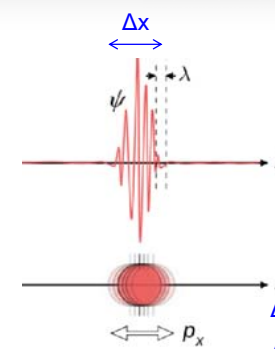
$\psi(x, t)$ a terjedés
közben szétterül



11

A kötött állapotú elektron

az atommag (proton)
erőterében van



torzul az állapotfüggvény

$$\Delta p \sim \Delta(1/\lambda)$$

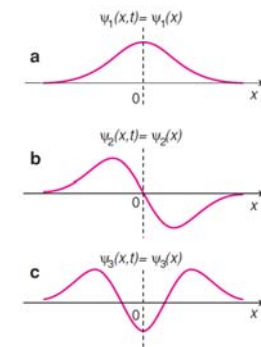
$$\Delta(1/\lambda) \geq 1/\Delta x$$

Heisenberg-féle határozatlansági

reláció: szabad elektron esetén az
impulzus határozatlansága (Δp):

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

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



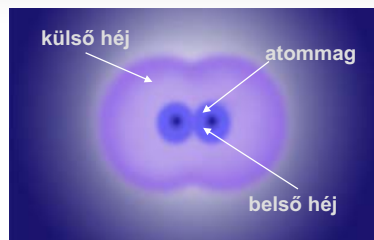
„egydimenziós H-atom”

Δt : bizonytalan, így ΔE nagyon
biztos: diszkrét energiaszintek

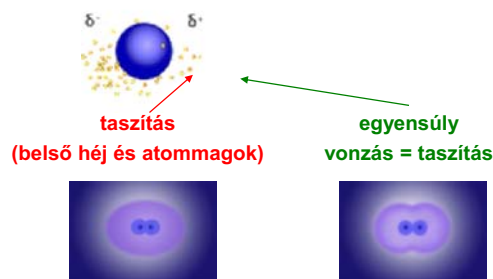
12

Atomi kölcsönhatások

**rövid távú
kölcsönhatás:
atommagok taszítása**
(átfedő elektronfelhő leáryékolja
a vonzást)



**hosszú távú
kölcsönhatás:
Coulomb-vonzás**



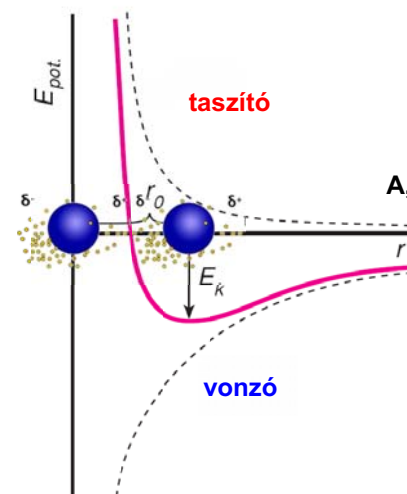
13

Atomi kölcsönhatások

TK. 44. oldal

$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító}$$

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



A, B: kölcsönhatásra jellemző állandók

n (vonzó) < m (taszító)

r_0 : kötéstávolság

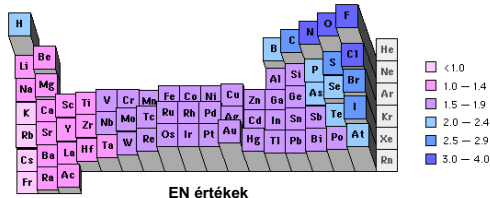
E_k : kötési energia

14

Elsődleges kötések

intramolekuláris erős 2-6 eV/kötés ↔ intermolekuláris gyenge 0,01-0,1 eV/kötés
elsődleges másodlagos

- **kovalens**: közös elektronpályák a részt vevő atommagok körül
- **(fémek kötés: sokatomos rendszer)**
- **elektrosztatikus**
 - **ionos**: Coulomb-erők az ionok között
 - **dipólus jellegű töltéeloszlás**

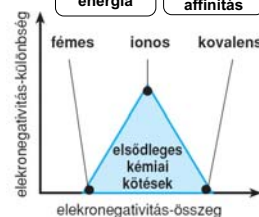


kialakulásuk az
elektronegativitás
függvénye:

