

Fényszórás mérése

A megfigyelhető jelenségek

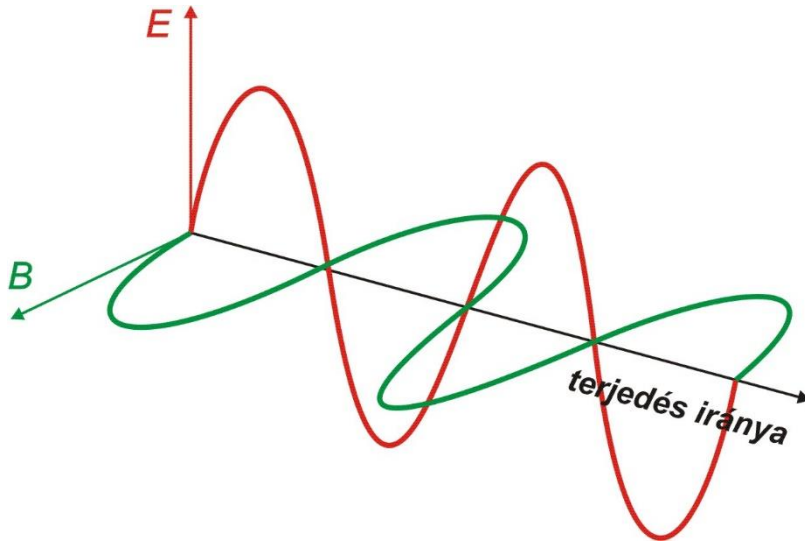




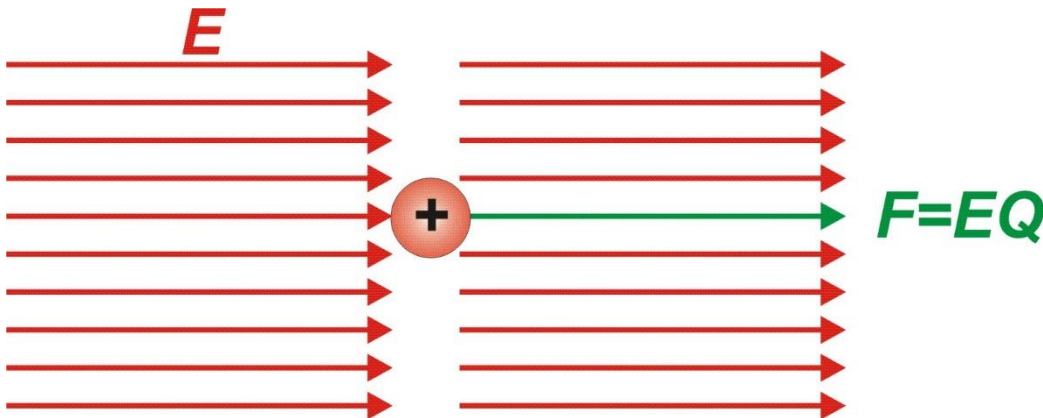
Sóoldat

liszt szuszpenzió

A jelenség magyarázata



A fény
elektromágneses
hullám.

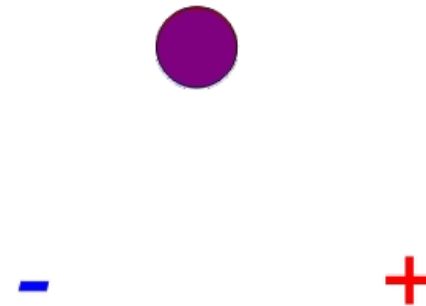
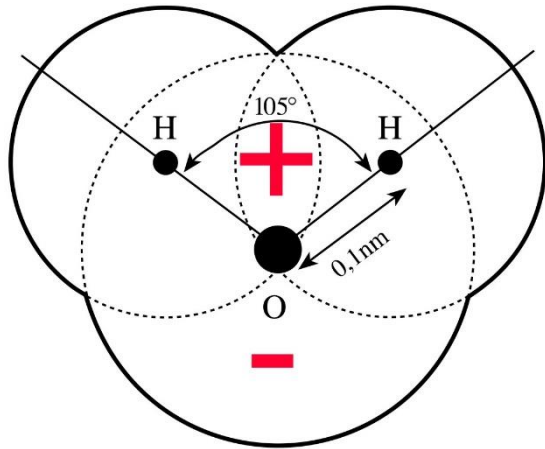


Az elektromos tér
töltésekre
erőhatást fejt ki.

A dipólus keletkezése

Dipólusok: a pozitív és a negatív töltések súlypontja nem esik egybe.

Időlegesen létrejövő dipólusok



pl. víz – állandó dipólus

Oscilláló dipólusok

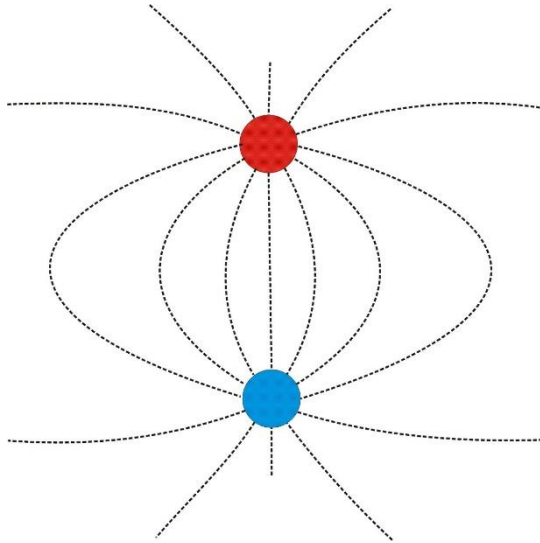
Váltakozó elektromos
erőtér.



Oscilláló dipólusokat
hoz létre.



Dipólusok erőtere



$$\mathbf{d} = q\mathbf{l}$$

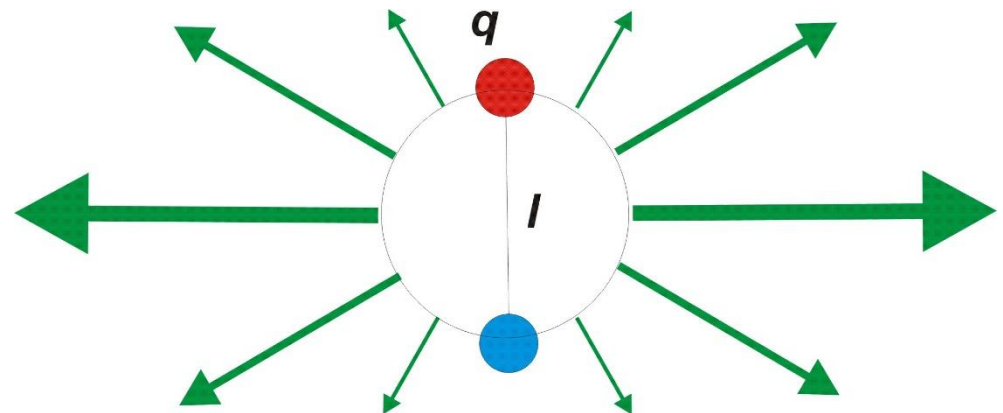
(vektor mennyiség)

Jellemző mennyiségek:

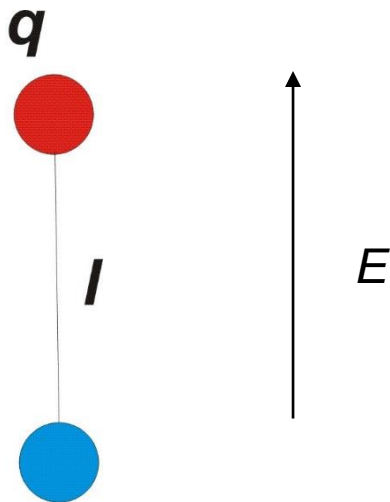
q – töltés

l – a töltések közötti
távolság

\mathbf{d} – dipólus momentum



Polarizálhatóság



Polarizálhatóság:

