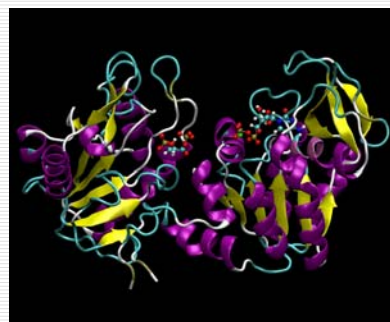


Tormaperoxidáz



Foszfoglicerát kináz

Elektromágneses sugárzások és biológiai rendszerek

Ionizáló és nem-ionizáló sugárzások

Dr. Fidy Judit
egyetemi tanár
2012 Febr.15

Sugárzások és biológiai rendszerek

Ionizáló és nem-ionizáló sugárzások



Látható fény (nem ionizáló)

Röntgensugárzás

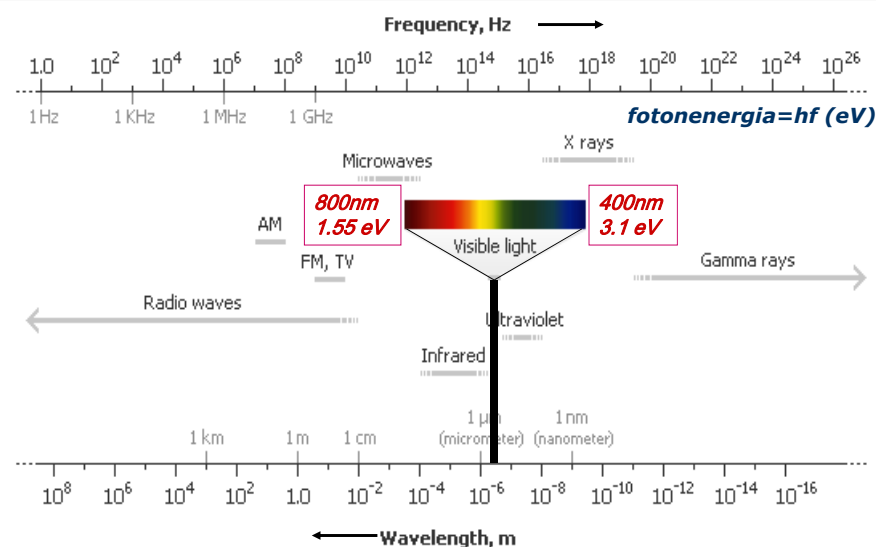
(Röntgen-cső, szerkezetvizsgálat, diagnosztika)

(Magsugárzások és nagy energiájú röntgen sugárzás orvosi alkalmazásai) → „Orvosi fizika” MSc)

Fény – Röntgen sug. : elektromágneses hullámok

Logaritmikus skála

$10^{-9} \text{ m} = 1 \text{ nanometer}$



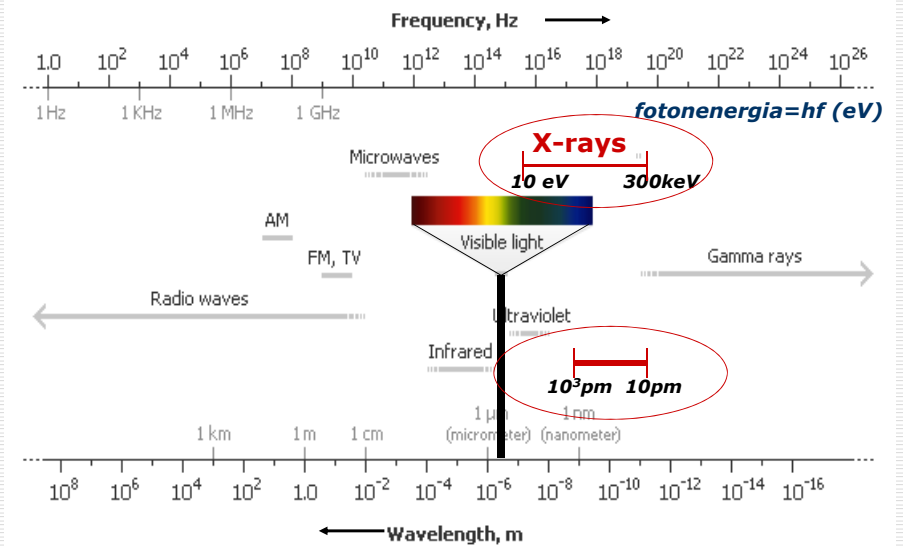
emlékeztető

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Joule}$$

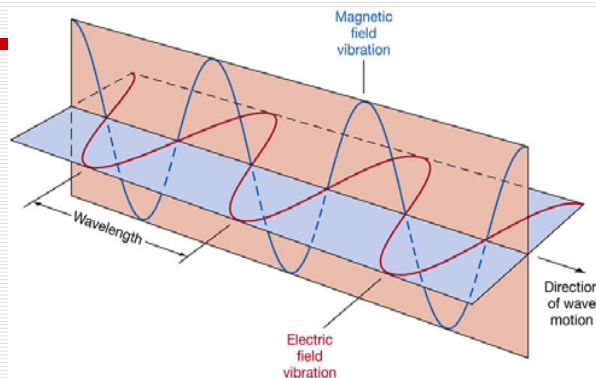
Fény – X-ray elektromágneses hullámok

Logaritmikus skála

$$10^{-9} \text{ m} = 1 \text{ nanometer}$$



Elektromágneses hullámok - emlékeztető

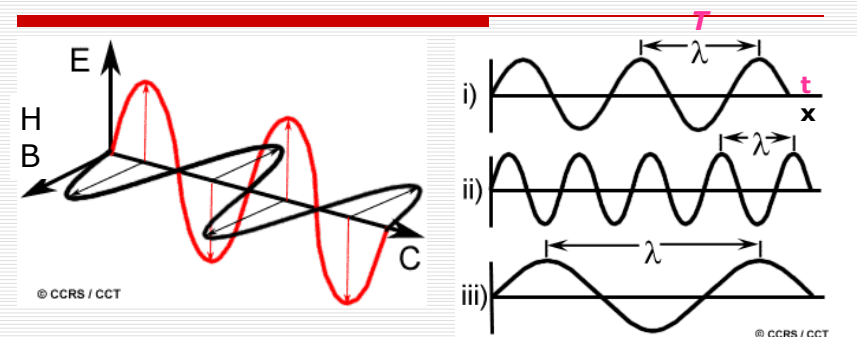


$$E = E_{\max} \cdot \sin \left(2\pi \frac{t}{T} + 2\pi \frac{x}{\lambda} + \Phi \right)$$

$$B = B_{\max} \cdot \sin \left(2\pi \frac{t}{T} + 2\pi \frac{x}{\lambda} + \Phi \right)$$

Az elektromos és mágneses térnek azonos a fázisa és a periodicitása (T, λ)

EM hullámok fontos tulajdonságai



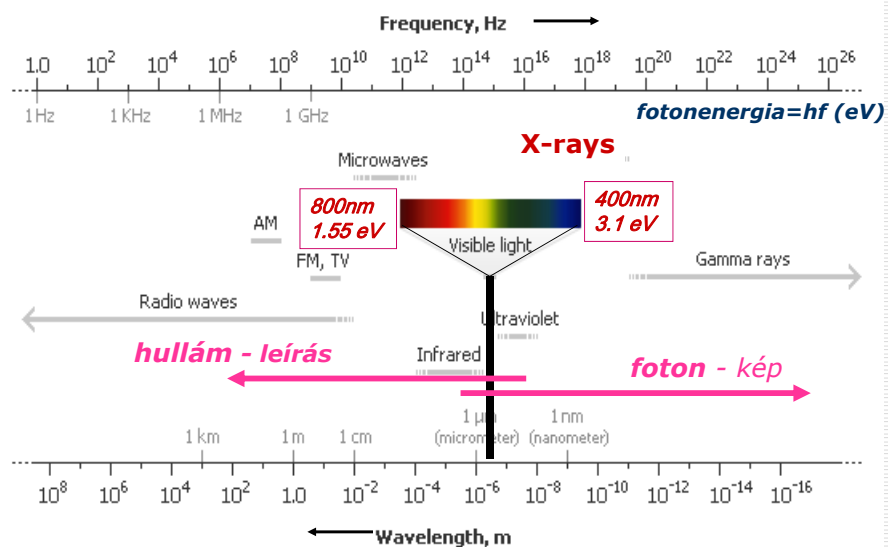
$$c = \lambda / T, \quad f = 1/T, \quad c = f\lambda (\text{m/s})$$

$$c = 299,792,458 \text{ m/s vákuumban}$$

$$c = \frac{E}{B}$$

Elektromágneses hullámok – kettős természet ?

