

# Fény kölcsönhatása az anyaggal: szórás, abszorpció

Orvosi Biofizika I. 2024. október 28.

Kellermayer Miklós

Biofizikai és Sugárbiológiai Intézet

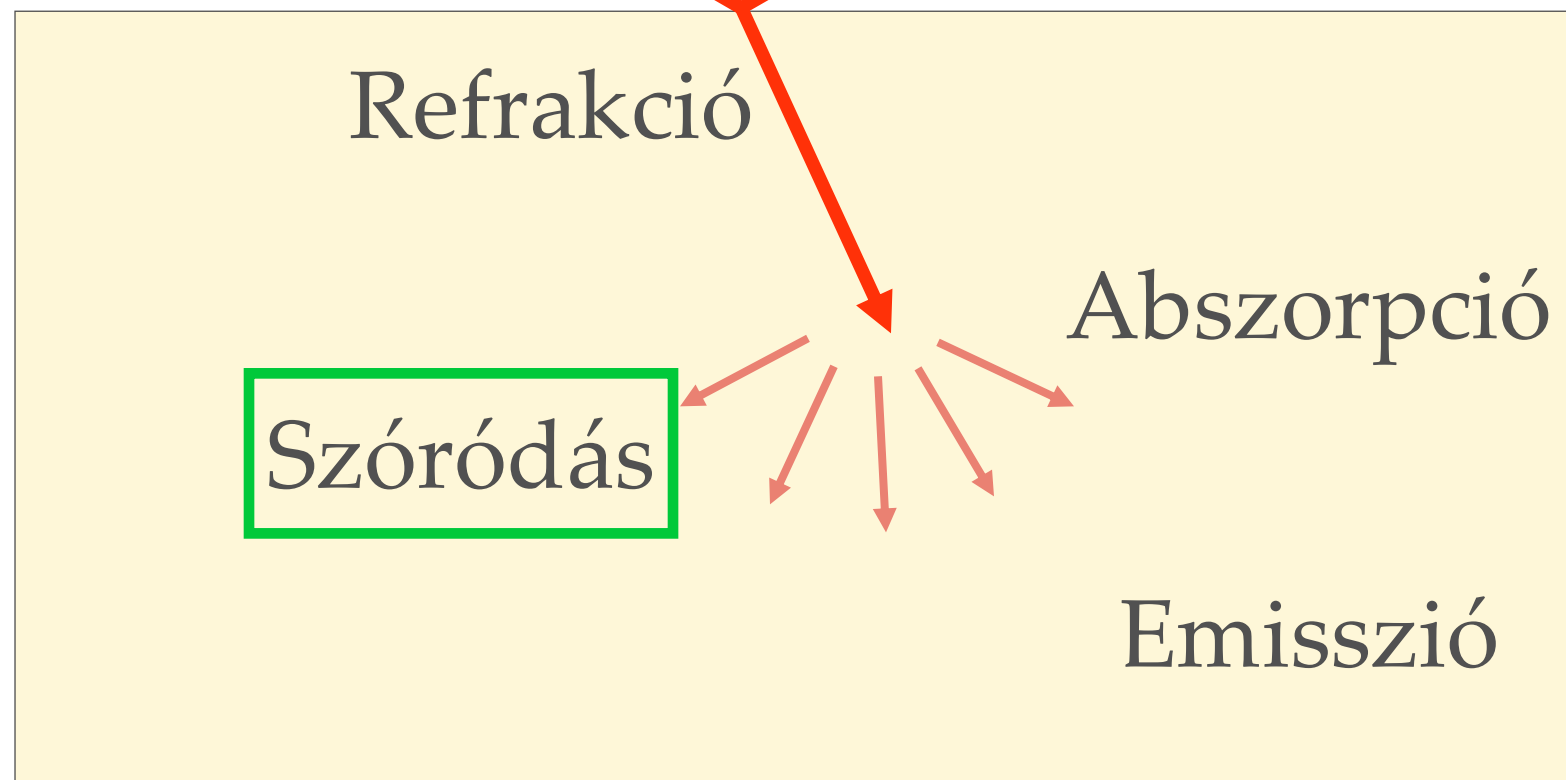


**SEMMELWEIS**  
EGYETEM 1769

# Fény kölcsönhatása az anyaggal

Beeső nyaláb

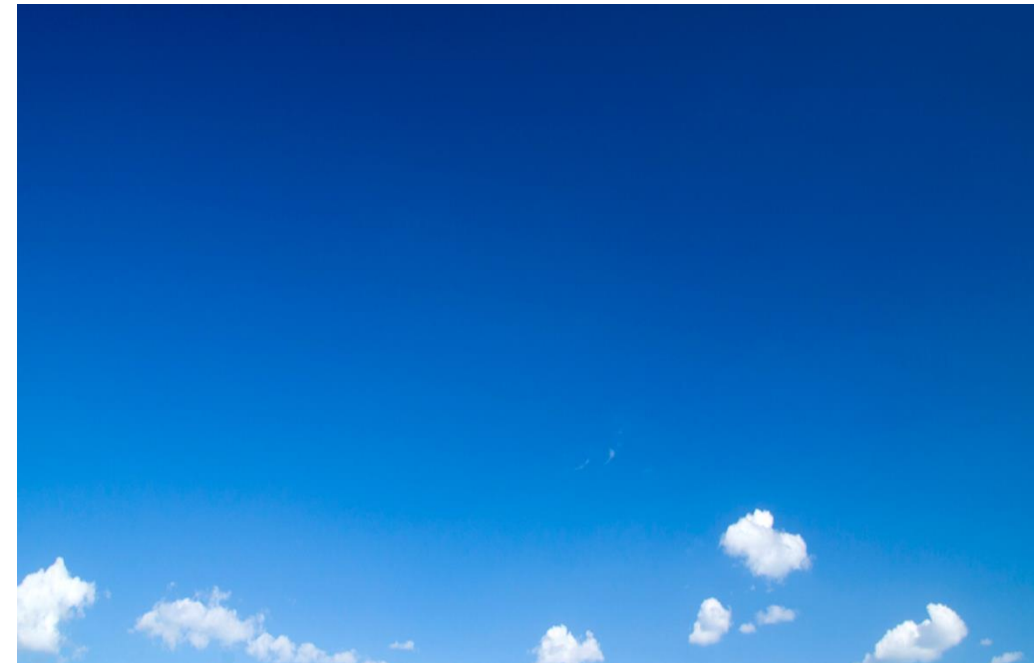
Reflexió



# Fényszórás



Vajon mik ezek a sugarak?Krepuszkuláris sugarak (Szent Péter bazilika)



Miért kék az ég?