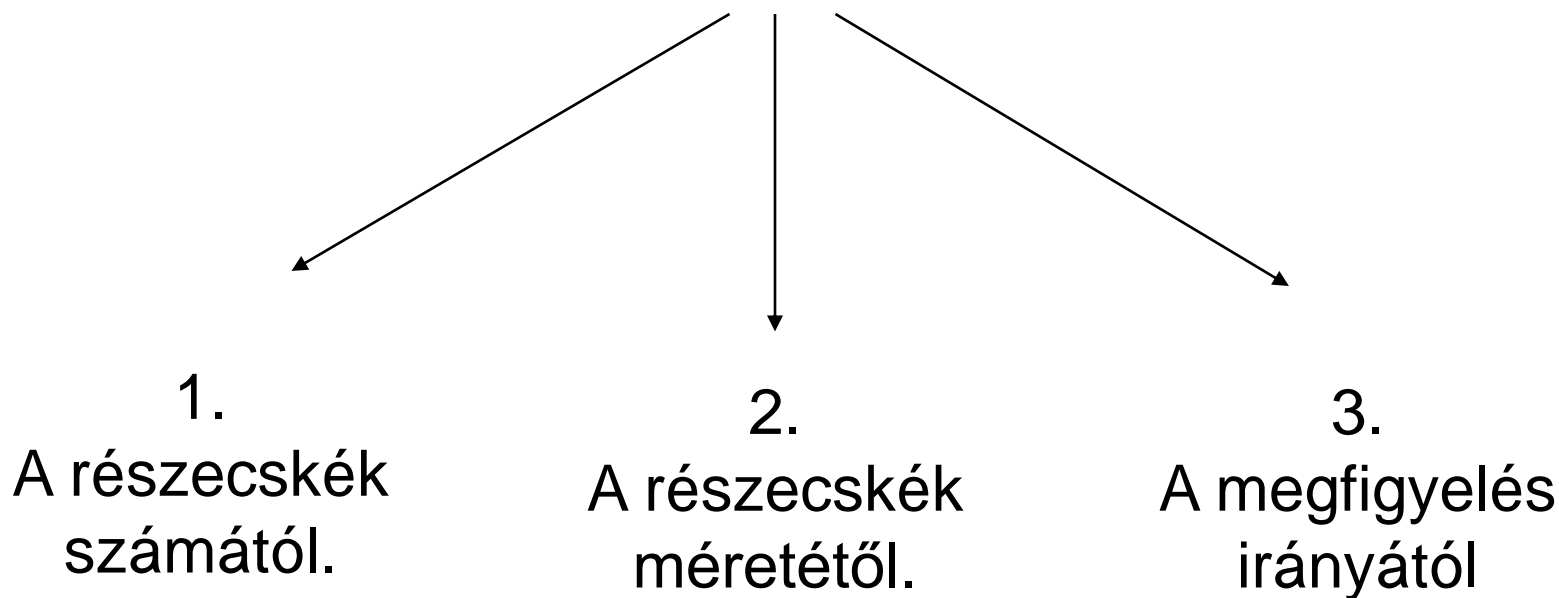
Egységnyi erősségű
elektromos tér által keltett
dipólmomentum nagysága.

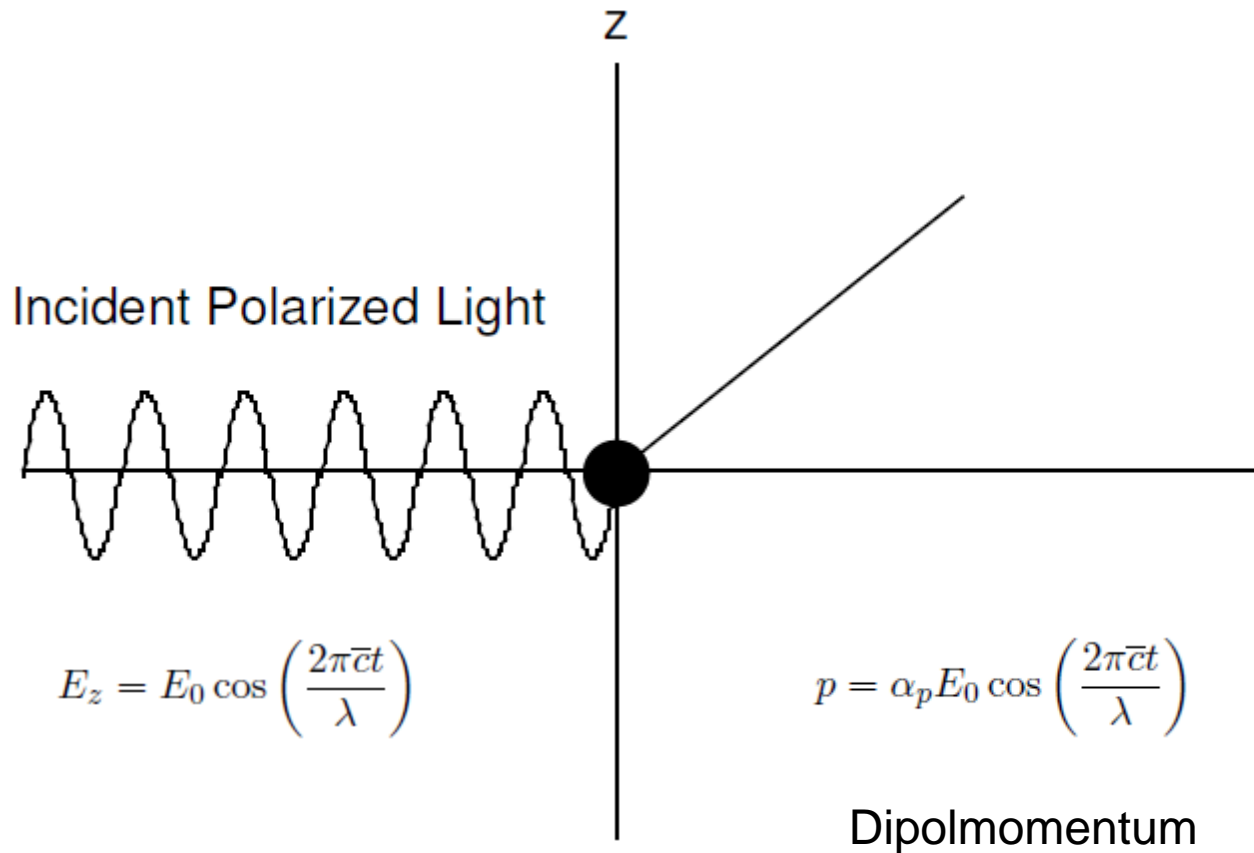
$$d = \alpha E$$

Kvantitatív felhasználás

Mérhető mennyiség: a szórt fény intenzitása.

Mitől függ?