Logaritmikus skála



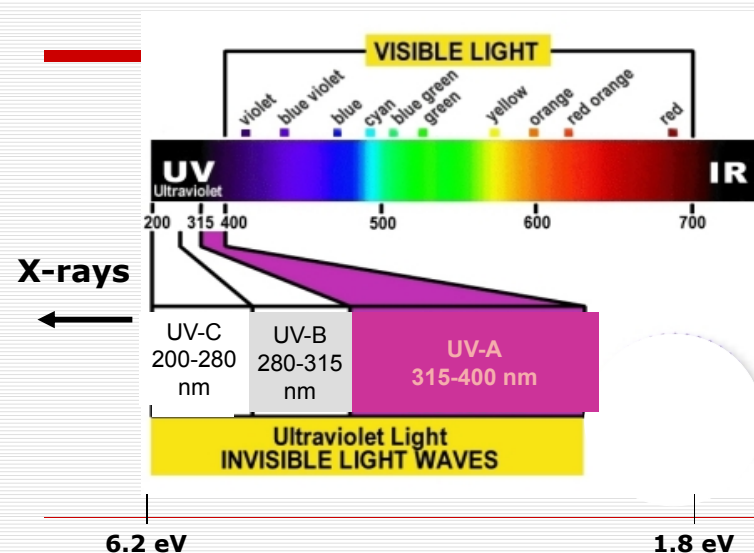
A fény természete, forrásai és biológiai hatásai

A fény terjedésének és anyagi kölcsönhatásainak értelmezéséhez **mind a hullám- mind a foton-leírást használjuk**

Kettős természet

- **hullám**
Huygens elv, diffrakció, interferencia
- **részecske: foton** (energia-kvantum)
fotoelektromos hatás, energiaátadás anyagoknak kvantált energiaadagokban, kölcsönhatásokban partnere az elektron

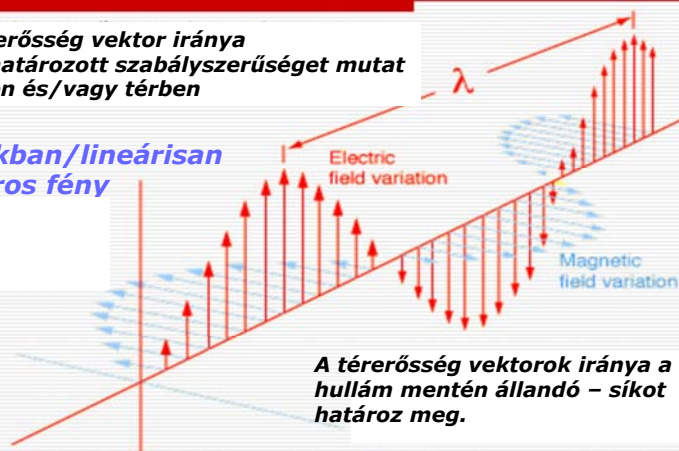
A fény hullám paramétere



A fény hullám polarizáltsága

A térerősség vektor iránya meghatározott szabályszerűséget mutat időben és/vagy térben

a. Síkban/lineárisan poláros fény

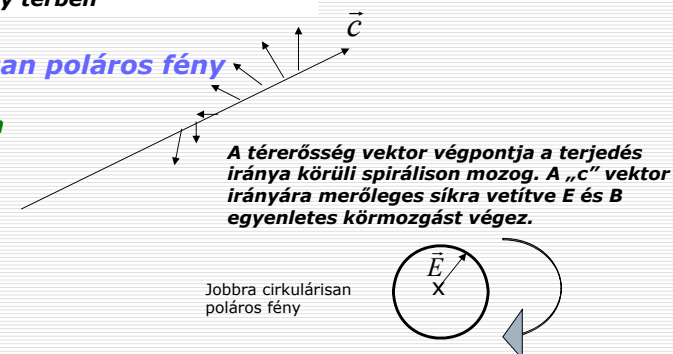


Poláros fény

A térerősség vektor iránya meghatározott szabályszerűséget mutat időben és/vagy térben

b. Cirkulárisan poláros fény

jobbra - balra

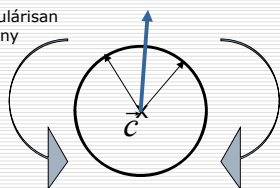


Poláros fény

A térerősség vektor iránya meghatározott szabályszerűséget mutat időben és/vagy térben

A linárisan poláros fény két, jobbra, ill. balra cirkulárisan poláros fény eredője

Balra cirkulárisan poláros fény



A térerősség vektor végpontja a terjedés iránya körüli spirálison mozog. A „c” vektor irányára merőleges síkra vetítve E és B egyenletes körmozgást végez.

Jobbra cirkulárisan poláros fény

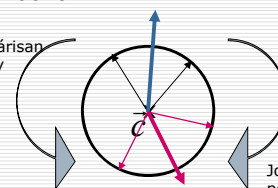
Azonos terjedési sebesség, frekvencia és amplitudó

Poláros fény

Optikailag aktív anyagok (molekulák, szerkezetek) a linárisan poláros fény térerősség-vektorának irányát elfordítják

Oka: speciális aszimmetria – tükörszimmetria hiánya
A mintában a cirkulárisan poláros komponensek terjedési sebessége különböző

Balra cirkulárisan poláros fény



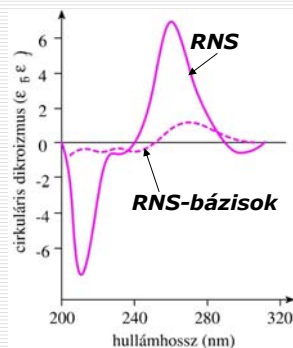
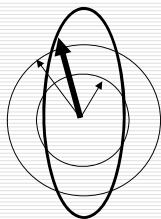
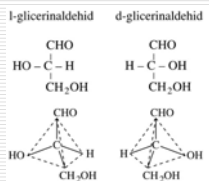
Az optikai forgatás mértéke a molekulák minőségére jellemző és arányos a részecskeszámmal

Jobbra cirkulárisan poláros fény

Különböző terjedési sebesség, azonos amplitudó
Azonos terjedési sebesség és amplitudó

Poláros fény

Elliptikusan poláros fény Cirkuláris dikroizmus



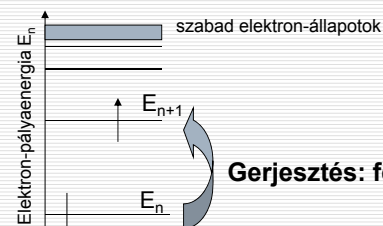
A két cirkulárisan poláros komponens törésmutatóban és abszorbanciában is különbözik a kölcsönhatás után → az eredő elliptikusan polárossá válik

Fény-foton koncepció

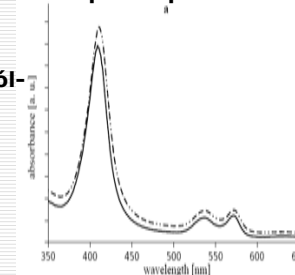
anyaggal való kölcsönhatás magyarázata

$$h \cdot f = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

A fény-elnyelés mértéke függ a hullámhossztól-fotonenergiától



Hemoglobin molekula oldata
Abszorpciós spektrum



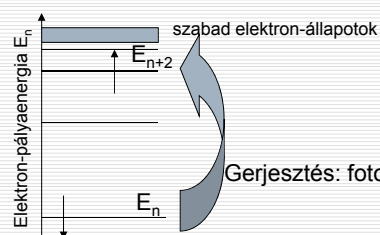
Gerjesztés: fény-fotonenergia-felvétellel

Fény-foton koncepció

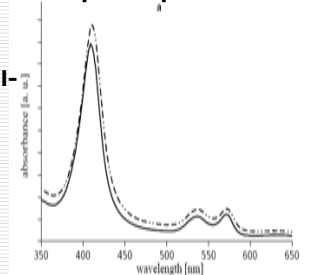
anyaggal való kölcsönhatás magyarázata

$$h \cdot f = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

A fény-elnyelés mértéke függ a hullámhossztól-fotonenergiától



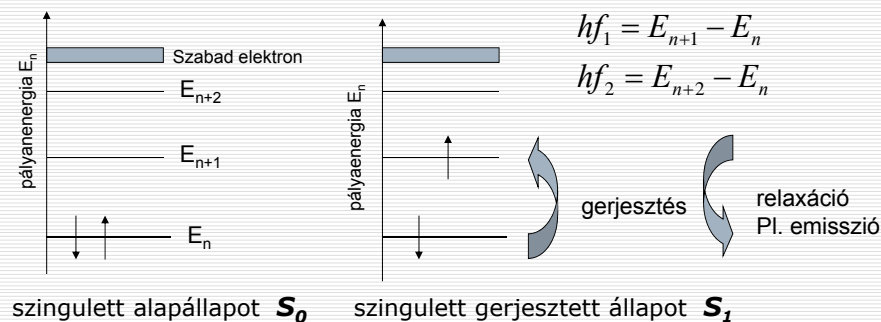
Hemoglobin molekula oldata
Abszorpciós spektrum



Gerjesztés: fotonenergia-felvétellel

Fényfoton elnyelése - emissziója

használt sémák, jelölések



$$hf_1 = E_{n+1} - E_n$$

$$hf_2 = E_{n+2} - E_n$$

szingulett alapállapot S_0

szingulett gerjesztett állapot S_1

Szingulett állapot (singlet): $\sum_i s_i = 0$

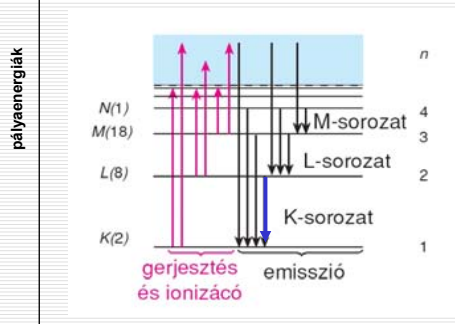
Sematikus ábrázolás: csak a legfelső betöltött nívó elektronjai

Optikai elektron-átmenetek

FOTON ↔ ELEKTRON

abszorpció és emisszió
foton-képben

Sok-elektronos rendszerek elektron-energiái
Egyszerű példa: **Cu atom**



Optikai foton-energia (~2-3 eV)
elnyelése - emissziója
a legkülső - leglazábban kötött
elektronokat érinti

$E_{K\alpha} \sim 8 \text{ keV}$ (L → K átmenet)
Röntgen-tartomány!