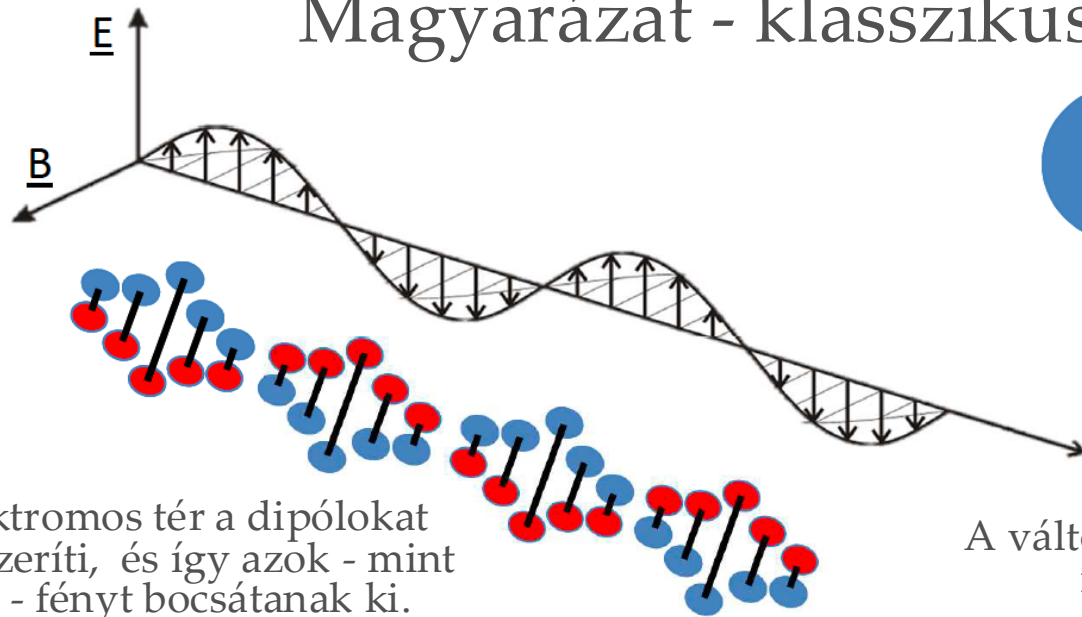


Mitől vörös a naplemente?

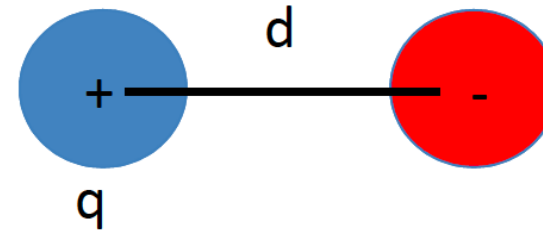
# Fényszórás

## Magyarázat - klasszikus fizika

Fény mint elektromágneses hullám ( $E, B$ : elektromos és mágneses térerősség)



A változó elektromos tér a dipólokat rezgésre kényszeríti, és így azok - mint oszcillátorok - fényt bocsátanak ki.



Molekula mint dipól  
Dipólmomentum ( $p_0$ ):

$$p_0 = Qd$$

A változó elektromos tér által indukált, időben változó dipólmomentum:  $p = p_0 \sin \omega t$

Dimenziója:  $Qdt^{-1}$

Vajon mekkora a szórt ("újrásugárzott") fény teljesítménye? ( $P_{szórt}$ ; dimenziója  $W = Fdt^{-1}$ )

N.B. - Coulomb törvény:

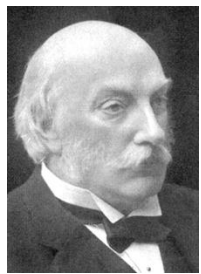
$$F \sim \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \quad (\text{dimenziója } Q^2 d^{-2})$$

Dimenzionális levezetés

Fizikai kifejezés	Dimenzió	Művelet
$p_0^2$	$Q^2 d^2$	Négyzetre emelés
$p_0^2$	$Q^2 d^{-2} d^4 = Fd^4$	Bővítés $d^2 d^{-2}$ -nel
$p_0^2 / c^3$	$Fd^3$	Osztás $c^3$ -nal ( $d^3 t^{-3}$ )
$(p_0^2 / c^3) \omega^4$	$Fdt^{-1} = W$	Szorzás $\omega^4$ -nel ( $t^{-4}$ )

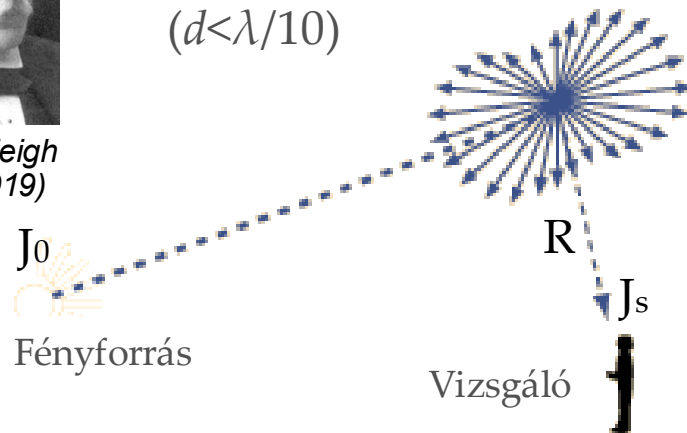
$$P_{szórt} \sim \frac{p_0^2}{c^3} \omega^4$$

# Fényszórás



Lord Rayleigh  
(1842-1919)

Rayleigh szórás  
( $d < \lambda/10$ )



- Emisszió rezonáló dipólusok által
- Szóró centrumok egymástól távol (nincs interferencia)
- Rugalmas ütközés: fotonenergia nem változik

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

$J_s$ =szórt fény intenzitása

$J_0$ =beeső fény intenzitása

$N$ =szóró részecskék száma

$\alpha$ =polarizálhatóság ( $E/d$ )

$\lambda$ =hullámhossz

$R$ =távolság a vizsgáló és szóróközeg között

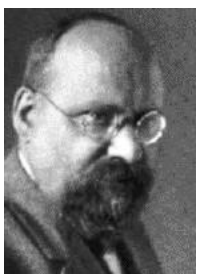
$\Theta$ =megfigyelő - sugárforrás közötti szög