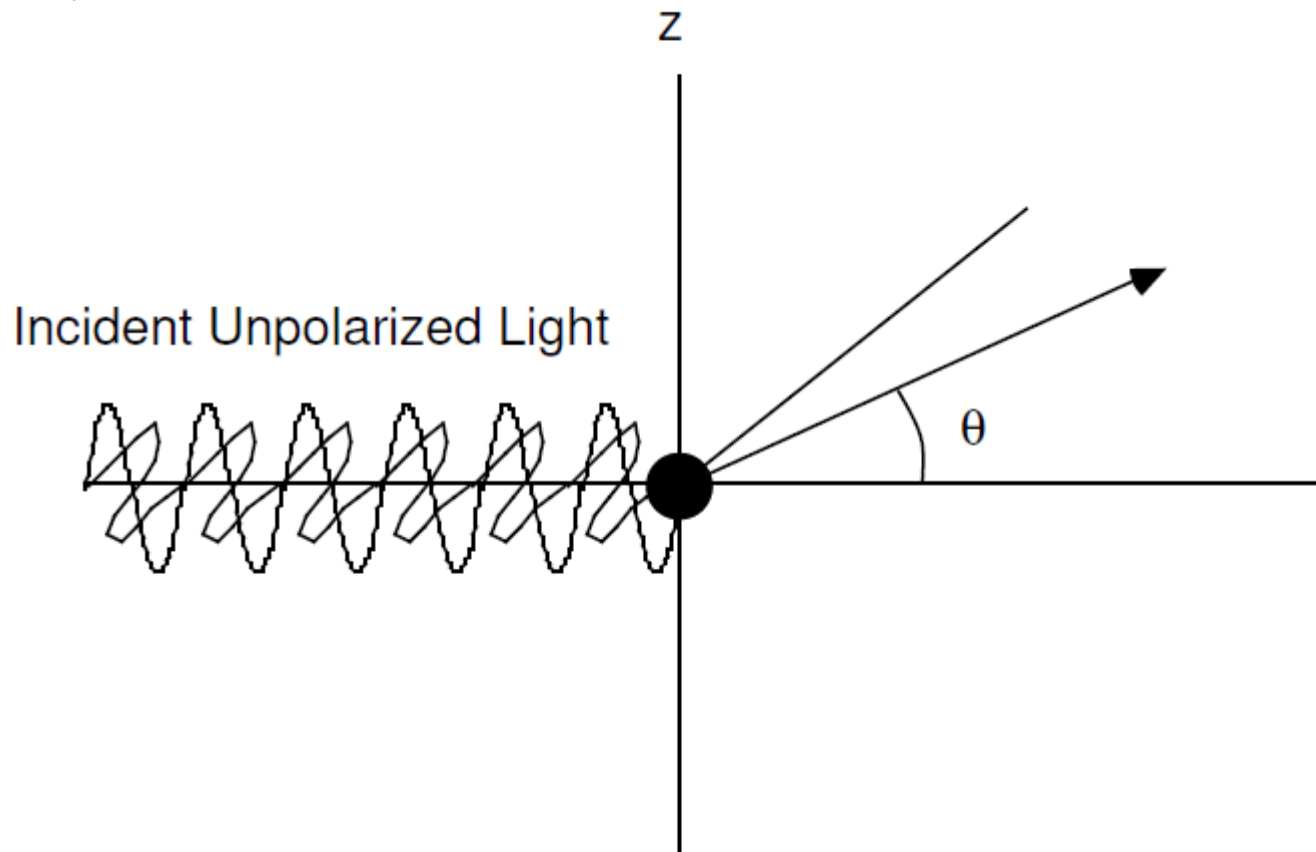


A keltett elektromos térerősség: $(1/\bar{c}^2)(d^2p/dt^2)$

Ami:

$$E_s = \frac{1}{r} \frac{1}{\bar{c}^2} \frac{d^2p}{dt^2} = -\frac{1}{\bar{c}^2} \alpha_p E_0 \frac{4\pi^2 \bar{c}^2}{r \lambda^2} \sin \theta_z \cos\left(\frac{2\pi \bar{c}t}{\lambda}\right)$$

Végül az intenzitás a térerősség négyzetével arányos....



Polarizáltakatlan fényre pedig az x,y irányokat össze kell adni.

$$I_s = \frac{1}{2}I_{sz} + \frac{1}{2}I_{sy} = I_0 \frac{8\pi^4 \alpha_p^2}{c^2 \lambda^4} (\sin^2 \theta_z + \sin^2 \theta_y)$$

Viszont: $\sin^2 \theta_z + \sin^2 \theta_y = 1 + \cos^2 \theta$

Végül, jó sok számolással...

A szórt fény intenzitása

$$J_{szórt} = J_0 \frac{8\pi^4 N \alpha^2}{\lambda^4 R^2} (1 + \cos^2 \Theta)$$

α – polarizálhatóság

N – részecskeszám

λ – hullámhossz

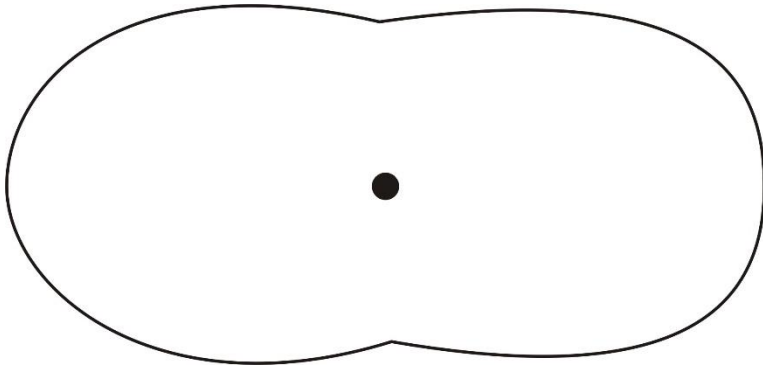
R – a detektor távolsága

Θ - a megfigyelés szöge

Szórásprofil

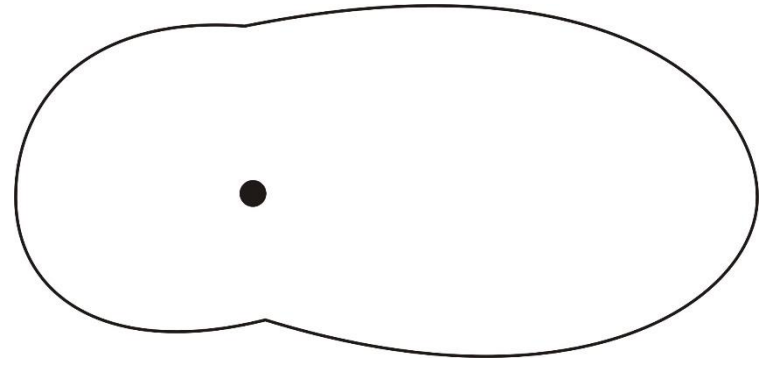
Raleigh-szórás

A részecskék mérete $< \lambda$

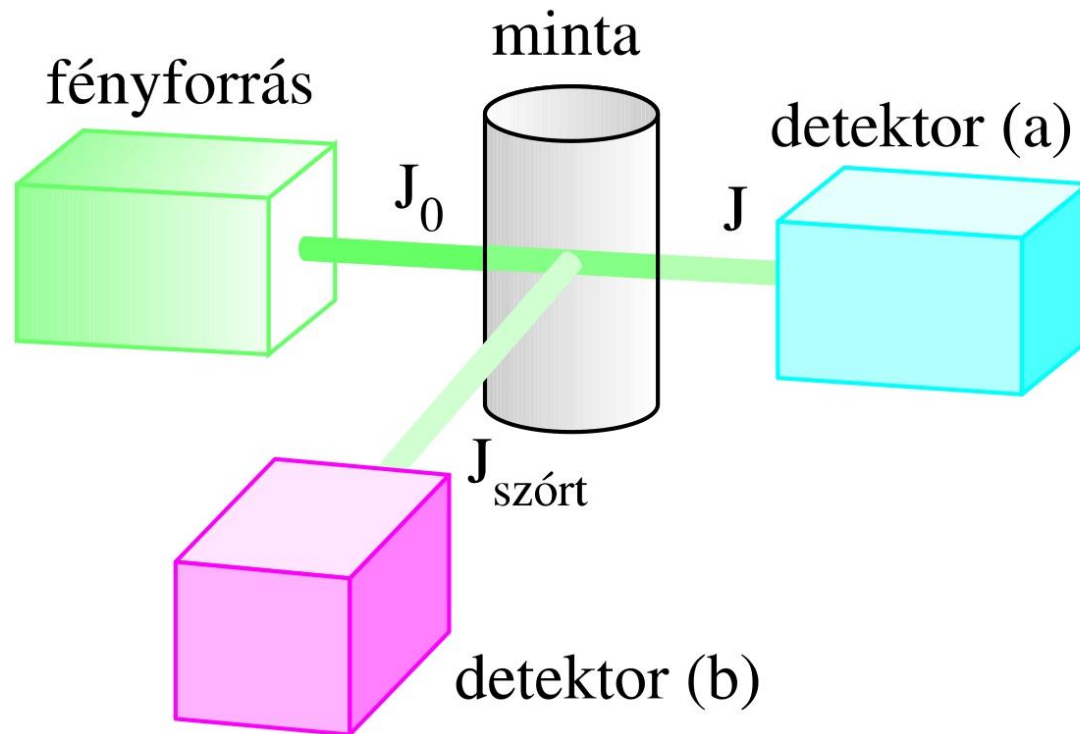


Mie-szórás

A részecskék mérete $> \lambda$



Intenzitás mérések



Nefelometria

Kismértékű fényszórás esetében.