Fényfoton elnyelése – emissziója Mérés: optikai spektroszkópia

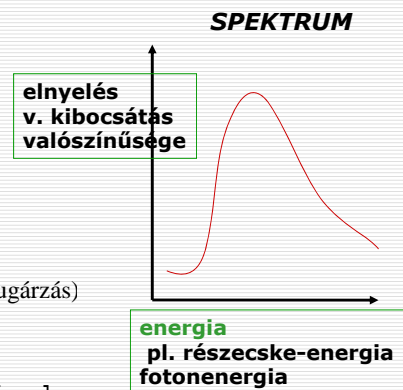
-Elnyelési
-Abszorpciós spektrum

-Kibocsátási
-Emissziós spektrum

$(\frac{1}{2}mv^2 - \text{részecske-sugárzás})$

$$hf = h \frac{c}{\lambda} = hc \frac{1}{\lambda}$$

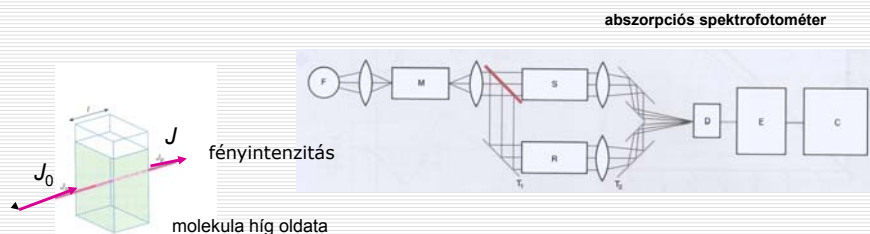
$[eV]$ $\frac{1}{\lambda} [cm^{-1}]$



IR- VIS – UV
Optikai spektroszkópia

Milyen fény-fotonok gerjesztenek?

Mérés: **optikai abszorpciós spektrum**



Lambert-Beer törvény

$$A = \lg \frac{J_0}{J} = \varepsilon(\lambda) * c * l$$

A= Abszorbancia
D= Optikai denzitás

$h * f$

Milyen fotonok gerjesztenek?

$\varepsilon(\lambda)$ **Moláris extinkció** kvantumkémiai értelmezése:
„Átmeneti dipólus-momentum”

Egy elektronátmenet valószínűségét a kiindulási és a végső elektron-vibrációs pálya
Kvantumszámai határozzák meg (hullám-kép):

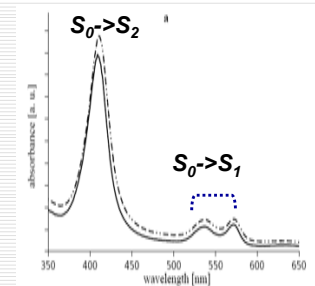
kiválasztási szabályok

Mennyit változhatnak a kvantumszámok?

$\Delta n = \text{bármennyi}, \Delta l = +1, -1, \Delta m = 0 \text{ vagy } +1, -1$
 $\Delta s = 0$
+ vibrációs módusok csatolása

Gerjesztési vagy emissziós átmenetben az
elektron spinállapota nem változhat

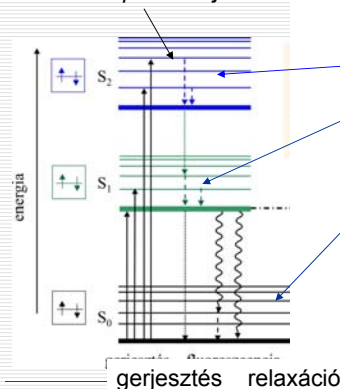
Hemoglobin abszorpciós spektruma



Megengedett, és tiltott átmeneteknagy vagy kis valószínűségű
átmenetek

Molekula – kölcsönhatásban a környezettel „sávos” spektrumok

Az elektron-pályák energiáit a **molekulák** diszkrét **vibrációs** állapotai kis mértékben perturbálják



Aromás szénhidrogének

A vibrációs nívók mind az abszorpció, mind az emisszió átmenetek fotonenergiáiban új lehetőségeket jelentenek

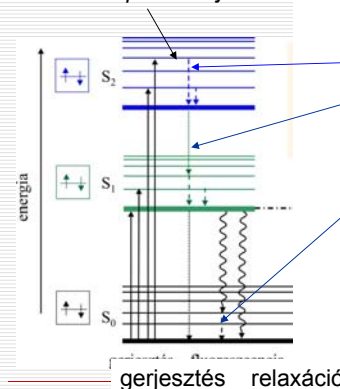
Egyes fotonenergiák helyett közeli fotonenergiák sorozata a spektrumokban

Molekulák vibrációi
T hőmérséklet
Környezeti kölcsönhatások

SÁVOK

Molekula – kölcsönhatásban a környezettel emisszió csak a legalsó gerjesztett állapotból

Az elektron-pályák energiáit a **molekulák** diszkrét **vibrációs** állapotai kis mértékben perturbálják



Aromás szénhidrogének

Kasha-szabály

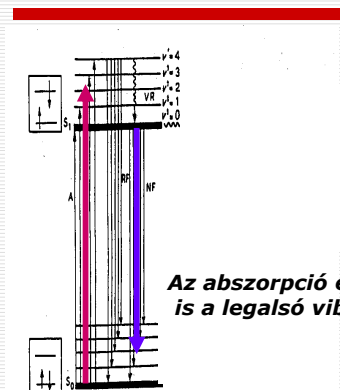
A felsőbb gerjesztett állapotokból nincs átmenet az alapállapotba fotonemisszióval – vibrációs relaxáció (energialeadás hő formájában) az elektronállapotokon belül, és az S_1 állapotba

Emisszió csak az S_1 nívóról

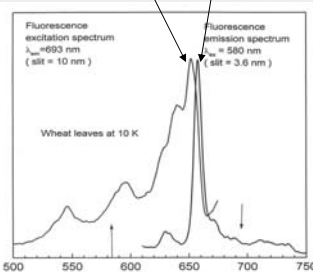
Molekula – kölcsönhatásban a környezettel emisszió a gerjesztésnél hosszabb hullámhosszokon

A mért abszorpció és emissziós sávok energiája eltér egymástól

Stokes-féle eltolódás



Az abszorpció és az emisszió is a legalsó vibrációs szintről történik



$$\overline{hf}_{abs} > \overline{hf}_{fluo}$$

$$\lambda_{abs} < \lambda_{fluo}$$

Maximum-helyek

A polarizáció (hullám-tulajdonság) szerepe fény-abszorpcióban, fény-emisszióban

A molekulák gerjesztésekor elektronállapotváltozás töltésetolódás
Dipólus vektorral jellemezhető: „átmeneti momentum”

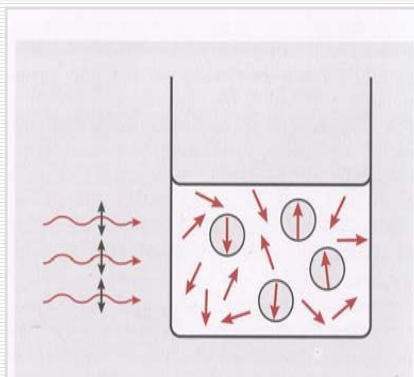
→ Függ a molekula szerkezetétől, a szerkezethez orientált pl. triptofán: a molekula síkjában

Fotoszelekció: poláros fény elektromos térerősség vektora azokat az elektronokat gerjeszti, ahol a keltett dipólus-momentum és a térerősség vektor iránya (közelítőleg) megegyezik. Emisszióban is dipólus-jelleg érvényesül.

Polarizált gerjesztés

Polarizált emisszió

Álló molekula



4.32. ábra. Fotoszelekció. A vertikálisan polarizált fényt csak a megfelelően orientált körrel jelölt fluoroförök abszorbeálják

Az emisszió polarizációfokának (p) mérése

$$p = \frac{I_{VV} - I_{VH}}{I_{VV} + I_{VH}}$$

V vertikális polarizáció

H horizontális

Ha a molekula a gerjesztett állapot ideje alatt **elfordul**
 → az emisszió **polarizációja csökken**
 Beágyazó környezet (pl. plazmamembrán) **fluiditásának jellemzése**

A fény biológiai hatásai

Szemponatok:

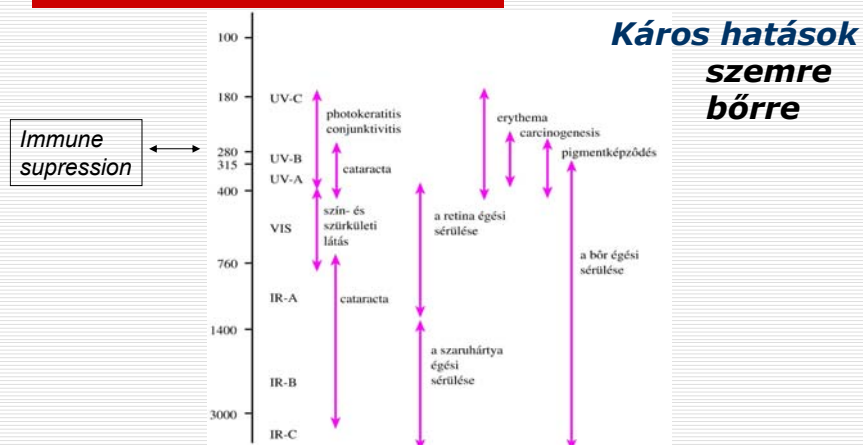
Mi nyeli el? Milyen mélyre jut?