Erős hullámhosszfüggés → a szórt fényben a rövid hullámhosszak dominálnak → kék ég



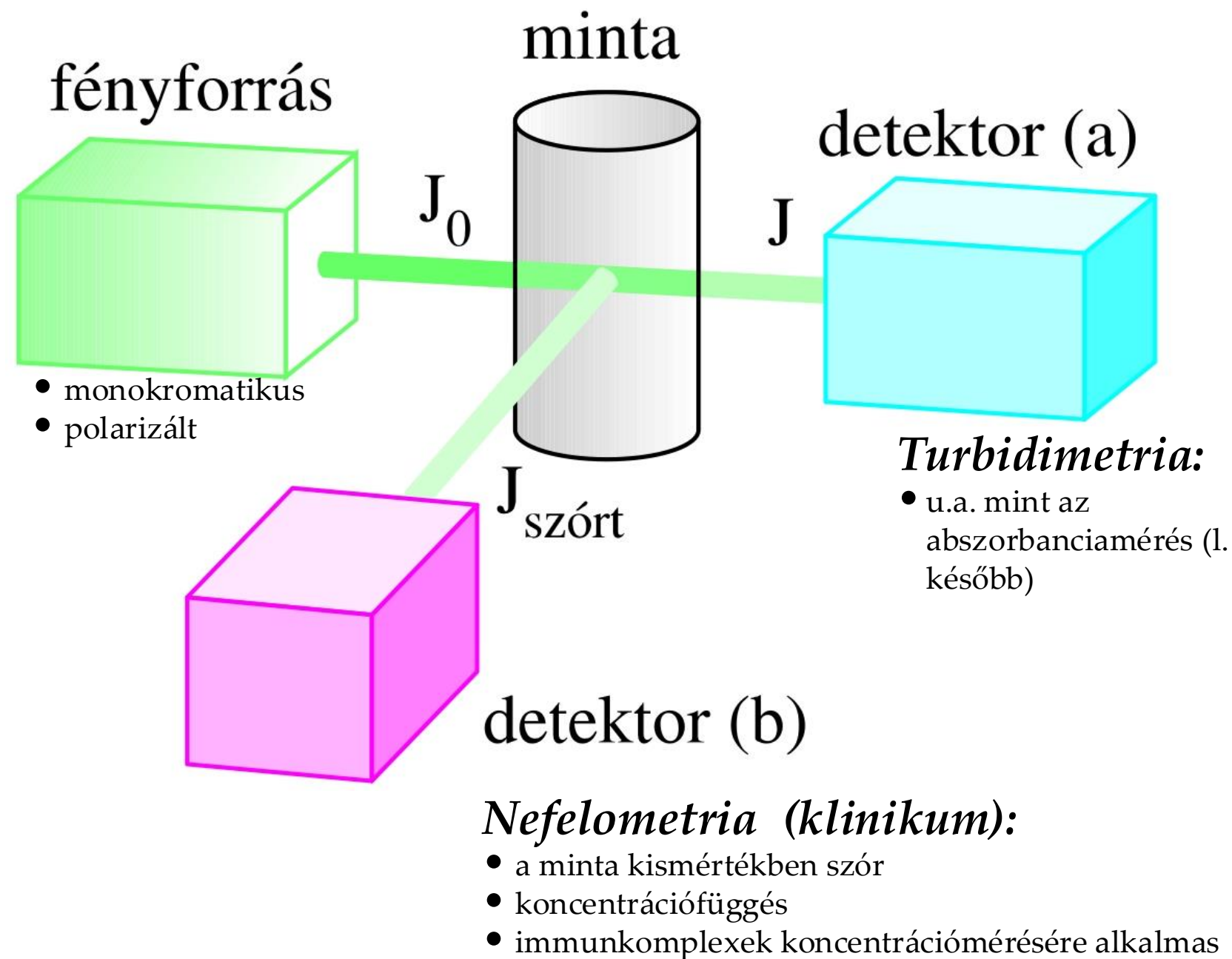
Mie szórás  
( $d \sim \lambda$ )  
( $J_s$   $\lambda$ -független)



Gustav Mie  
(1868-1957)

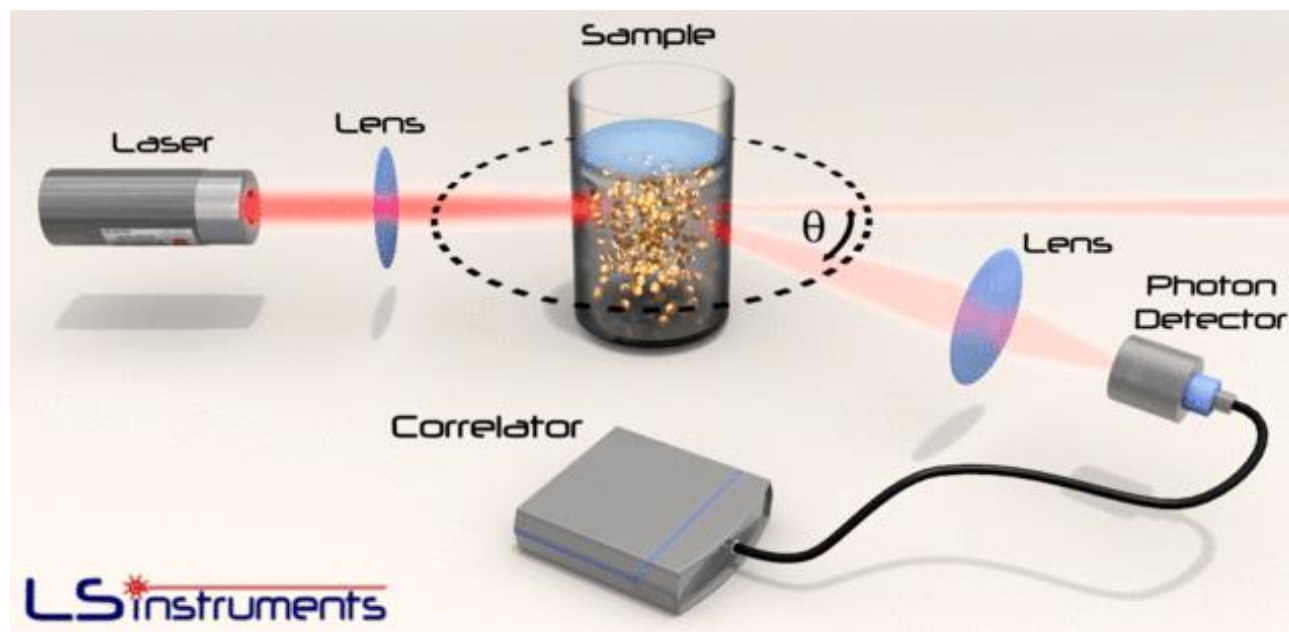
Ha a szóró centrumok egymással kölcsönható atomok hullámhossz-méretű halmazai → interferencia, kioltás → esőcseppek kiszürkülnek (felhők)