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

ionizációs
energia

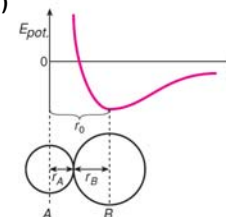
elektron-
affinitás



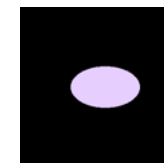
15

Másodlagos kötések 1

- **Van der Waals**: dipólusmomentum nélküli atomok (apoláris)
 - ideiglenesen kialakulhat dipólus, mely egy szomszédos molekulában dipólus kialakulását indukálja (**indukált dipól**)
 - **Van der Waals sugár**: $r_0 = r_A + r_B$



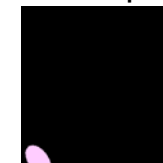
fluktuáció



ion-dipólus



indukált dipólus

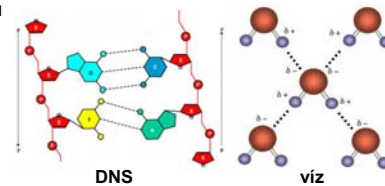


16

Másodlagos kötések 2

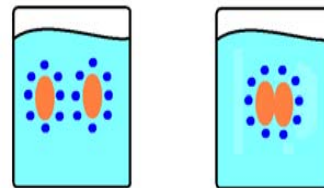
- **H-kötés:** a H-atom 2 nagy elektronegativitású atom (F, O, N) között létesít kapcsolatot

- $r \sim 0,23-0,35 \text{ nm}$
- $E \sim 0,2 \text{ eV}$



- **hidrofób kölcsönhatás:** gyenge Van der Waals kölcsönhatás lehetne, de ezt a hőmozgás felszakítaná ($kT \sim 0,025 \text{ eV}$)!

- rendezett vízmolekulák az apoláris molekula körül (minimális határfelület)



17

Atomerőmikroszkóp (AFM)

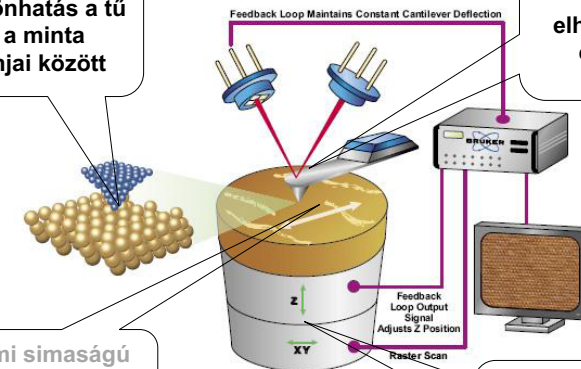
TK. 573. oldal

1. Van der Waals kölcsönhatás a tű és a minta atomjai között

2. egy apró laprugó (rugólapka) elhajlását mérjük egy rávetülő lézerrel

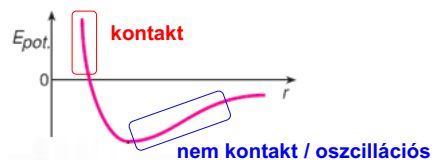
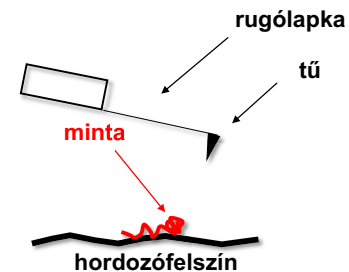
atomi simaságú hordozófelszín (csillám)

3. a mintát (vagy a rugólapkát) X-Y-Z irányokban mozgattunk



18

AFM-üzemmódok



- **kontakt:** a tű hozzáér a mintához; a rugólapka elhajlása a felszín topográfiájára enged következtetni
- **nem kontakt:** a tű a mintától távolabb oszcillál; a rezgési amplitúdó és sajátfrekvencia változik a minta hatására
- **oszcillációs:** a rugólapka a sajátfrekvenciájához közel rezeg; az amplitúdó változik a minta hatására