Milyen szerveket ér fény?

Fénnyel kiváltott reakciók, terápiás beavatkozások

A fény biológiai hatásai

Mit ér közvetlenül fény?



A fény biológiai hatásai

Mit ér közvetlenül fény?

Pozitív hatások

szemre bőrre → Szervezetre ?

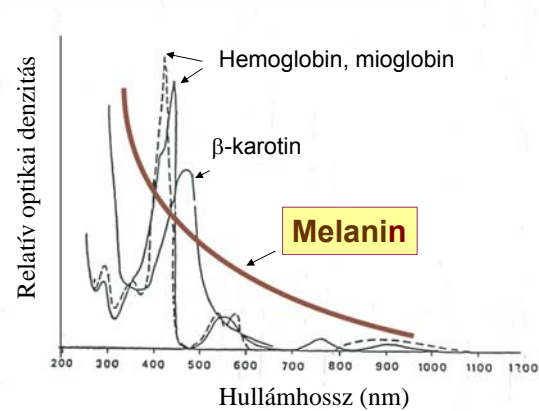
Ismert hatások:

- D-vitamin szintézis (UV-A)
- anyagcsere, hormonrendszer, immunrendszer stimulálása (VIS)
- téli depresszió & melatonin hormon túltermelése

..... Sok az ismeretlen tényező!

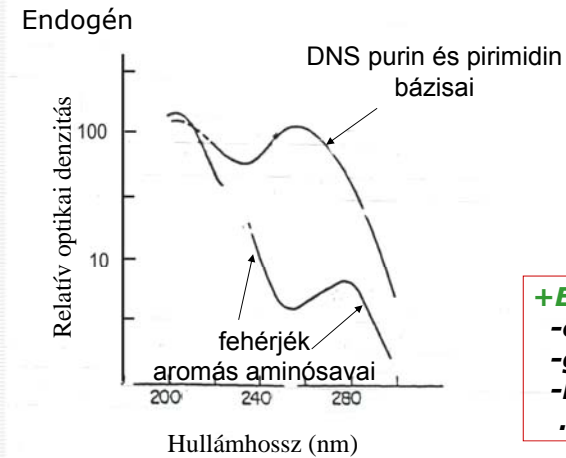
A fény biológiai hatásai

Milyen molekulák nyelik el?



A fény biológiai hatásai

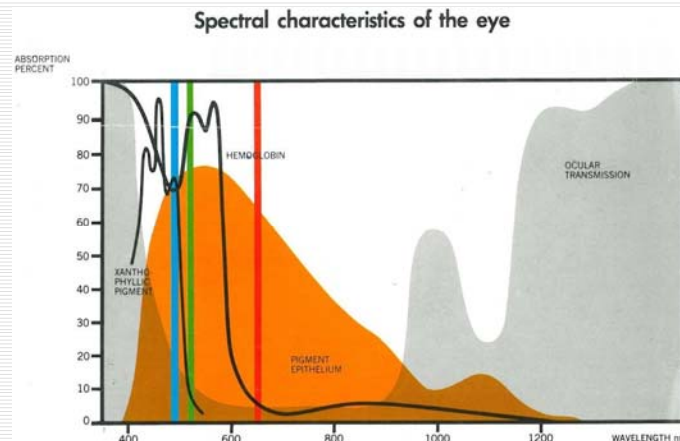
Milyen molekulák nyelik el?



+Exogén kromofórok
-ételfestékek
-gyógyszerek
-kozmetikumok
.....

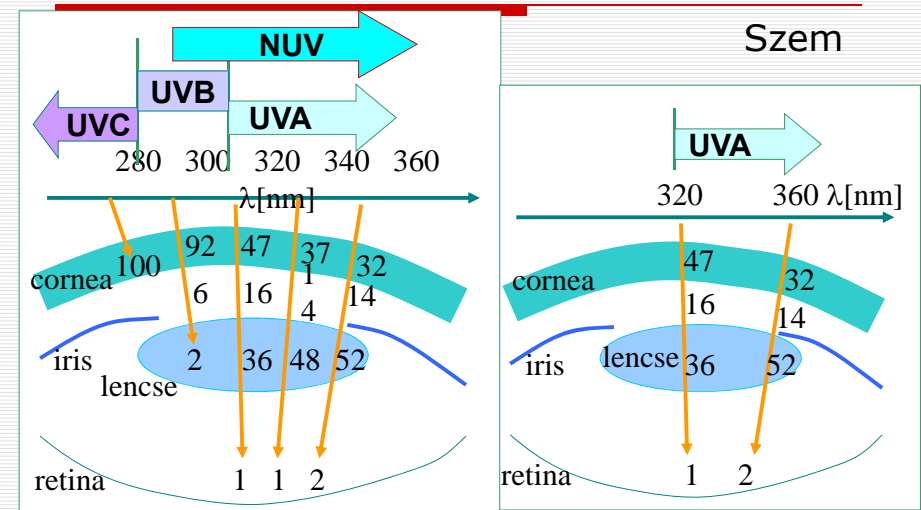
A fény biológiai hatásai

Milyen molekulák nyelik el?



A fény biológiai hatásai

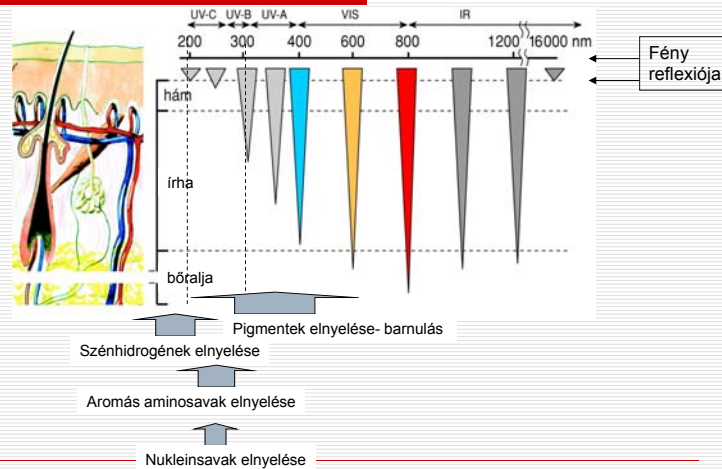
Behatolási mélység?



A fény biológiai hatásai

Behatolási mélység?

Bőr

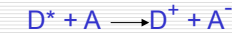
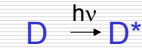


A fény biológiai hatásai

Fotokémiai mechanizmusok

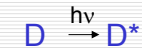
Indirekt fotokémiai reakciók

Elektronátadás



Termék : reaktív szabadgyökök

Energiaátadás



Termék: szinglet oxigén

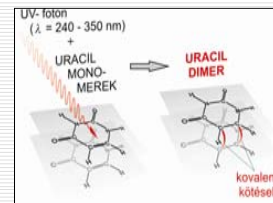
A fény biológiai hatásai

Fotokémiai mechanizmusok

Direkt fotokémiai hatások:

az elnyelt foton közvetlenül vezet kémiai átalakuláshoz

- UV fotodimerizáció DNS, RNS-ben (timin, citozin, uracil)
- fotohidratáció
- DNS-fehérje keresztkötés



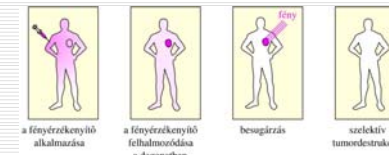
A fény biológiai hatásai

Fotokémiai mechanizmusok

Terápiás alkalmazások

fényérzékenyítőkön keresztül

- specifikus kötődés + száloptika



- bőrgyógyászati alkalmazások

Fény-keltő mechanizmusok és fényforrások

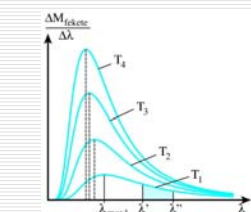
1. Hőmérsékleti sugárzás folytonos spektrum