# A fényszórás mérése, orvosi alkalmazásai

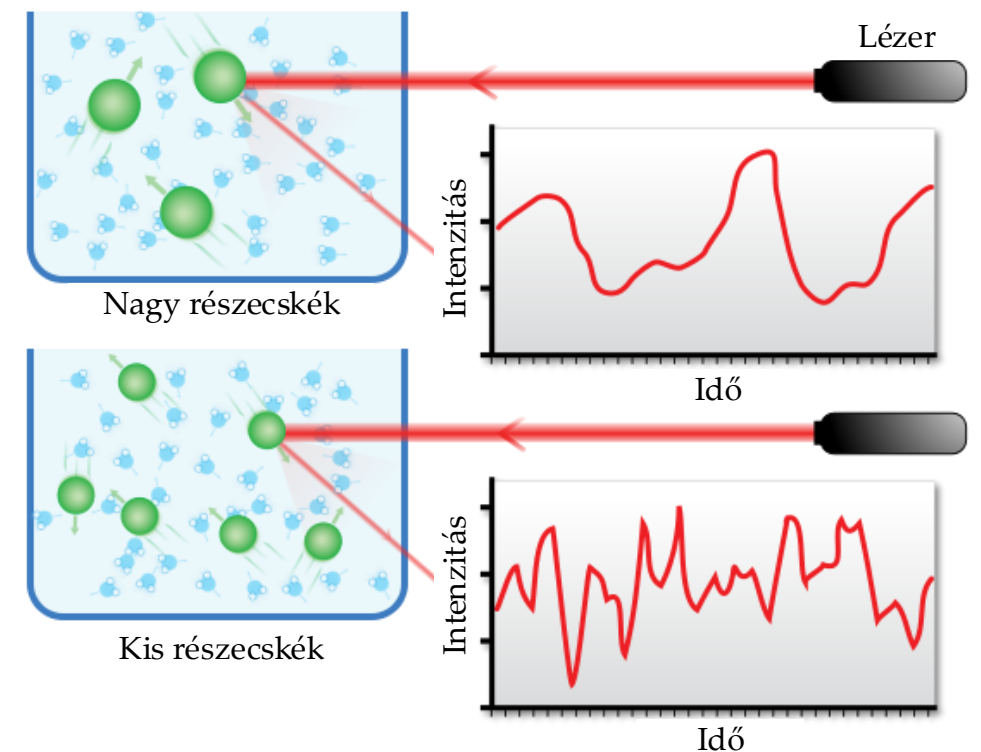


# Dinamikus fényszórás

Diffundáló nm-skálájú részecskék



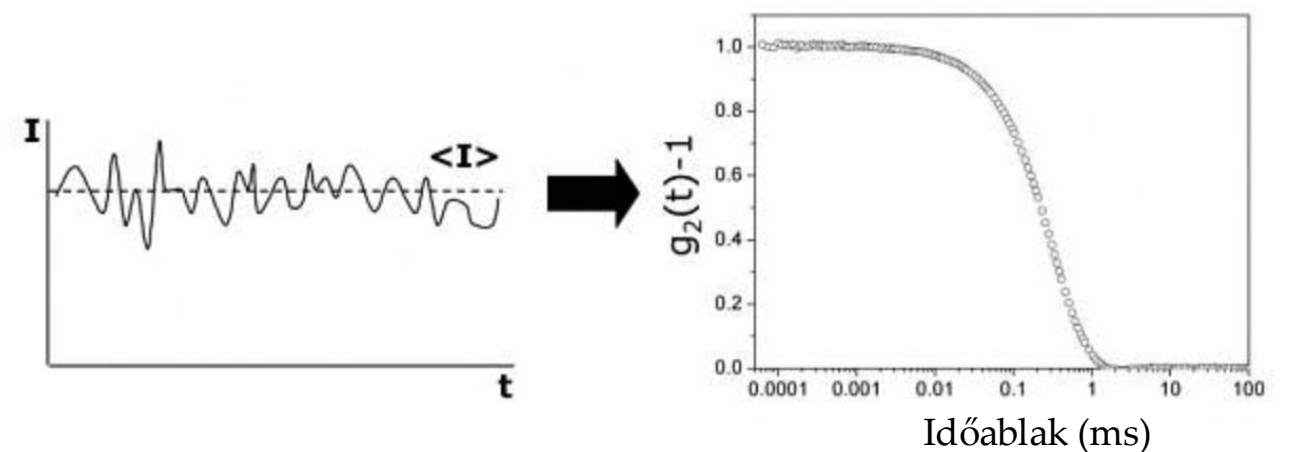
Szórt fény intenzitása időben fluktuál



A fluktuáció sebessége a részecskemérettől függ

- Az intenzitás fluktuáció autokorreláció függvényéből (önhasonlóság időbeli lecsengése) kiszámítható a diffúziós állandó ( $D$ )
- A diffúziós állandó segítségével kiszámítható a gömb alakú részecske sugara (Stokes-Einstein)