19

Kontakt üzemmód

alkalmas pl. lágy biológiai minták (sejtek) vizsgálatára

kvadráns fotodióda

lézer

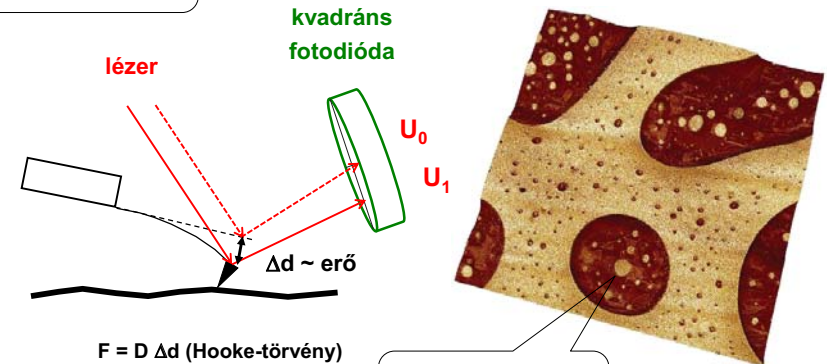
U_0
 U_1

$\Delta d \sim \text{erő}$

$F = D \Delta d$ (Hooke-törvény)

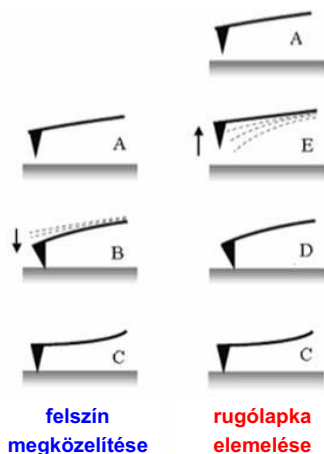
Δd : rugólapka elhajlása
 D : rugóállandó

erőmérés / rugalmasságmérés biológiai mintákon



20

Kontakt üzemmód

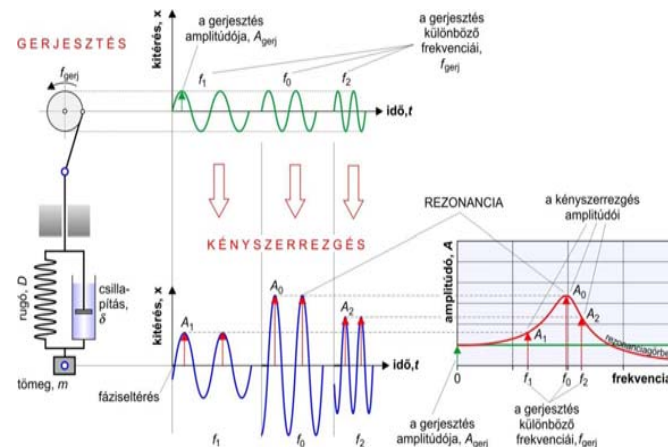


21

Rezonancia gyak.

Oszcillációs üzemmód

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



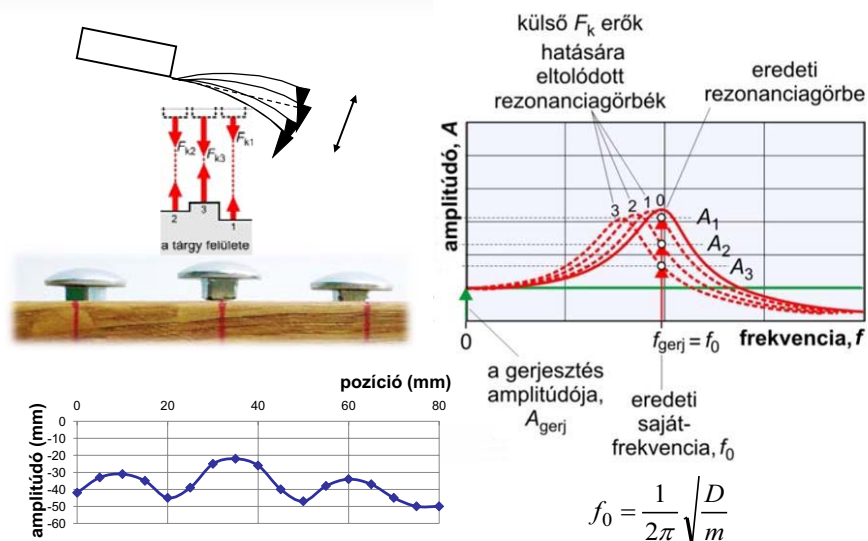
rezonancia az orvostudományban:
(példák)

- fényabszorpció
- MRI: mágneses magrezonanciás képalkotás
- FRET: fluoreszcencia rezonancia energiatranszfer

22

Rezonancia gyak.