A szórt fény intenzitása
arányos a
koncentrációval.



Turbidimetria

Nagymértékű fényszórás esetében.

Az eredeti irányba tovahaladó fény
intenzitását mérik.

A mért optikai denzitás arányos a
koncentrációval.



Részletesebb információ



Intenzitás szög
szerinti eloszlása.



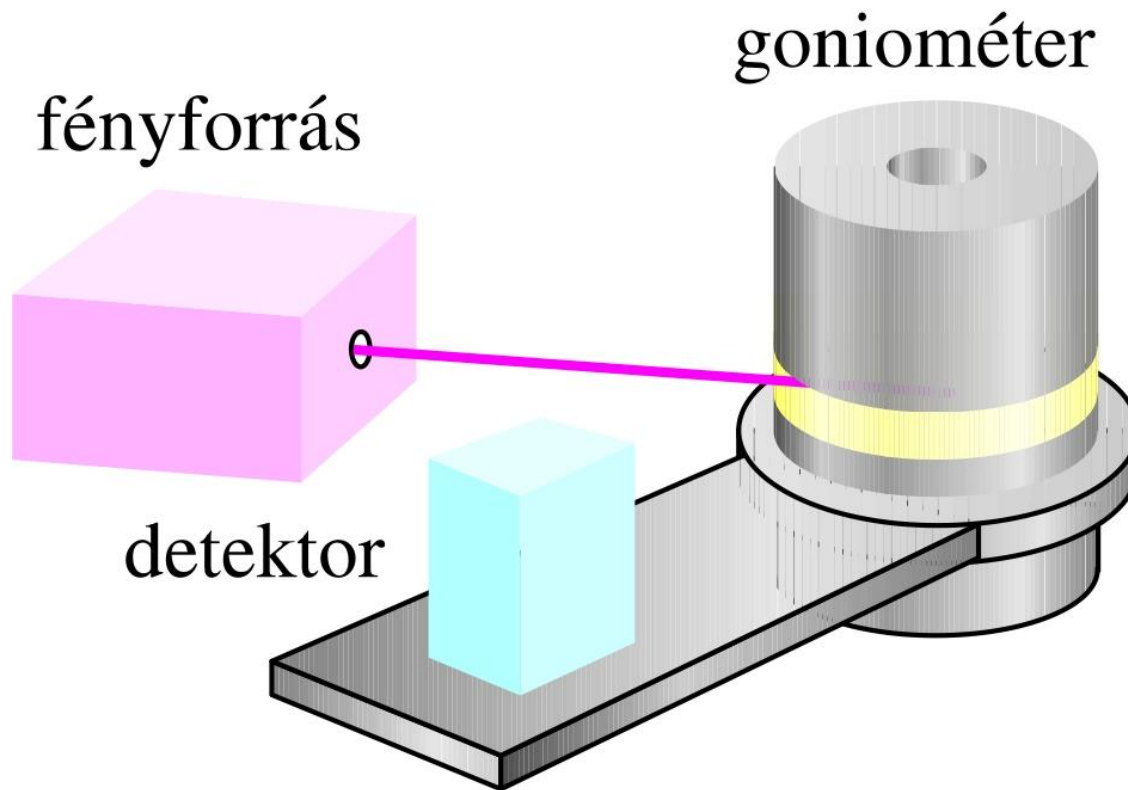
Statikus fényszórás-
mérés

Intenzitás időbeli
ingadozásai, fluktuációi



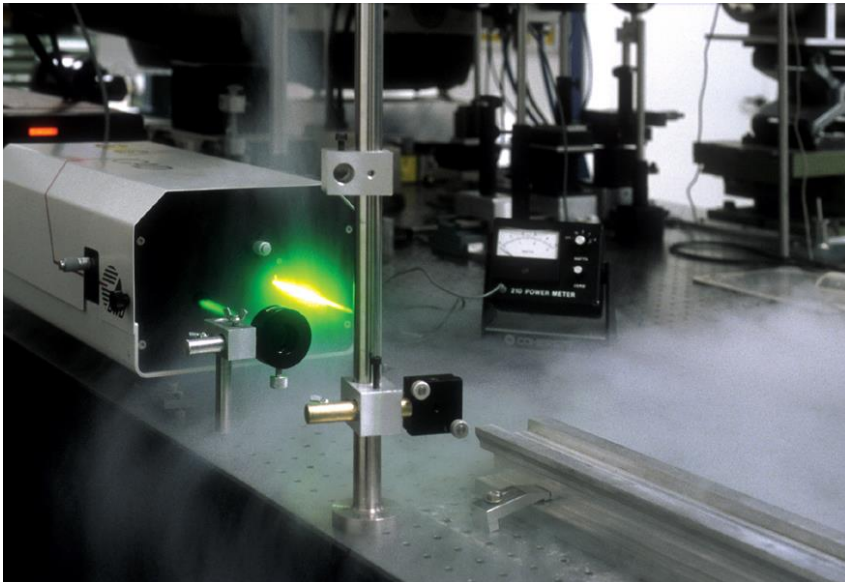
Dinamikus fényszórás-
mérés

Fényszórás mérő felépítése



Fényforrások

- Követelmények:
- monokromatikus,
 - polarizált,
 - viszonylag nagy teljesítményű, legyen.



Lézerek:

leggyakrabban Ar-ion
lézer,

de pl. He-Ne lézer.

Detektorok

- Nagy érzékenység: akár egy foton detektálása is.
- Kis sötétáram, kevés zaj.
- Jó időbeli felbontás.

Fotoelektron-sokszorozó



Avalanche fotodióda



Statikus fényszórás-mérés

A szórt fény intenzitásának mérése a szög függvényében.

H – állandó

c – koncentráció

M – mólsúly

$P(q)$ – alakfaktor

$$\frac{Hc}{R_{ex}} = \frac{1}{M \cdot P(q)} + 2A_2c$$

$$q = \frac{4\pi n}{\lambda} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right)$$

$$R_{ex} = \frac{J_{oldat} - J_{oldószér}}{R^2 J_0}$$

Információk

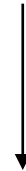
Kisméretű részecskék
esetében $P(q) = 1$