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r}$$

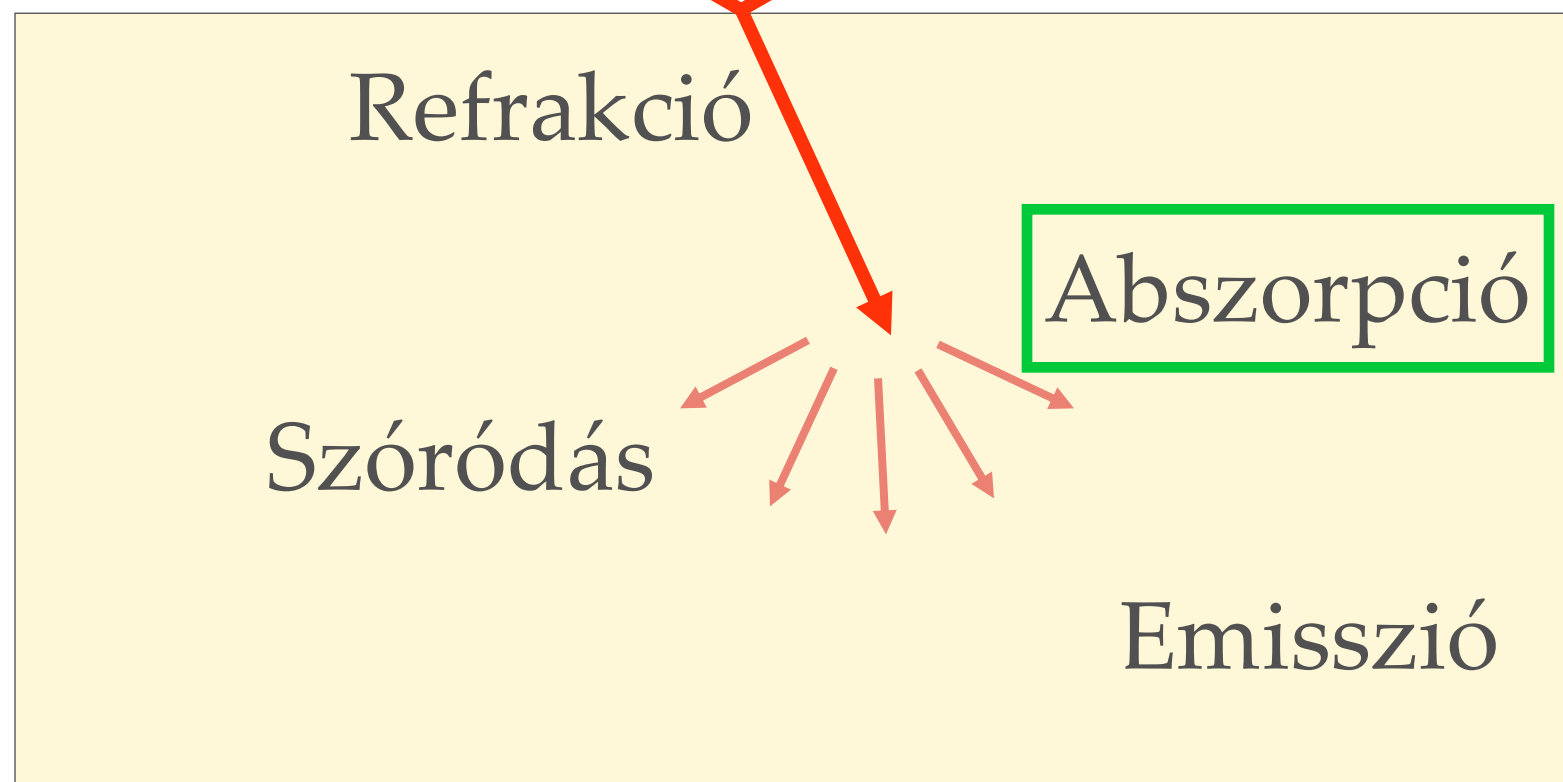


# Fény kölcsönhatása az anyaggal

---

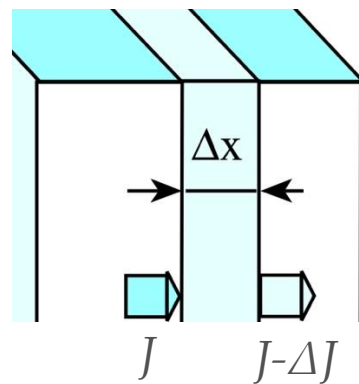
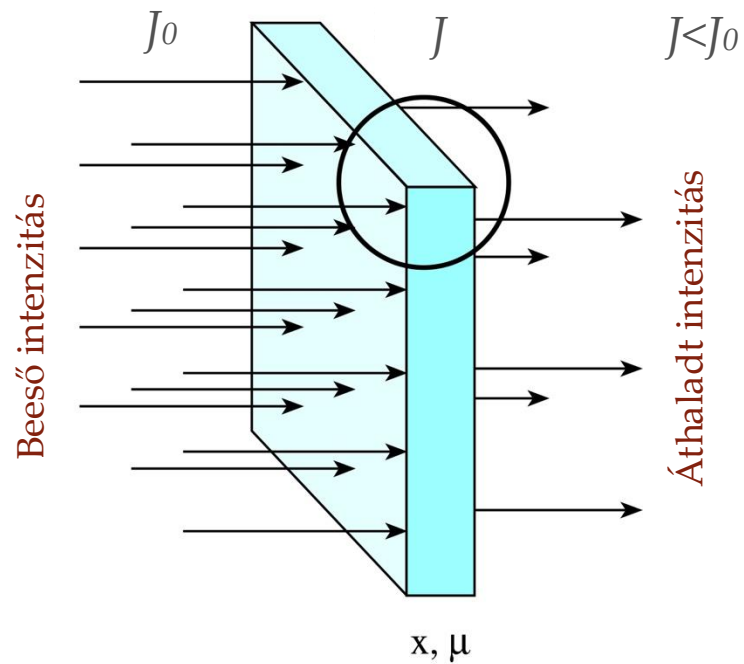
Beeső nyaláb