Oka: anyagok belső szerkezetének termikusan gerjesztett rezgései

$$M = \sigma \cdot T^4$$

$$\lambda_{\max} \cdot T = \text{konst}$$

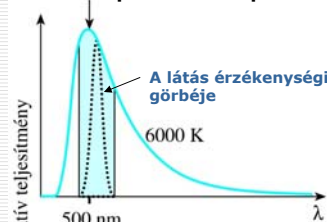
Fény? T-től függ



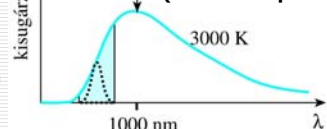
Izzószálas fényforrások

Halogén gáz töltet a szál párolgása ellen

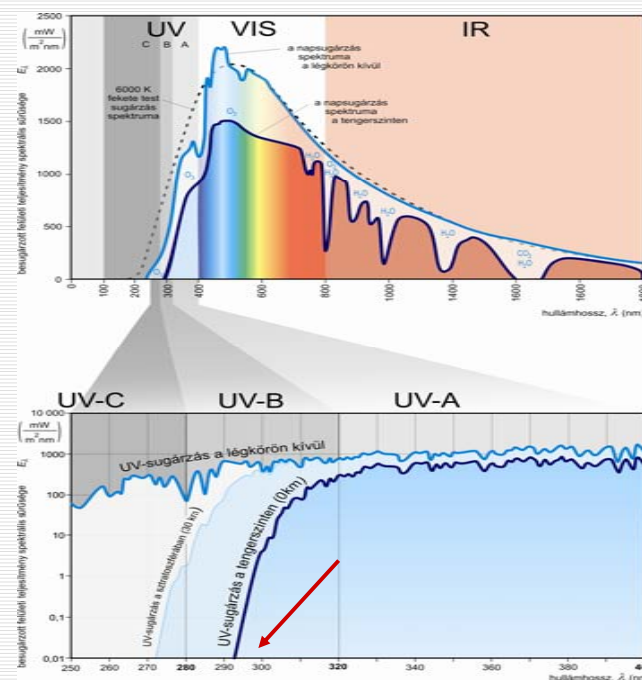
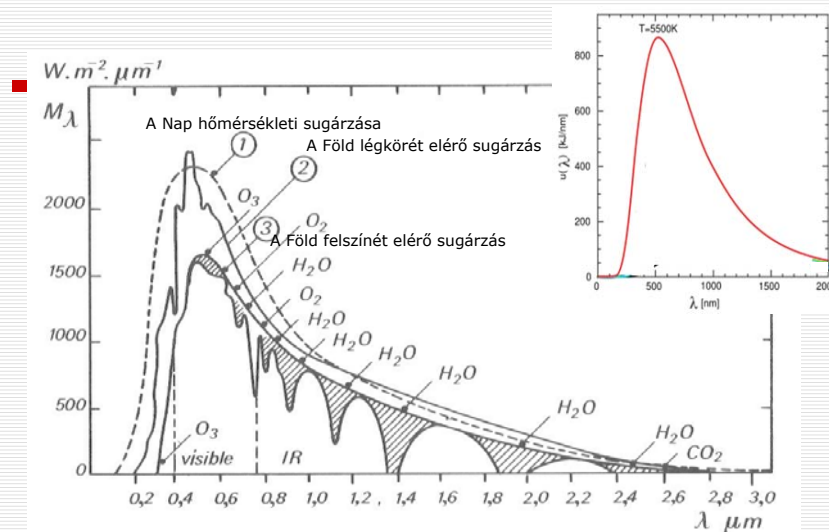
A Nap emissziós spektruma



Wolfram szál spektruma (Sollux lámpákban)



A napsugárzás emissziós spektruma



A Nap sugárzásának UV tartományát a légkör elnyelése szűri ki **O₃ tartalom!**

2.1. Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Jellemző paraméterek → természetben ritka

„hideg emisszió”

Az emisszió előfeltétele: gerjesztett elektronállapot

- Az emissziós spektrum

Stokes szabály
Kasha szabály
Sávós, vagy vonalas

- Az emisszió kvantumhatásfoka: az elnyelt és emittált fotonok számának aránya (fotolumineszcenciánál)

Az emissziós spektrum görbe alatti területe

$$\Phi_{em} = \frac{N_{em}}{N_{absz}} = \frac{k_{em}}{k_{em} + k_{belső} + k_{külső}} \approx \int F(\nu) d\nu \quad \nu = \frac{1}{\lambda}$$

A gerjesztett elektron egyéb energialeadási reakciósebességei

2. 1. Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Ritka jelenség a természetben

A fényemisszió kvantumhatásfoka kicsi
más reakcióutak az energialeadásra

VI.2. táblázat. Néhány sejtalkotó molekula fluoreszcencia paramétere

Molekula	Környezet	Abszorpció		Fluoreszcencia		Érzékenység	
		λ_{\max} (nm)	ϵ_{\max} (1/Mcm)	λ_{\max} (nm)	ϕ_F	τ (nsec)	$\epsilon_{\max}\phi_F$
Triptofán	H ₂ O, pH 7	280	5600	348	0,20	2,6	1120
Tirozin	H ₂ O, pH 7	274	1400	303	0,14	3,6	200
Fenilalanin	H ₂ O, pH 7	257	200	282	0,04	6,4	8
Y bázis	élesztő tRNA ^{Phe}	320	1300	460	0,07	0,0637	91
Adenin	H ₂ O, pH 7	260	13400	321	$2,6 \cdot 10^{-4}$	$<0,02$	3,2
Guanin	H ₂ O, pH 7	275	8100	329	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$<0,02$	2,4
Citozin	H ₂ O, pH 7	267	6100	313	$0,8 \cdot 10^{-4}$	$<0,02$	0,5
Uracil	H ₂ O, pH 7	260	9500	308	$0,4 \cdot 10^{-4}$	$<0,02$	0,4
NADH	H ₂ O, pH 7	260, 340	6200	470	0,019	0,40	120

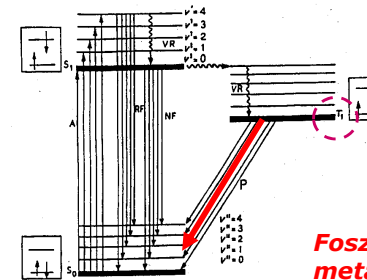
2.1. Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia

Megkülönböztetés az emittáló gerjesztett elektronállapot alapján.

Jablonski – diagram

Az S_1 állapotú gerjesztett elektron spinátfordulással átmehet a T_1 gerjesztett állapotba, ahonnan az S_0 alapállapotba visszatérés tiltott



**T_1 : alacsonyabb energiájú,
hosszú élettartamú
– metastabil –
gerjesztett állapot**

**Foszforeszcencia: spontán fotonemisszió
metastabil (T_1) állapotból**

2.1. Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia

Fluoreszcencia:

- Megengedett elektron-átmenetből ($S_1 \rightarrow S_0$) származó spontán fényemisszió
- Élettartama rövid, $\tau \sim 1-10$ ns \leftrightarrow gerjesztési idő $\sim 10^{-3}$ ns
- Karakterisztikus fotonenergia(tartomány) –szín jellemzi
- Többféle gerjesztési átmenettel is gerjeszthető

2.1. Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia

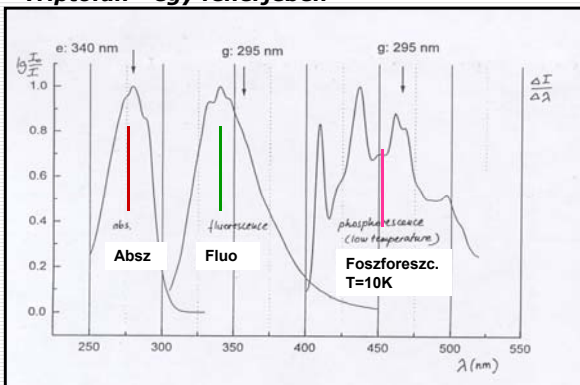
Foszforeszcencia:

- Spontán fényemisszió metastabil átmenetből
- Az emittáló nívó élettartama hosszú $\tau \sim$ ms, sec...
metastabil állapot
- Az emittált fény fotonenergiája kisebb mint a fluoreszcenciáé
- Hosszú élettartam \rightarrow lehetőség a környezeti energialeadásra
emissziós intenzitás igen kicsi \rightarrow orvosi alkalmazása csekély

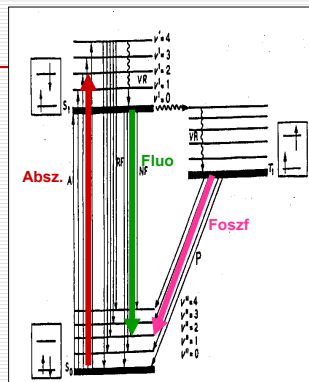
2.1. Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia spektrumok összehasonlítása

természetesen lumineszkáló aminosav
Triptofán - egy fehérjében



Stokes-féle eltolódás



Vibrációs relaxáció

$$\lambda_{\text{foszf}} > \lambda_{\text{fluo}} > \lambda_{\text{absz}}$$

Fény-keltő mechanizmusok és fényforrások

2.1. Lumineszcencián alapuló fényforrások

Alapja: gázkisülési csövekben keltett elektrolumineszcencia

(az üvegbúra elnyeli az UV fényt, a kvarz nem)



-Alacsony nyomású fémgőz-lámpák

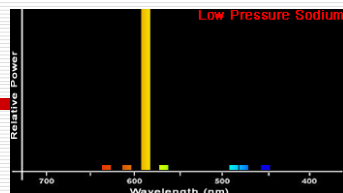
Pl. - Na-lámpa sárga fénye

- **germicidlámpa**: alacsony nyomású higanygőz vonalas emissziós spektruma 254 nm-en elnyelődik baktériumok genetikai állományában
sterilizáló hatás

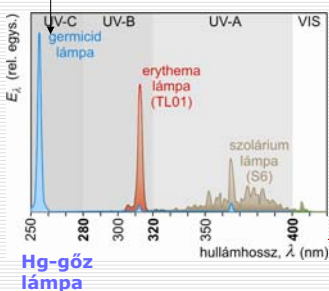
-Ívlámpák

nagy nyomású Hg, Xe vagy Na-lámpák, ionizált plazma ívkisülése folytonos spektrum jellegzetes vonalakkal

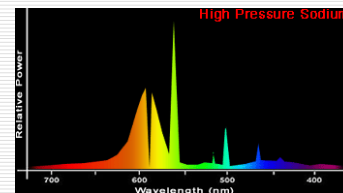
Fémgőz lámpák



Kisnyomású Na-gőz lámpa emissziós spektruma

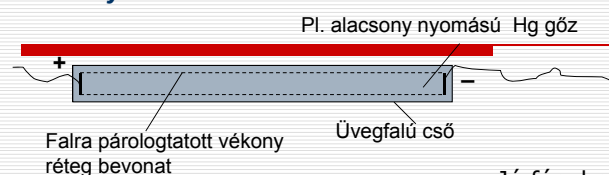


Hg-gőz lámpa



Nagy-nyomású Na-gőz lámpa emissziós spektruma

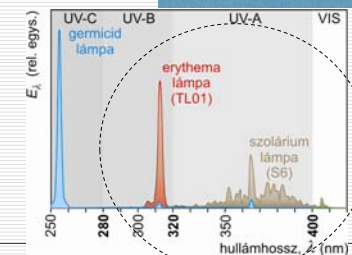
- Fénycsövek



A gáz-töltet elektrolumineszcenciája (Hg esetén UV fény) gerjeszti a fal bevonatának fotolumineszcenciáját. Ez már látható fény, ami áthatol az üvegfalon. A kilépő fény spektruma a bevonattól függ, célja a Nap spektrumának közelítése.