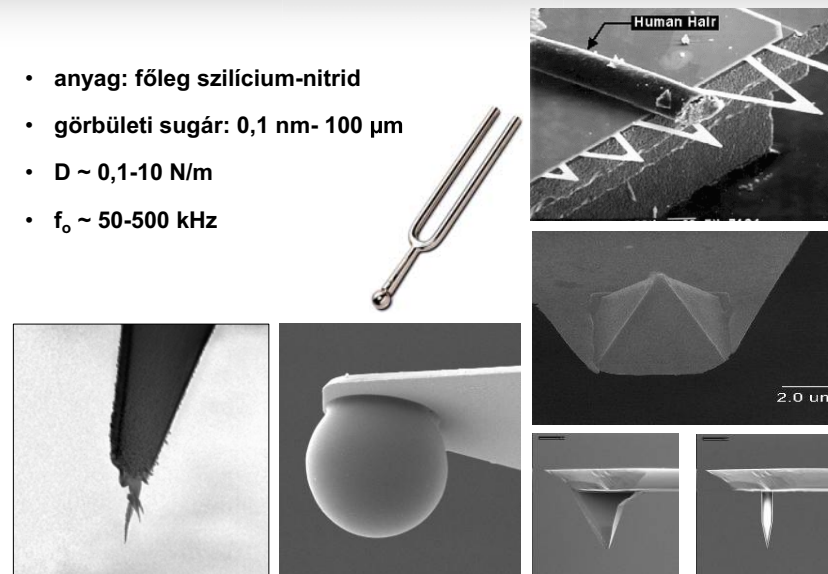
Oszcillációs üzemmód



23

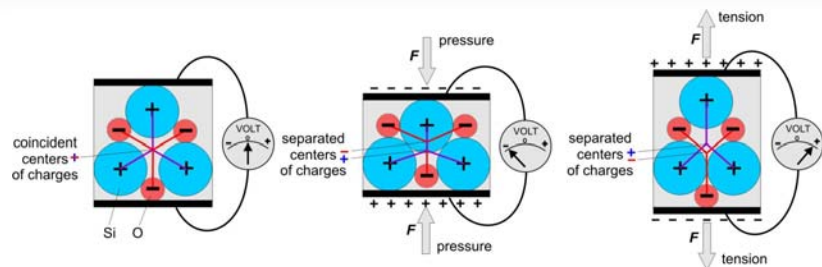
Rugólapkák

- anyag: főleg szilícium-nitrid
- görbületi sugár: 0,1 nm- 100 μm
- $D \sim 0,1\text{-}10 \text{ N/m}$
- $f_0 \sim 50\text{-}500 \text{ kHz}$



24

Pásztázás elve: piezoelektromosság



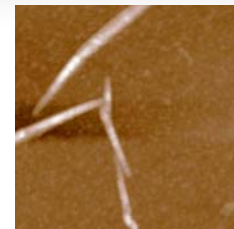
- **direkt piezoelektromos hatás:** deformáció → feszültség
- **inverz piezoelektromos hatás:** feszültség → deformáció
- X, Y, Z irányú piezo: pl. 150 V → 40 μm

precíz, akár 0,1 nm-es léptetés



25

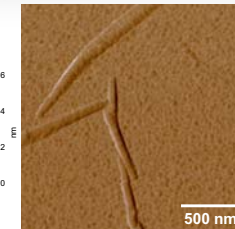
Képkalkotás, felbontás



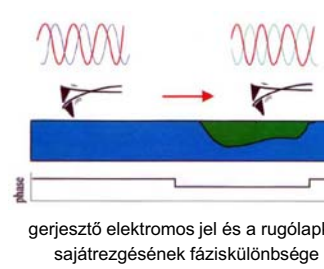
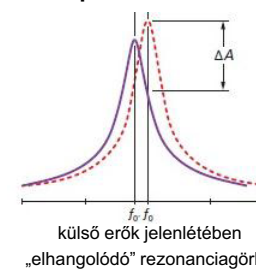
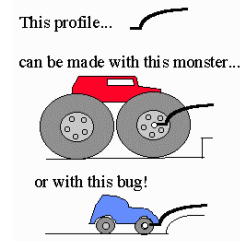
magasság kontraszt