Reflexió



**Abszorpció:** elnyelés (*absorbere, lat., elnyelni*)

# Általános sugárgyengítési törvény



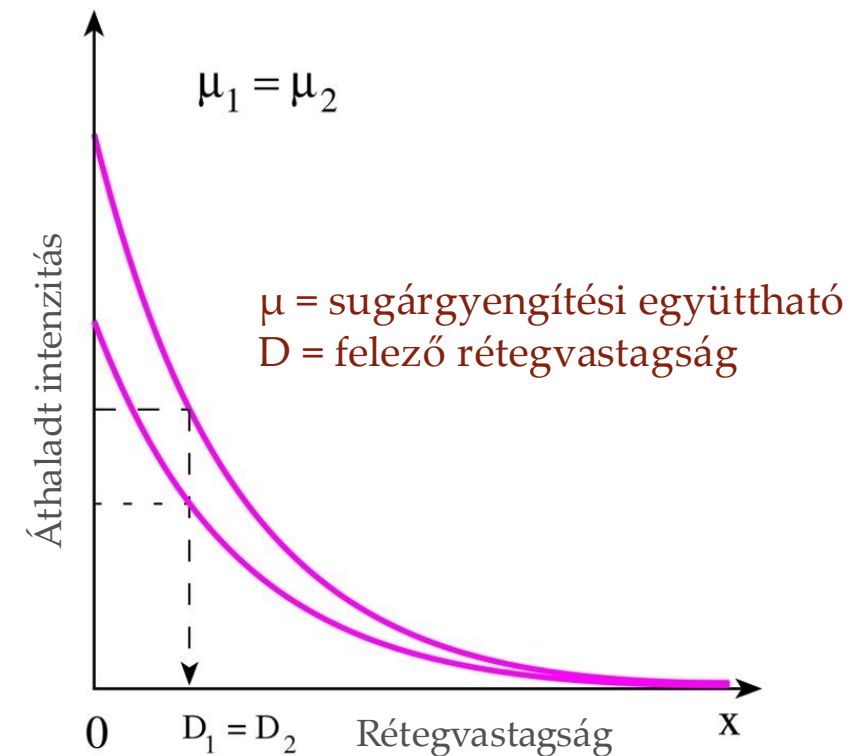
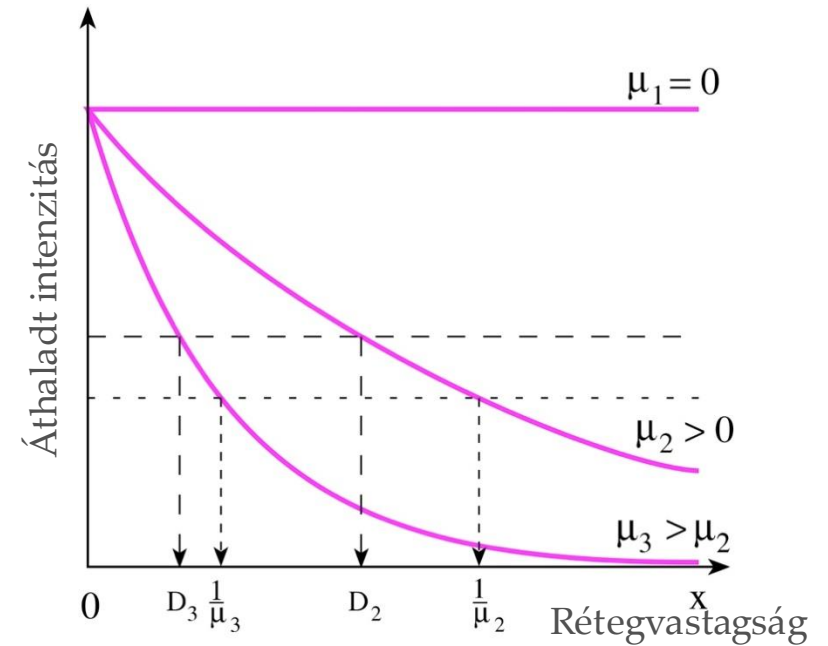
Egy mennyiség ( $J$ ) és annak megváltozása ( $\Delta J$ ) egymással arányosak:

$$\Delta J = -\mu \Delta x J$$



Exponenciális függvény:

$$J = J_0 e^{-\mu x}$$



# Az abszorpció paramétereinek és mérése

Abszorbancia (A):

$$A = \lg \frac{J_0}{J} = \lg e \cdot \mu \cdot x$$

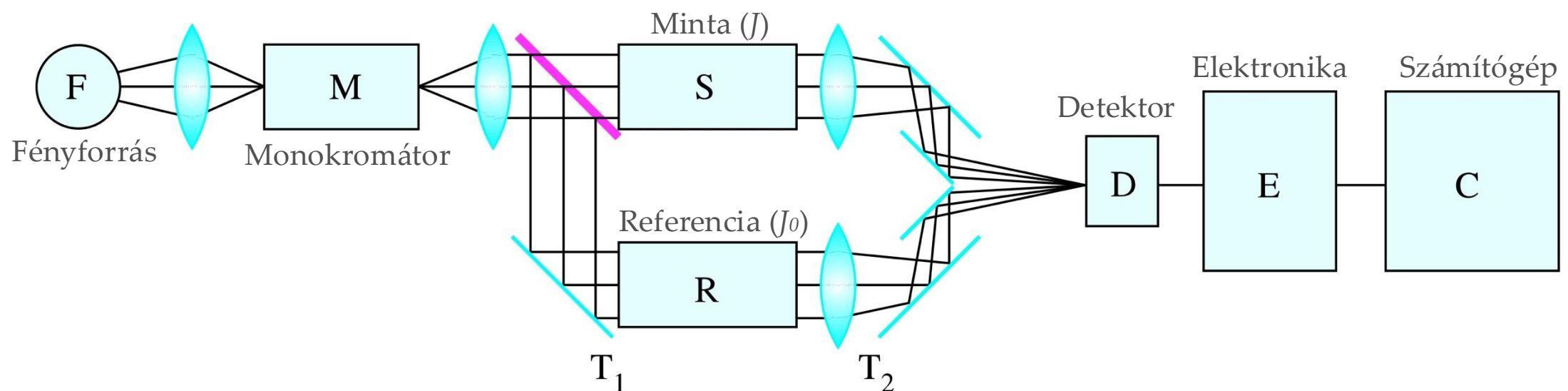
Dimenzió nélküli szám  
Színónimák: extinkció, optikai denzitás (OD), optikai sűrűség

Transzmittivitás (T):