Erythema lámpa : λ a 280 – 320 nm közeli UV- tartományban, uviol üvegfal

Jó fényhozam
kompakt csövek



Fény-keltő mechanizmusok és fényforrások

2.2. Indukált fényemisszió - lézerek

Spontán emissziós fény :

Az egyes elektronátmenetek térben és időben rendezetlenül, véletlenszerűen történnek.

Az egyes hullámvonulatok fázisa egymástól független.

A fény „inkohereus”

Indukált emissziós fény:

A fényfotonok emisszióját az emittálandó fotonenergiával azonos energiájú foton jelenléte indukálja.

A kibocsátott hullámvonulat a kiváltóval azonos fázisban lép ki, együtt koherensek

Fény-keltő mechanizmusok és fényforrások

2.2. Indukált fényemisszió - lézerek

LASER: Light Amplification by the Stimulated Emission of Radiation
1961, Rubin-lézer

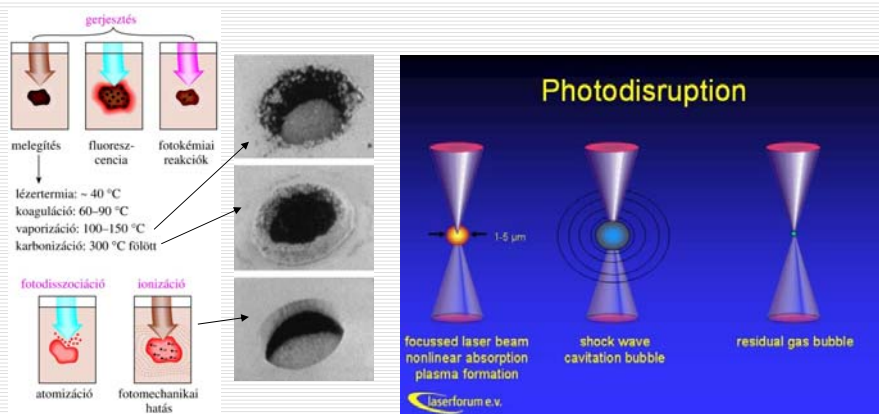
Nemcsak erősítő, hanem speciális fényforrás

A lézer-fény speciális tulajdonságai

- monokromatikus $\Delta f/f \sim 10^{-10}$ ($\leftrightarrow 10^{-6}$)
- koherens : nagy a koherencia-hossz (10^3 m $\leftrightarrow 10^{-3}$ m)
- kis divergencia (néhány szögperc) \rightarrow jól fókuszálható
- nagy intenzitás
átlagos intenzitás \leftrightarrow impulzus-intenzitás

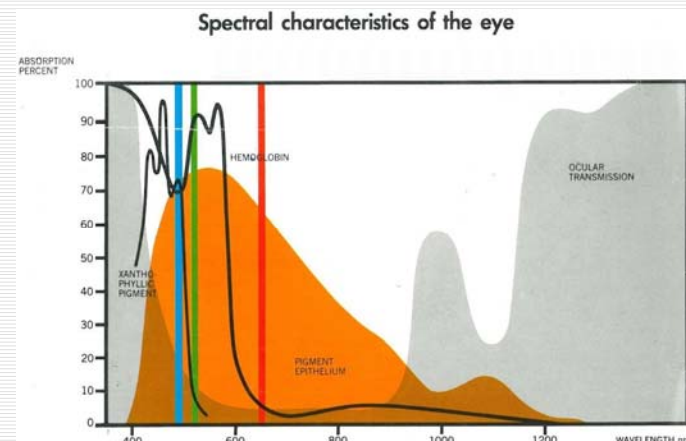
2.2. Lézerek sebészeti alkalmazása

elnyelés \rightarrow energia \rightarrow felmelegedés \rightarrow

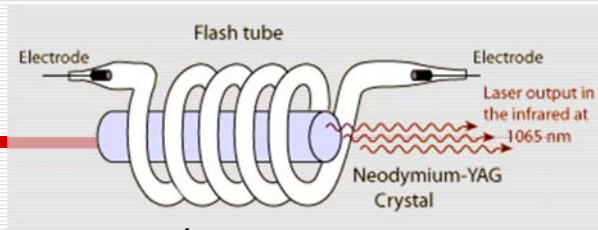


2.2. Lézerek sebészeti alkalmazása

elnyelés --- energia --- felmelegedés
speciális szem-alkotó szövetek

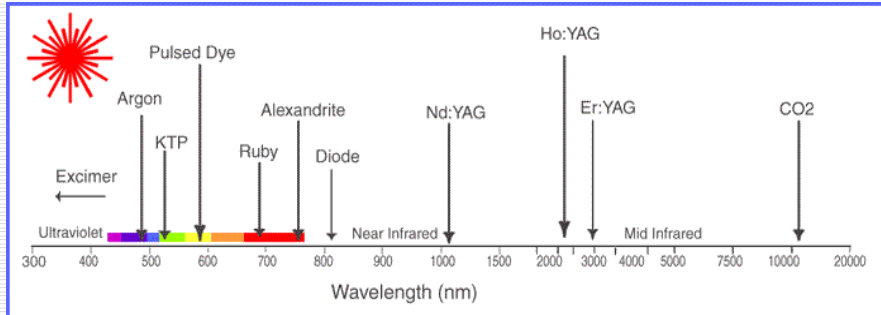


Lézerek



Szemészeti alkalmazás

← Általános sebészeti alkalmazás →



Eddig: fény
Következik: röntgensugárzás

	fény	röntgensugárzás (rtg. cső)
Fotonenergia	1.5 – 3 eV	20 – 200 keV
Primér hatás	e^- gerjesztés	e^- ionizáció
Elnyelődés valószínűsége	diszkrét fotonenergiáknál	energia folytonos függvénye

A röntgensugárzás természete, forrása és biológiai hatásai



(a)

Figure 4.10 Two radiographs taken by Röntgen. (a) The hand of Mrs. Röntgen. (The Bettmann Archive/Bettmann Newsphotos.) (b) Radiograph of a fully clothed man, showing not only the man's skeleton but also the keys in his pockets, the nails of his shoes, and the metal clasps of his garters. (Deutsches Museum, München.)

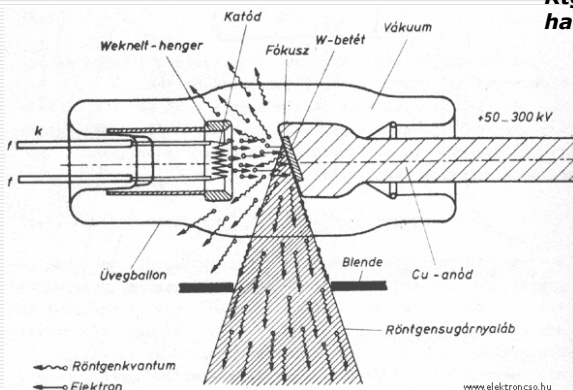


(b)

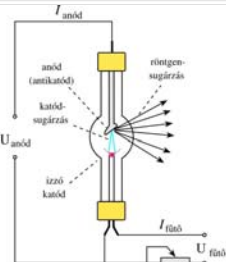


**Wilhelm Konrad Röntgen
(1845-1923)**

Röntgensugárzás keltése röntgensővel



Rtg. Sug. keletkezik, ha nagy sebességű elektronok nagy rendszámú anyagban lefékeződnek.