ha c és Θ tart a nullához, a
mólsúly meghatározható

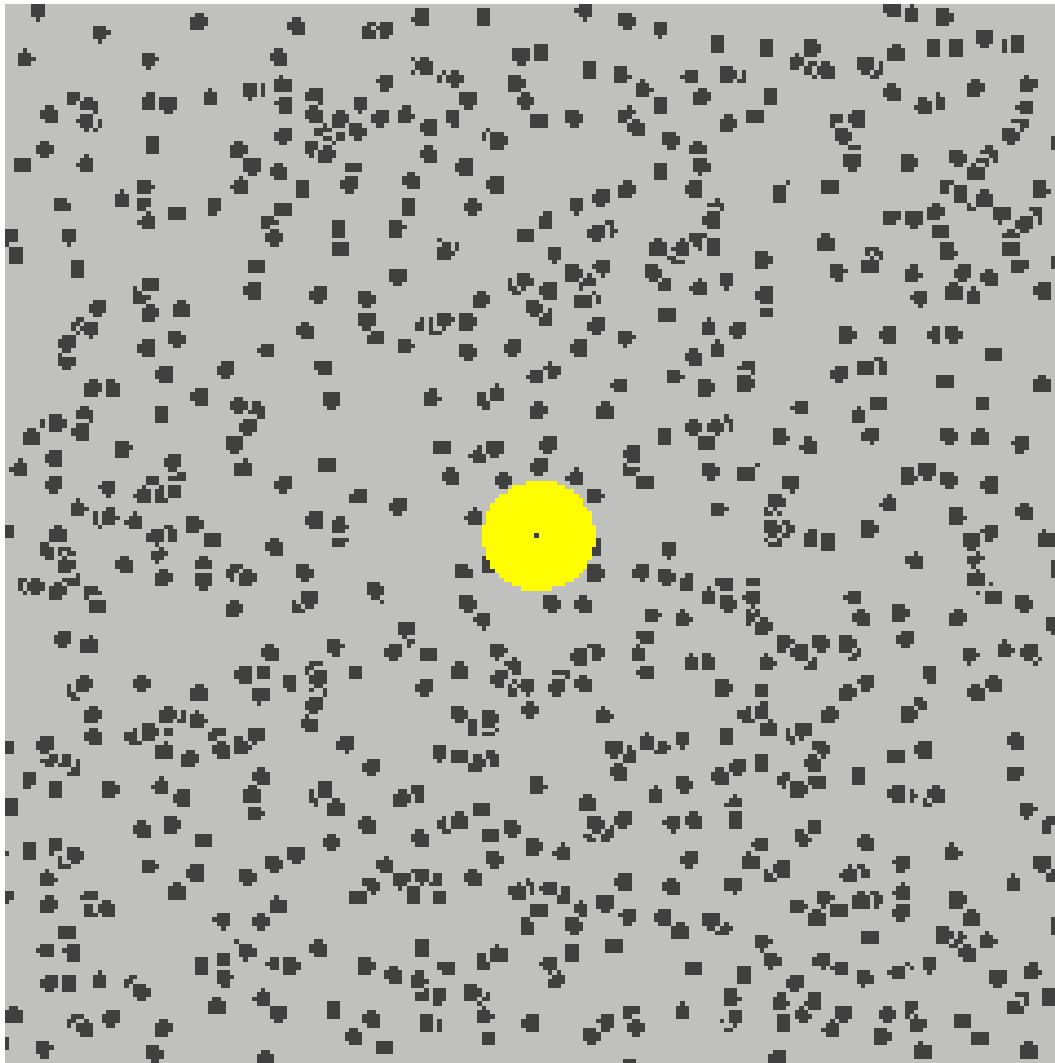
$$\frac{Hc}{R_{ex}} = \frac{1}{M}$$

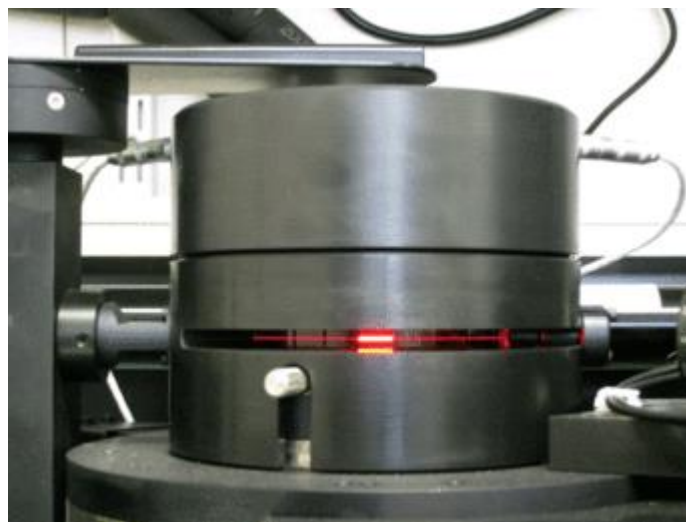
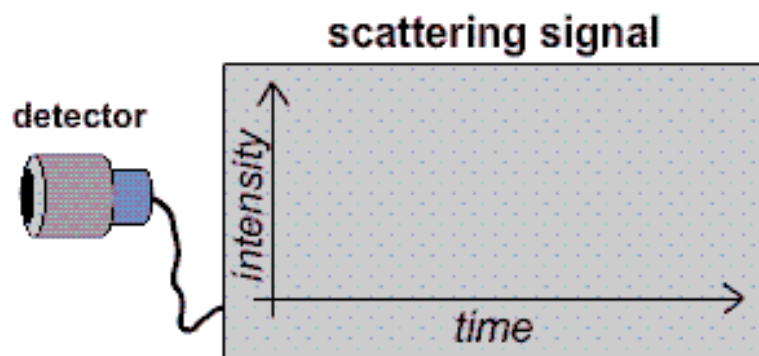
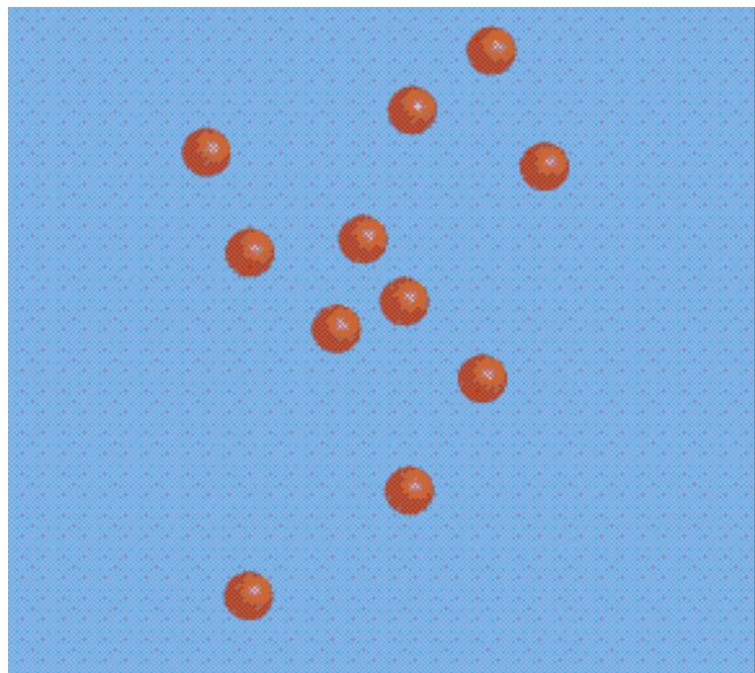
Nagyméretű
részecskék esetében



A forgási sugár
határozható meg, ill. az
alakfaktor alapján a
részecske alakjáról
kaphatunk információt.

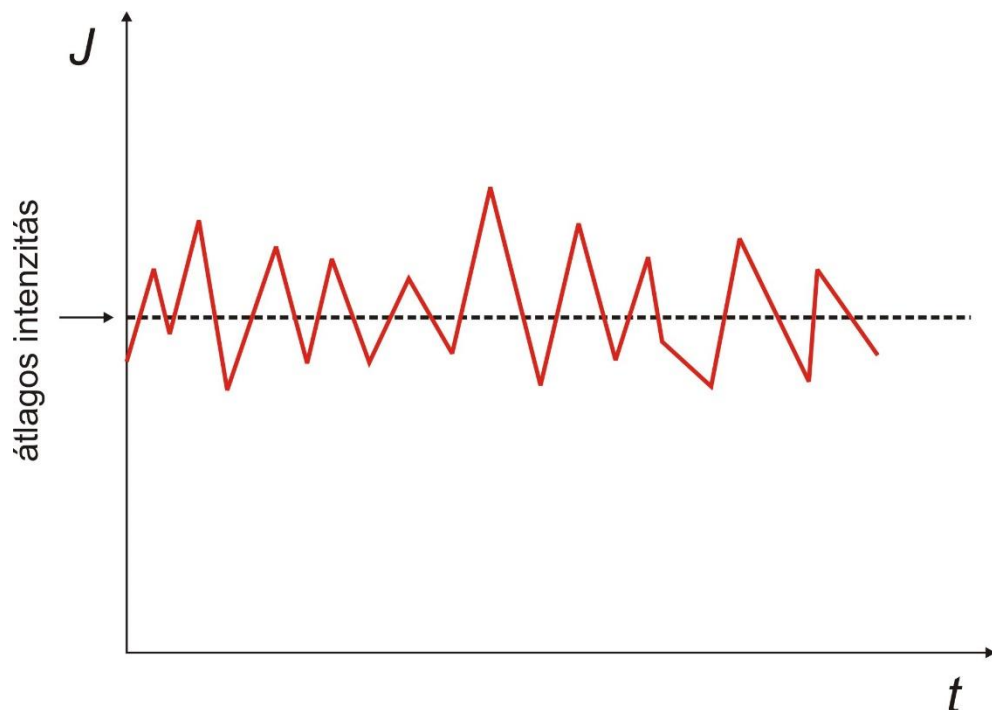
Dinamikus fényszórás-mérés





Dinamikus fényszórás-mérés

Az intenzitás időbeli változásának,
fluktuációjának megfigyelése.