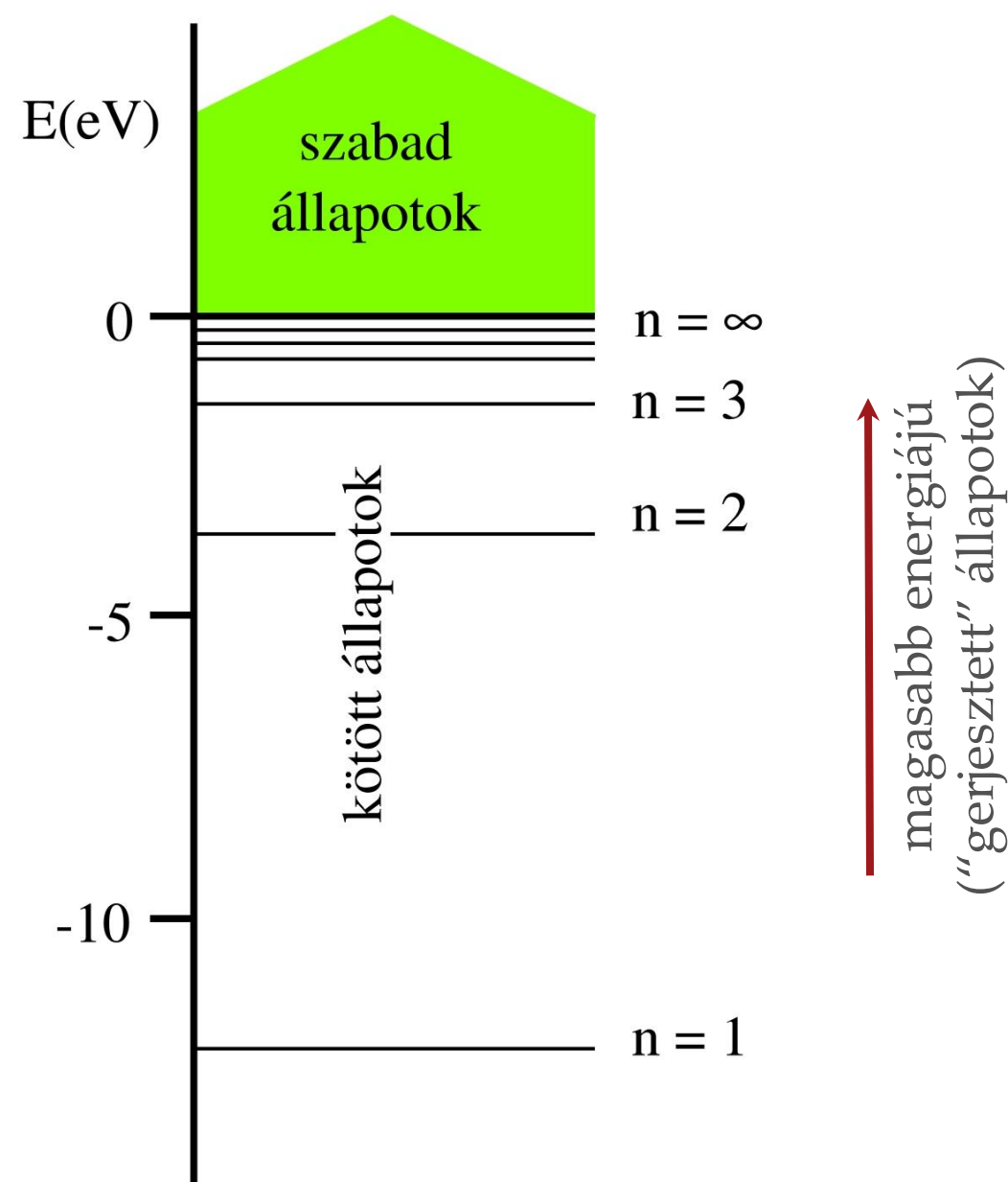
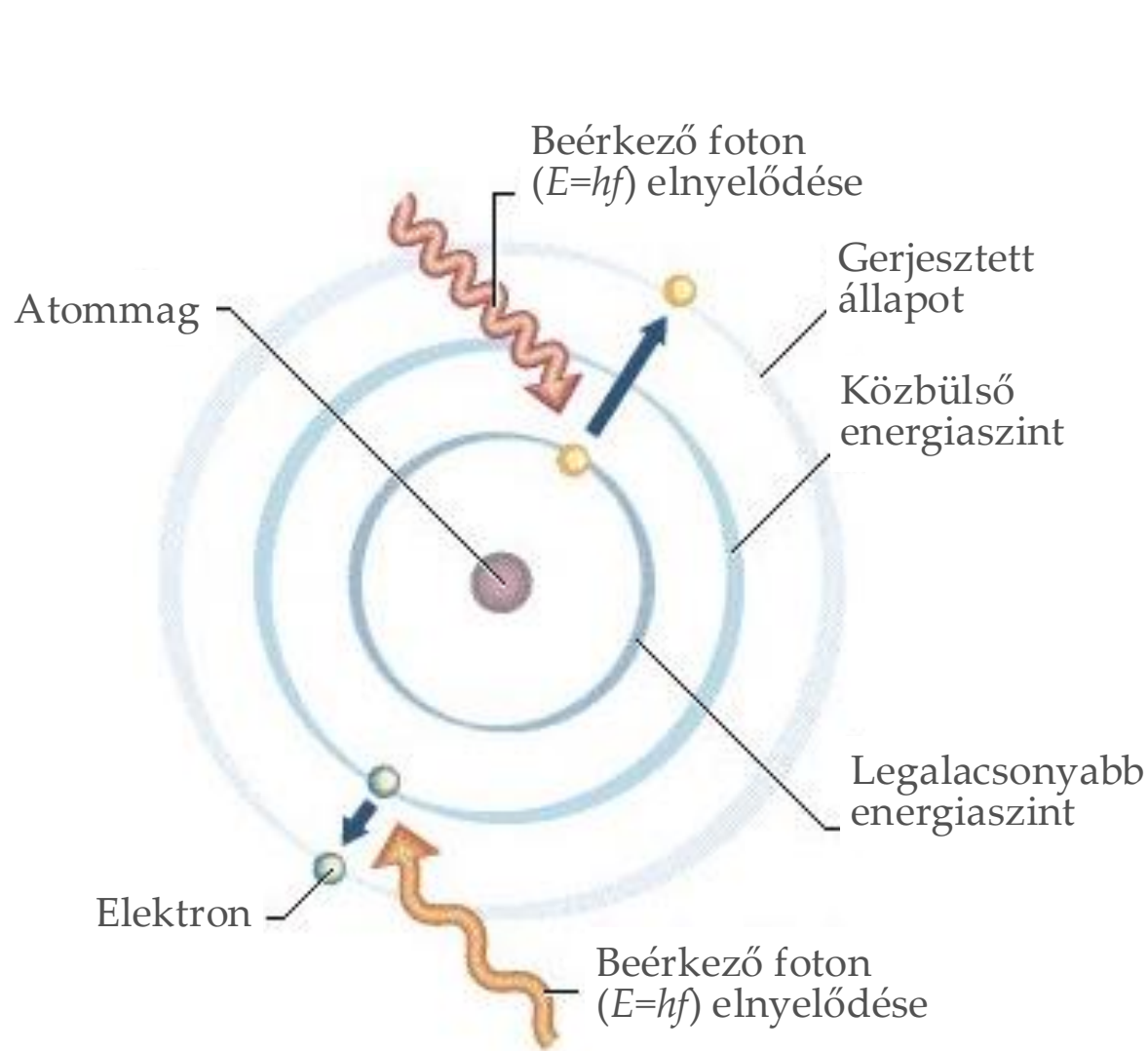
$$T = \frac{J}{J_0} \cdot 100$$