$$\eta = \frac{P_{sug}}{P_{el}} < 1\%$$

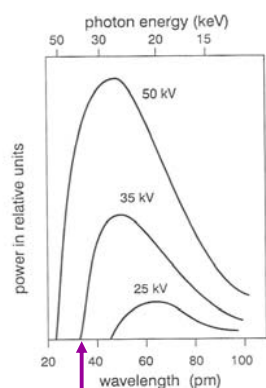
Az anódban nagy a hőfejlődés

Röntgensővek - **forgó anód**
- **hűtés**

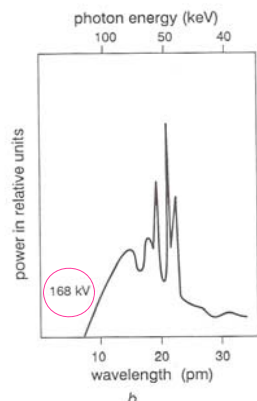


A röntgensugárzás keletkezésének mechanizmusai

Emissziós spektrumok növekvő gyorsító feszültség mellett



Határoló hullámhossz λ_{hat}



- Nagy feszültség (U) mellett a spektrum vonalassá válik
- Az össz-teljesítmény erősen nő a feszültséggel
- A spektrum a rövid hullámhosszú oldalon élesen végződik, λ_{hat} csökken, ha U nő

$$q_e U = \frac{1}{2} m_e v^2 = h f_h = h \frac{c}{\lambda_h}$$

$$\lambda_h = \frac{h * c}{q_e U}$$

A röntgensugárzás keletkezésének mechanizmusai

Kétféle mechanizmus

1. Fékezési röntgensugárzás (Brehmstrahlung)

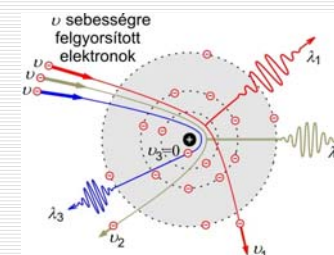
- minden (nagy) U-nál
- spektruma folytonos
- teljes kisugárzott teljesítmény:

$$\lambda_h = \frac{h * c}{q_e U}$$

$$P_{rtg} = konst * U^2 * I * Z$$

$$1.1 * 10^{-9} V^{-1}$$

Anód anyaga



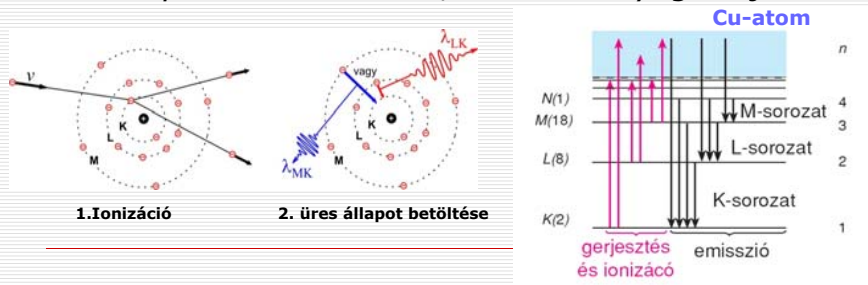
- ezen alapul a röntgendiagnosztika

A röntgensugárzás keletkezésének mechanizmusai

Kétféle mechanizmus

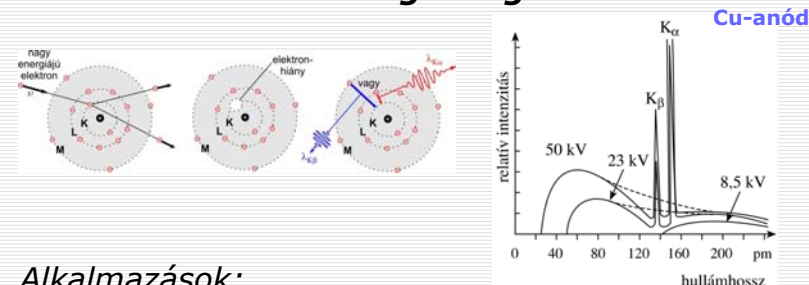
2. Karakterisztikus röntgensugárzás

- csak elég nagy U felett
- spektruma vonalas, az anód anyagára jellemző



A röntgensugárzás keletkezésének mechanizmusai

2. Karakterisztikus röntgensugárzás



Alkalmazások:

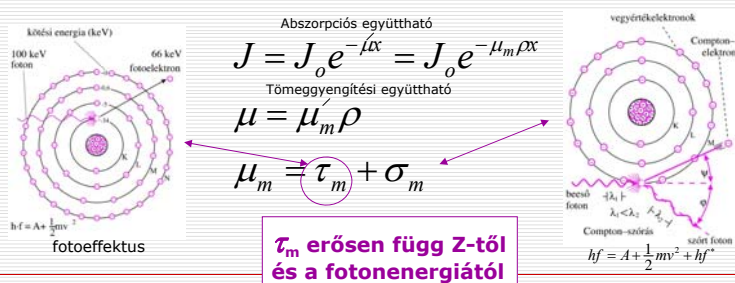
- Molibdén anód vonalai emlődiagnostikában
- vonalak fotonenergiája alapján kémiai elemzés

A röntgensugárzás alkalmazásai

Röntgendiagnostika alapjai

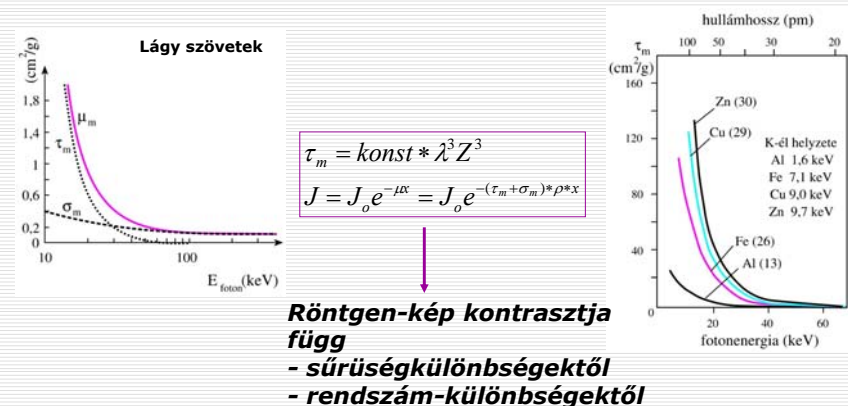
A diagnosztikai alkalmazások a röntgensugárzás szöveti elnyelődésén alapulnak

Kétféle mechanizmus a fotonenergiától függő súllyal.
„Ionizáló” sugárzás: az elnyelt foton ionizál



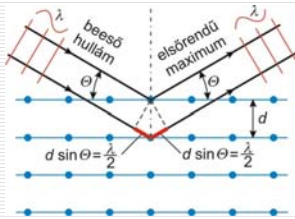
A röntgensugárzás alkalmazásai

Röntgendiagnostika alapjai



A röntgensugárzás alkalmazásai A röntgenkristallográfia alapjai

A biológiai makromolekulák **atomi felbontású szerkezetének** meghatározása a **röntgensugárzás diffrakcióján** alapul.
A mérést a makromolekulák **egy kristályain** végzik.



Bragg-egyenletek

Diffrakció és interferencia -
az erősítés feltétele:

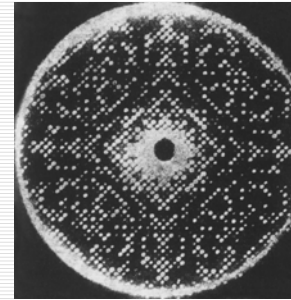
$$2d \sin \theta = n\lambda$$

$$d \approx \lambda$$

$d \sim$ atomi kötéstávolságok
 $d \sim 150 \text{ pm} \rightarrow \lambda$ röntgentartományú

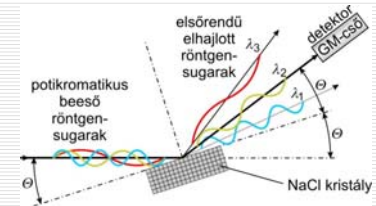
$$E(\text{keV}) = \frac{1.24}{\lambda(\text{nm})}$$

A röntgensugárzás alkalmazásai A röntgenkristallográfia alapjai



Lizozim enzim – kristály diffrakciós képe

A diffrakció felhasználása:
monokromatikus nyalábok előállítása
spektroszkópiai célokra

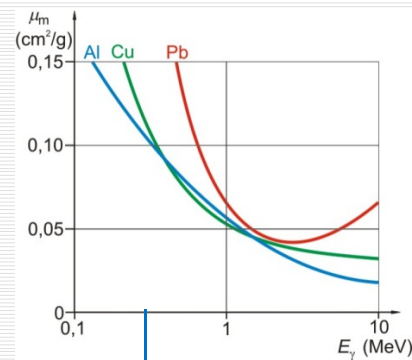
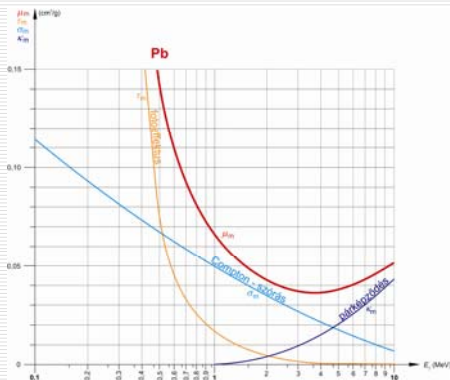


Megjegyzések gamma-sugárzásról

fotonenergia $\sim \text{MeV}$

elnyelési valószínűség: \ll rtg. sug.

- 1 MeV körül minimuma lehet



Röntgen sugárzás

Vége

Köszönöm a figyelmet



A kiválasztási szabályok kvantummechanikai háttere

Feltesszük, hogy az oldatot olyan fénnel világítjuk meg, amelyre teljesül a gerjesztési energia-feltétel $hf = E_{n+1} - E_n$

Az elektronok a fény elektromos vektorának irányában elmozdulnak az energia-átmenet során. Mekkora a dipólusmomentum keltésének valószínűsége?