A fluktuáció oka:

A részecskék
véletlen mozgása,
diffúziója.

Diffúzió

Jellemző mennyiség: a diffúziós állandó (D).

Fick I.:

$$\frac{dm}{dt} = -D \cdot q \cdot \frac{dc}{dx}$$

$$\bar{R}(t) = \sqrt{3Dt}$$

Gömb alakú részecskék esetében:

$$D = \frac{kT}{6 \cdot \pi \cdot \eta \cdot r}$$

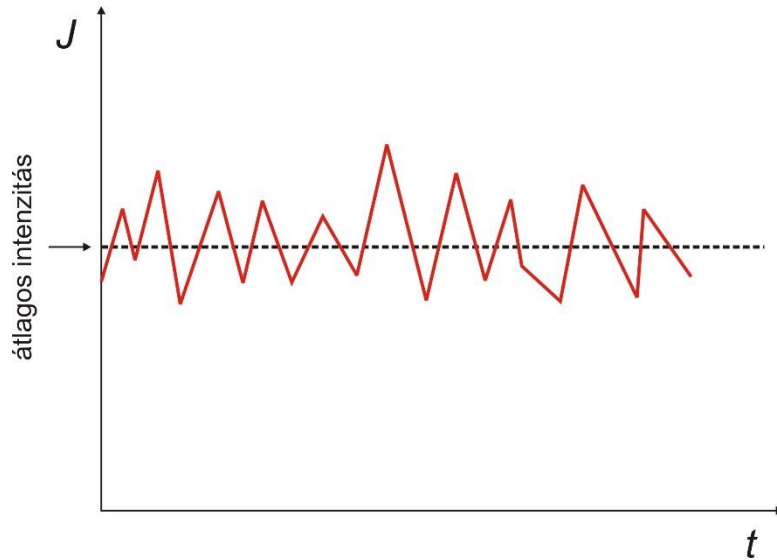
k – Boltzmann áll.

T – hőmérséklet

η – a közeg viszkozitása

r – a részecske sugara

Feldolgozás



A fluktuációk jellegzetes időskálája μs nagyságrendű.

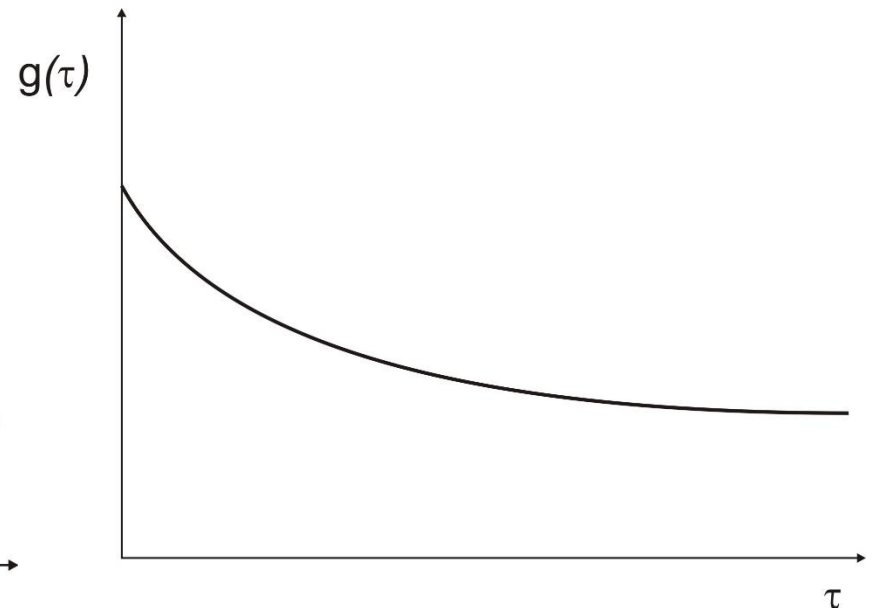
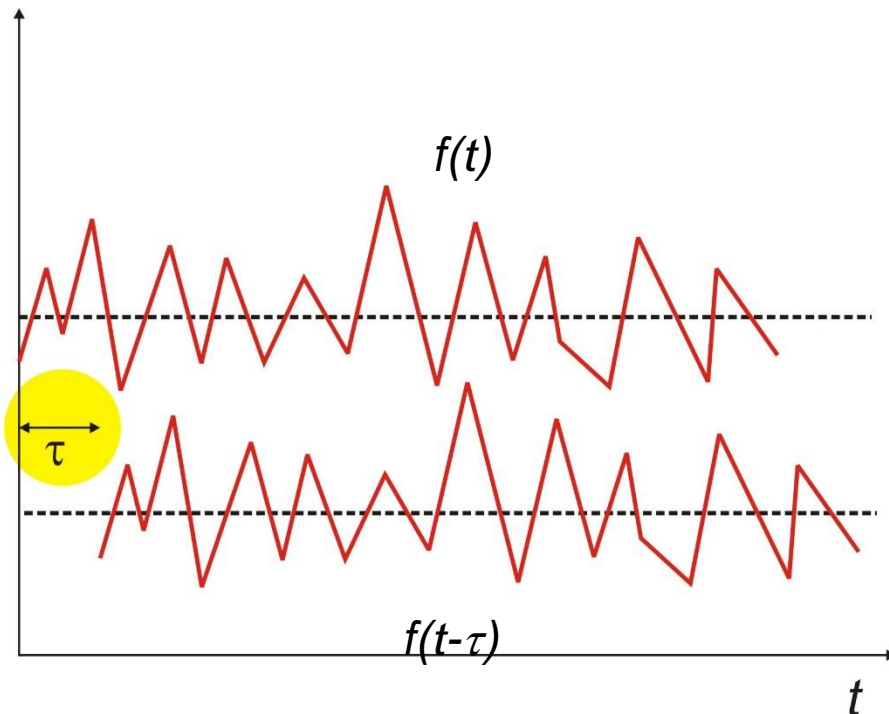
Az egymás után beérkező fotonok számlálása.

Az autokorrelációs függvény

Az eredeti függvényt
eltoljuk τ értékkel.

$$g(\tau) = \sum_t f(t) \cdot f(t - \tau)$$

$$g(\tau) = \int_t f(t) \cdot f(t - \tau) d\tau$$



Miről árulkodik?

Az autokorrelációs függvény értékének csökkenése a részecskék helyzetének a megváltozása miatt következik be.

Minél gyorsabban mozognak a részecskék, annál gyorsabban cseng le a görbe.

Monodiszperz rendszer

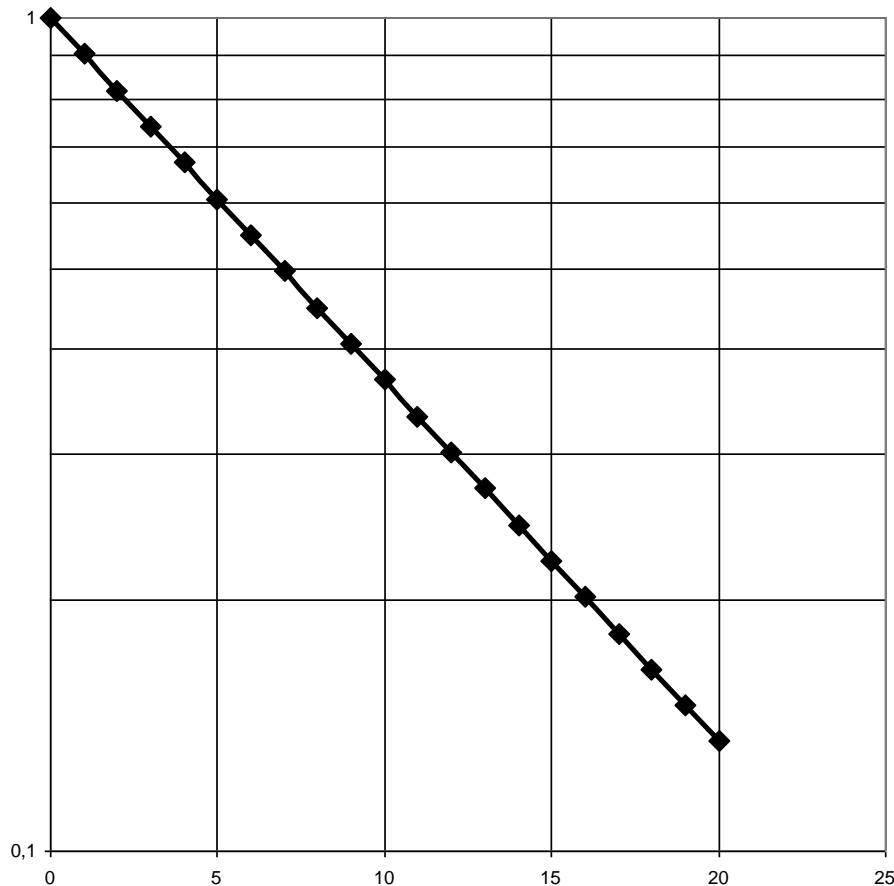
A részecskék mérete azonos, a mozgásukra jellemző diffúziós állandó is azonos.