amplitúdó kontraszt

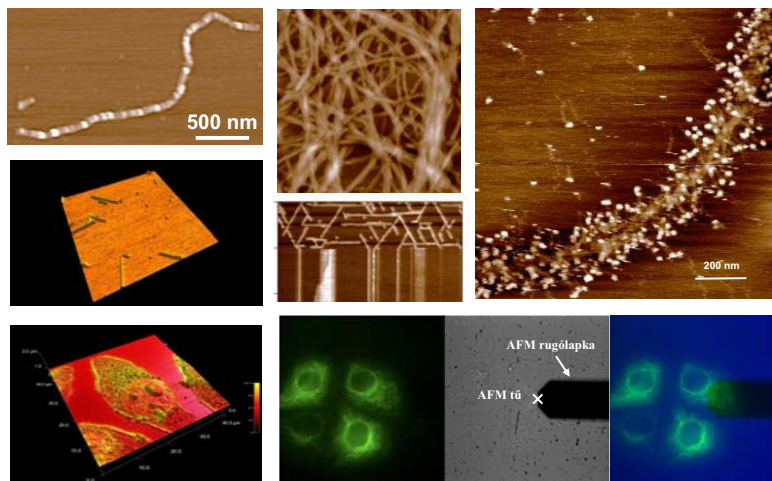


fázis kontraszt



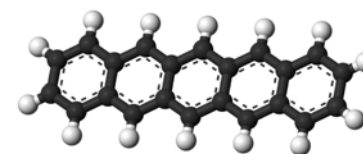
26

Intézetünkben született képek...



27

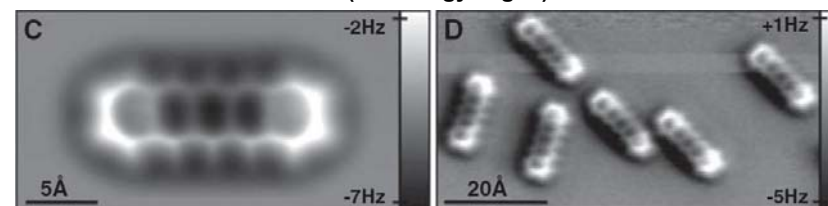
Pentacén molekula



STM

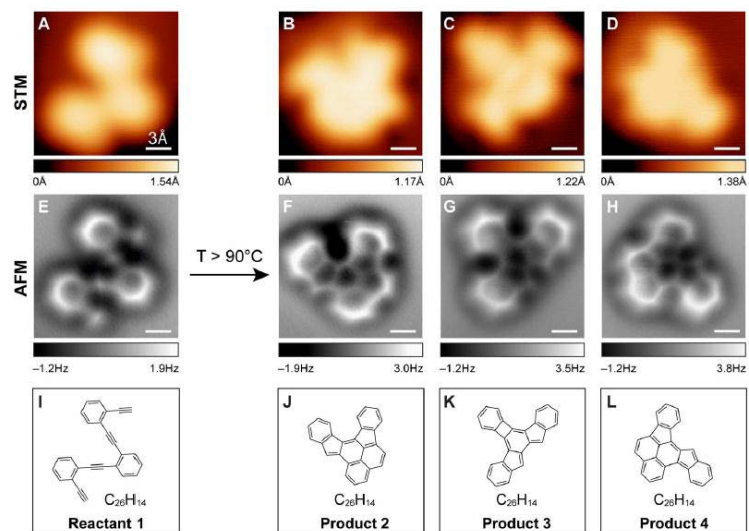


AFM (CO a hegy végén)



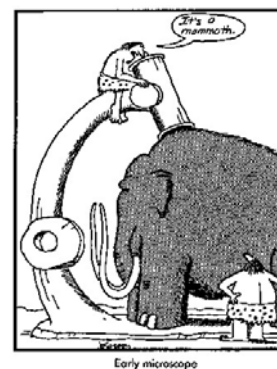
28

Kémiai reakciók vizualizálása



29

Köszönöm a figyelmet!



30