Az elektromos **dipólusmomentum várható értéke** az átmenet során?

$$M_{a \rightarrow g} \quad \text{Átmeneti momentum}$$

állapotfüggvény

$$\psi(\vec{r}_i, \vec{R}_j) = \theta(\vec{r}_i, \vec{R}_j) \phi(\vec{R}_j)$$

$$\psi_a(x, Q) = \theta_a(x, Q) \phi_a(Q)$$

elektronok magok

Born-Oppenheimer közelítés
az elektronok mozgása független a magokétól

A kiválasztási szabályok kvantummechanikai háttere

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_e + \vec{\mu}_{mag} = \sum q_e^* \vec{r}_i - \sum z_j^* q_e^* \vec{R}_j \quad \text{dipól operátor}$$

$$\psi_a(x, Q) = \theta_a(x, Q) \phi_a(Q) \quad M_{a \rightarrow g} = \langle \psi_a | \hat{\mu} | \psi_g \rangle$$

$$M_{a \rightarrow g}(Q) = q_e \int \theta_a^*(x, Q) [\sum \vec{r}_i] \theta_g(x, Q) dx$$

$$M_{gn \leftarrow a0} = \int \phi_{a0}^*(Q) M_{ag}(Q) \phi_{gn}(Q) dQ \equiv \bar{M}_{ag} \int \phi_{a0}^*(Q) \phi_{gn}(Q) dQ$$

komplex konjugált

Atomtörzsek vibrációs állapotai:
g, n -- a gerjesztett molekuláris elektronállapot n-ik vibrációs állapota

Abszorpciós spektroszkópia biofizikai alkalmazások

$$\lg \frac{I_0}{I} = \varepsilon(\lambda) * c * x$$

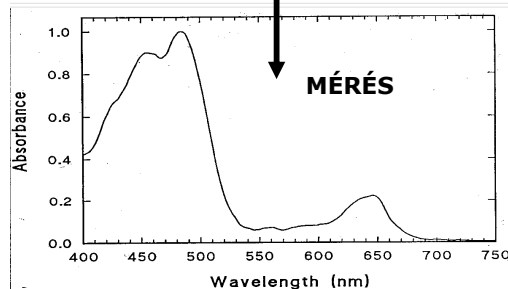
küvetta rétegvastagsága

moláris konc.

Abszorbanca
Optikai Denzitás

moláris extinkció

Molekuláris szerkezetvizsgálat



Az a-g átmeneti valószínűség
az összes vibrációs állapotokat tekintve

$$K_{spin} * |M_{a \rightarrow g}|^2 = const. * \int \frac{\varepsilon(f)}{f} df$$

multiplicitás hullámszám

Fontos mennyiségek

Oscillátor erő

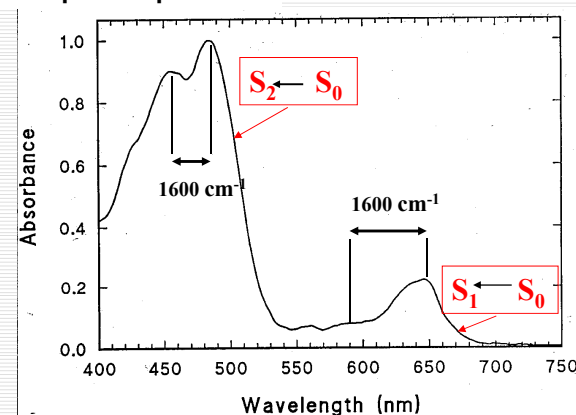
$$f = 4.3 * 10^{-9} \int \varepsilon(\tilde{\nu}) * d\tilde{\nu}$$

$$hf = \text{fotonenergia (eV)} = 1234 \frac{1}{\lambda(\text{nm})}$$

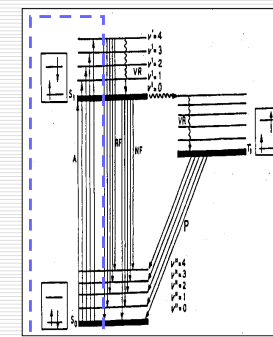
$$\text{Hullámszám (cm}^{-1}\text{)} = (1 / \lambda(\text{nm})) * 10^7$$

pl. Vibrációk energiája
100 – 2000 cm⁻¹

Kloroplaszt spektruma



Elektronátmenetek és
molekuláris rezgések
gerjesztése



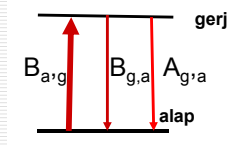
„vibronikus”átmenetek

3.2. Fényabszorpció – fényemisszió

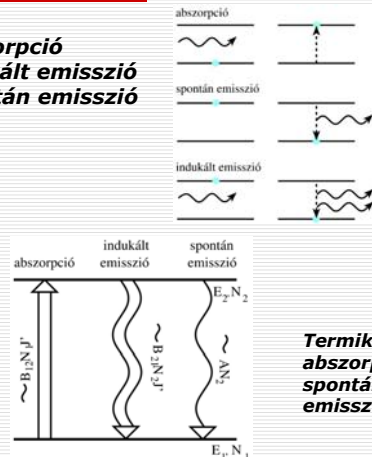
Fluoreszcencia: spontán fényemisszió gerjesztett állapotból azonos spinállapotú alapállapotba

Átmeneti valószínűségek

Einstein együtthatók: B_{ag} abszorpció
 B_{ga} indukált emisszió
 A_{ga} spontán emisszió

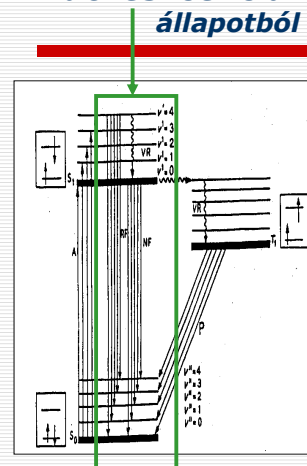


Feltétel: $hf = \Delta E_{ga}$
 fotonsugárzás jelenléte



3.2. Fényabszorpció – fényemisszió

Fluoreszcencia: spontán fényemisszió gerjesztett állapotból azonos spinállapotú alapállapotba



$\frac{N_{em}}{N_{abs}} = \Phi_F$ **Fluoreszcencia emisszió kvantumhatásfoka**

$$\Phi_F = A_{g \rightarrow a} = 8\pi h f_{a \rightarrow g}^3 n^3 c^{-3} B_{g \rightarrow a}$$

$$B_{g \rightarrow a} = B_{a \rightarrow g} = K * M_{a \rightarrow g}^2$$

$$\Phi_F = \int F(\tilde{\nu}) d\tilde{\nu} \quad \tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} \propto \int \frac{\epsilon(\tilde{\nu})}{\tilde{\nu}} d\tilde{\nu}$$

Fluoreszcencia spektrum

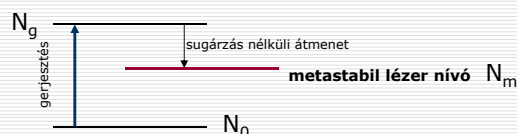
az abszorpciós és emissziós spektrumok görbe alatti területei (azonos állapotok között) egymásból kiszámíthatók

2.2. Lézerek működési elve

A lézer anyaga

Gáz, folyadék, szilárd test

Követelmény: a gerjesztési és emissziós elektron-átmenetek **három energiaállapoton belül** történjenek, amelyek közül az egyik magasabb nívónak legyen hosszú az élettartama – **lézer-nívó**



2.2. Lézerek működési elve

A lézer anyag gerjesztése

Az elektronok gerjesztése külső forrásból:
 Pl. gázkisülés, fényimpulzus

Intenzív gerjesztés \longrightarrow a felső nívó populálása \longrightarrow

átmenet a metastabil nívóra $\longrightarrow N_m$ a hosszú élettartam

miatt megnő, az alsó nívó kiürül:

$$N_m \gg N_0$$

populáció inverzió: a fényerősítés feltétele

2.2. Lézerek működési elve

Fényerősítés indukált emisszióval

Populáció inverzió mellett a rendszer

a $hf = E_m - E_0$ fotonenergiájú sugárzást

erősíti, ilyen foton **indukálja** az emissziót

N_m nagy \longrightarrow néhány spontán emisszió E_0 -ra

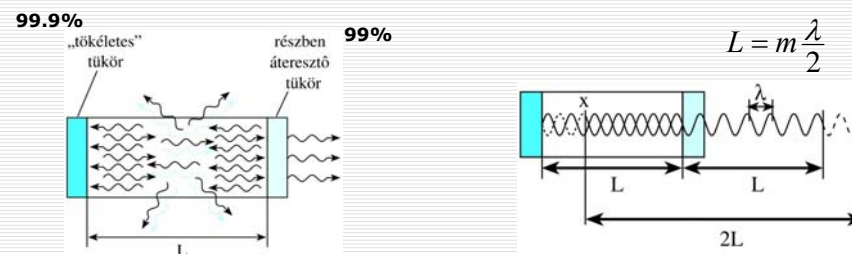
\longrightarrow fényerősítés

2.2. Lézerek működési elve

Az optikai rezonátor

Erősíti a lézer tengelyével egyirányú sugárzást

Leszűkíti az emisszió hullámhossztartományát



állóhullámok kialakulása

Mai kérdés:

Hogyan alkalmazná az alábbi képletet, és milyen adatok hiányoznak, ha azt akarjuk megbecsülni a segítségével, hogy egy sok kötéssel stabilizált óriás-molekulában hány %-ban vannak felszakadt kötések?

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-\frac{\Delta \varepsilon}{kT}}$$