Az autokorrelációs függvény egy egyszerű exponenciális függvényként írható le.

$$g(\tau) = e^{-\Gamma \tau} + 1$$

$\Gamma \sim D$ -vel, vagyis meghatározható a D és ebből a r .

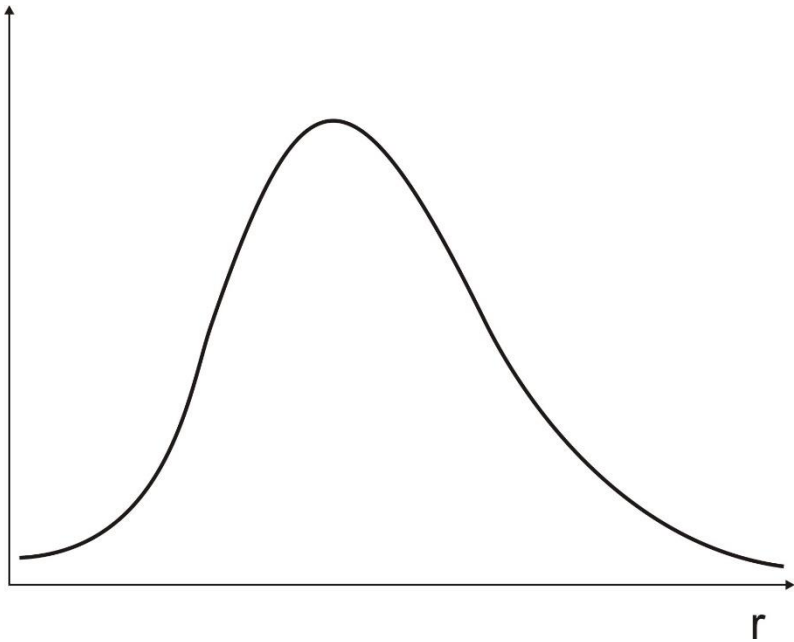
Legkisebb négyzetek módszere



A legjobban illeszkedő egyenes esetében a pontok eltéréseinek négyzetösszege (Q) minimális.

A mért pontokhoz egyenest illesztünk és a meredekségből kiszámolható a diffúziós állandó.

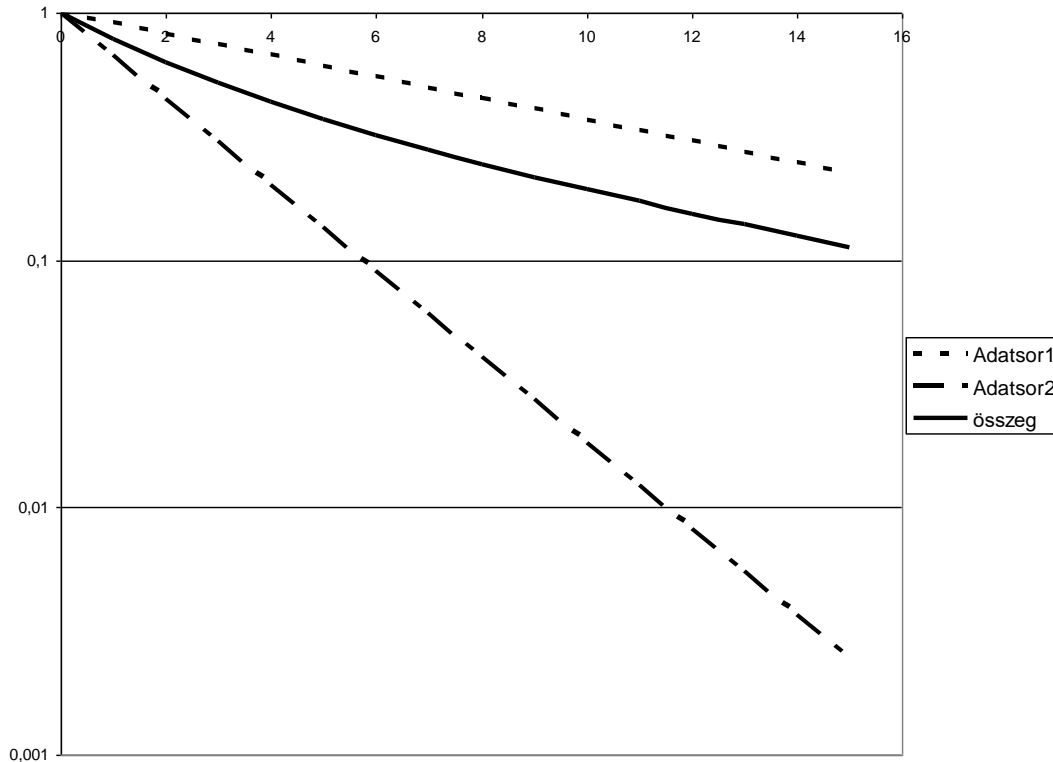
Polidiszperz rendszer



Sokféle méretű részecske.
Az egyes méretekre
jellemző autokorrelációs
függvények összeadódnak.

$$g(\tau) = 1 + \sum_i e^{-\Gamma_i \tau}$$

Kiértékelés problémái



Az összeg
alapján nem
tudjuk
egyértelműen
meghatározni a
diffúziós
állandókat.

Melyik eloszlás illeszkedik?

A mért függvény zajjal is terhelt.



Sok lehetséges eloszlás esetében kaphatunk megoldást.

Jellemzésre csak egy eloszlásfüggvény használható!

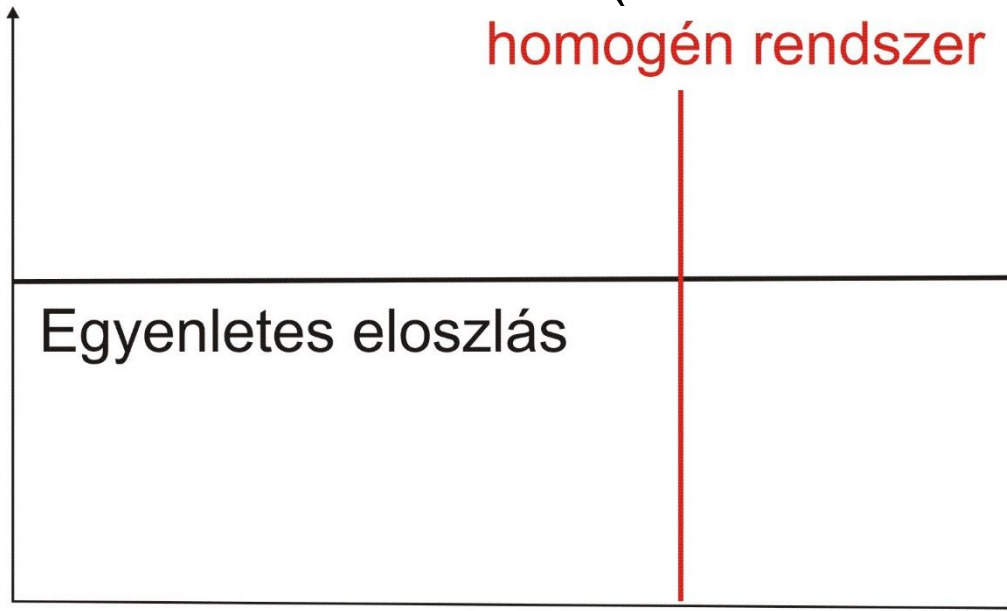


Entrópia fogalma a matematikában

Fizika: entrópia a rendezetlenség mértéke.
($S = k \ln w$)

Matematika: hasonló jelentés a részecskék
méreteloszlása esetében.

(Maximális értéke = 0)



Legrendezetlenebb:
az egyenletes
eloszlás.

Legrendezettebb: a
homogén rendszer.

Maximum entrópia elve

A sok lehetséges eloszlás közül az a legvalószínűbb, amelynek a legnagyobb az entrópiája (S).

Minden eloszlás közül az egyenletes eloszlás entrópiája a legnagyobb.

Milyen eloszlások közül válasszunk?



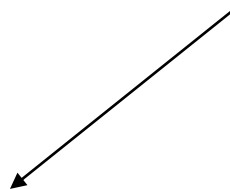
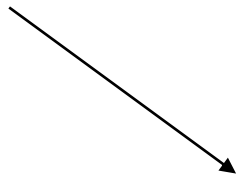
Maximum Entrópia Módszer

Legkisebb
négyzetek elve

Maximum entrópia
elve

Q

S



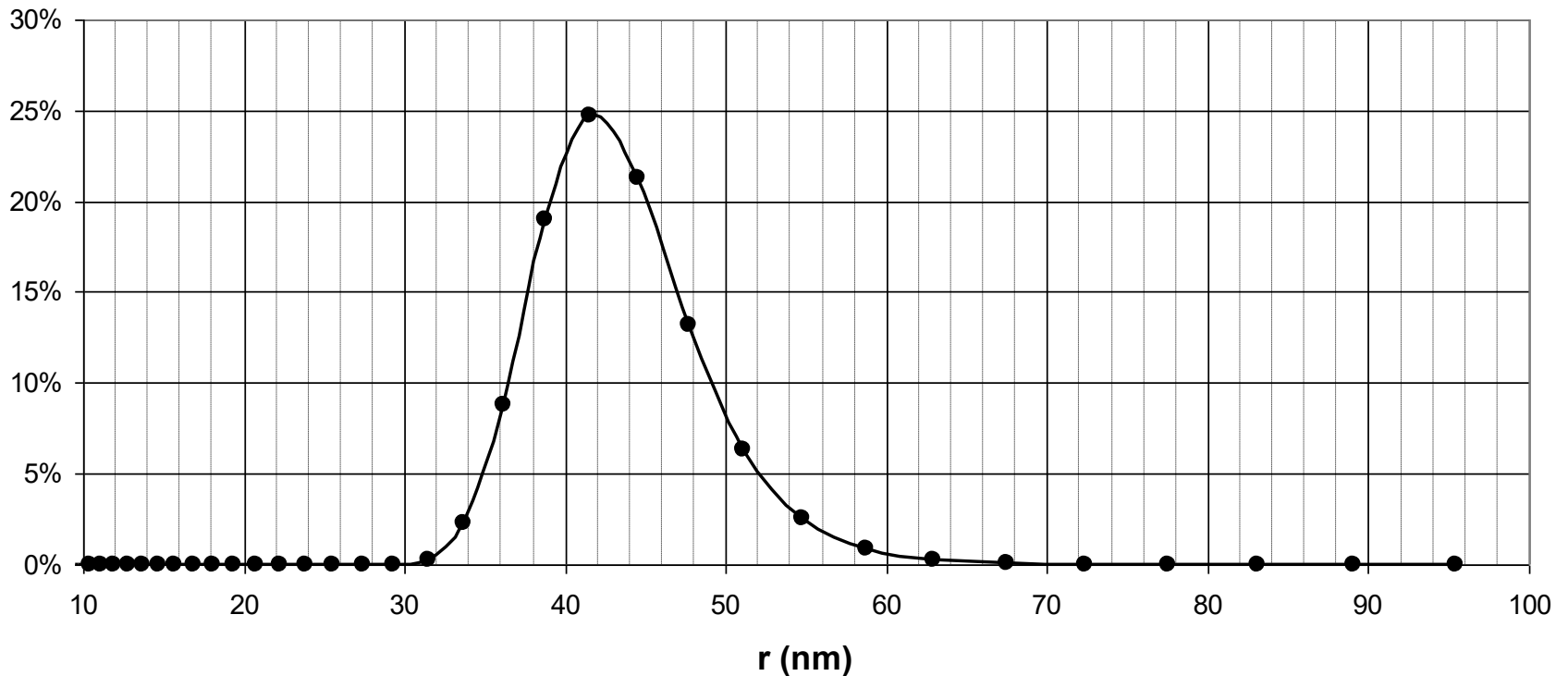
$$L = Q - \alpha S$$

Az L értéke legyen minimális.
Az α egy becsült paraméter.

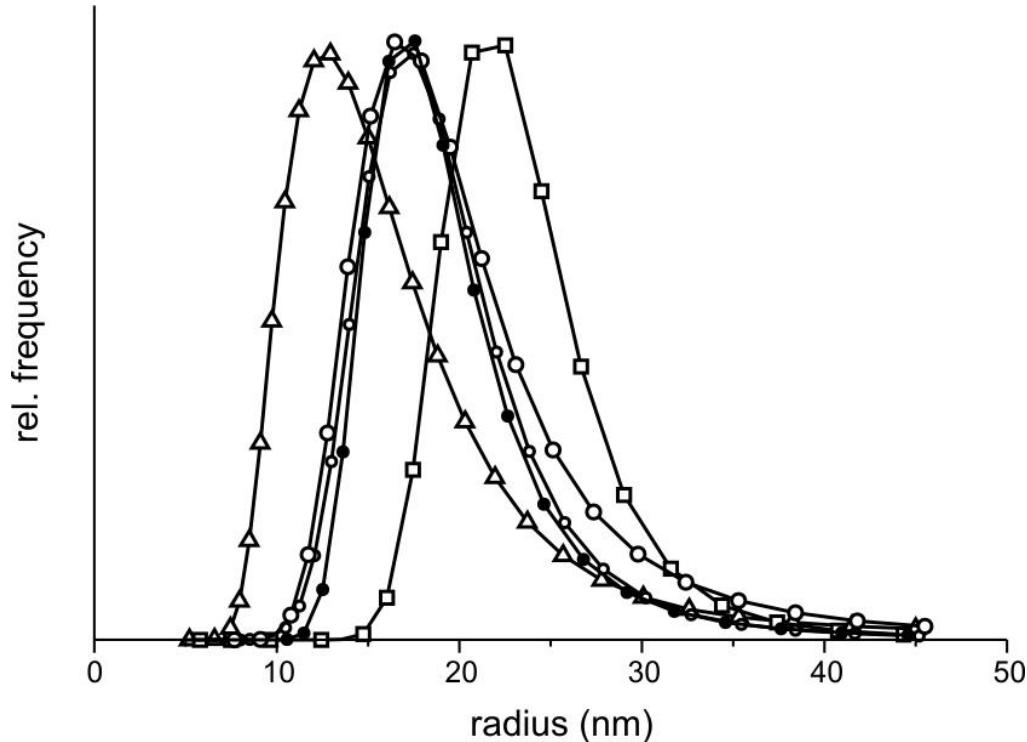
Kalibrálás

PI. meghatározott méretű és eloszlású polisztirol gömböcskék segítségével.

polisztirol (86 nm) részecske méreteloszlás



Egy alkalmazás



Méreteloszlás

(kis unilamelláris
liposzóma, SUV-ok)

- DMPC (Δ);
- DPPC ($\bigcirc, \bigcirc, \bullet$ 3 minta;
- DSPC