Százalékban (%) fejezzük ki  
Színóníma: transzmissziós tényező

Fotometria ("fénymérés"):



# Fényabszorpció atomi és molekuláris mechanizmusai



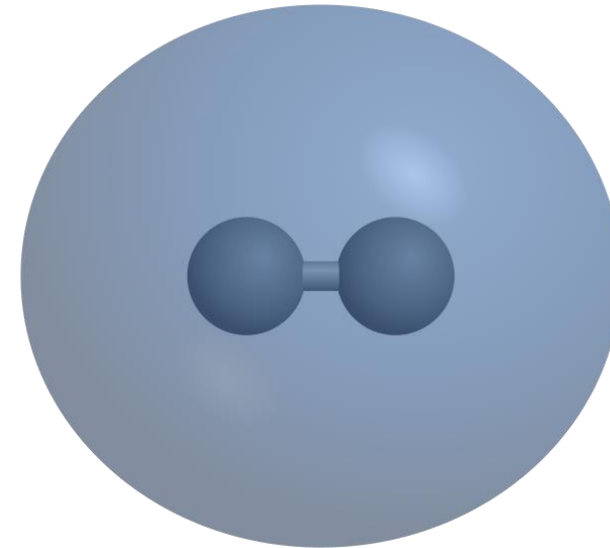
Atomok esetében diszkrét (kvantált) fotonenergiák (vonalas abszorpciós spektrum:



# Molekulaszerkezet

---

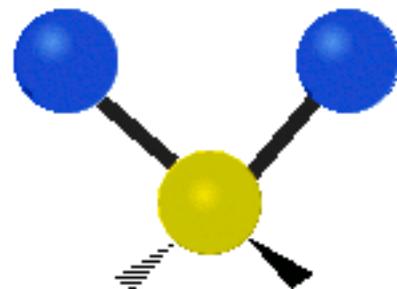
Molekula: kovalens kötéssel összekapcsolt atomok  
Legegyszerűbb eset: kétatomos molekula (pl., hidrogénmolekula)



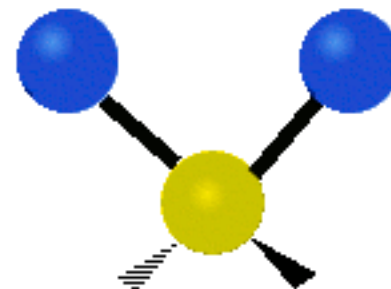
**A molekulák vibrációs és rotációs mozgásokat végeznek!**

*Vibráció:* kovalens kötés *mentén* történő periodikus mozgás  
*Rotáció:* kovalens kötés *tengelye körüli* periodikus mozgás

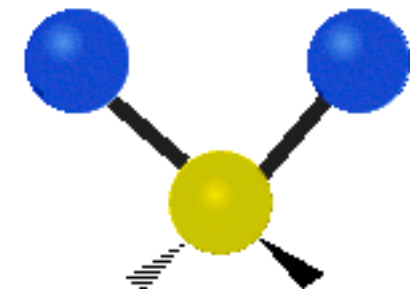
Példák a vibrációs mozgásra háromatomos (metilén) csoportban (-CH<sub>2</sub>-):



*Aszimmetrikus nyúlás*



*Szimmetrikus nyúlás*



*Ollózás*

# Molekula energiája

---



Max Born  
(1882-1970)



J. Robert Oppenheimer  
(1904-1967)

Born-Oppenheimer - közelítés:

$$E_{total} = E_e + E_v + E_r$$

## *Fontos megjegyzések:*

Energia állapotok egymástól függetlenek (csatolás elhanyagolható)

Állapotok energianívói kvantáltak

Átmenetek energia "csomag" elnyelésével/kibocsátásával járnak

Energiaszintek közötti különbségek nagyságrendje különbözik:

$$E_e \overset{\sim 100\times}{>} E_v \overset{\sim 100\times}{>} E_r$$

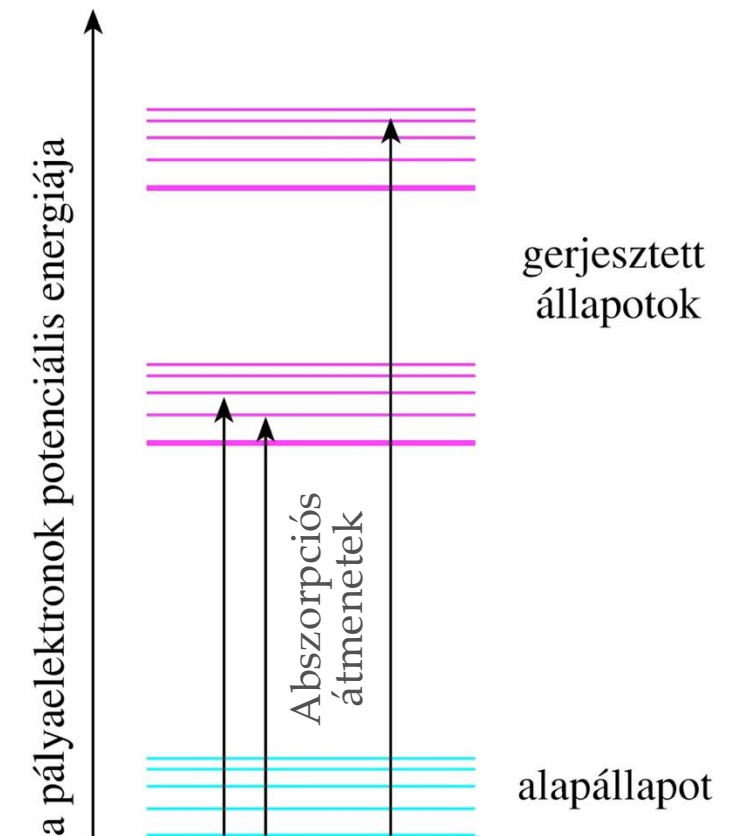
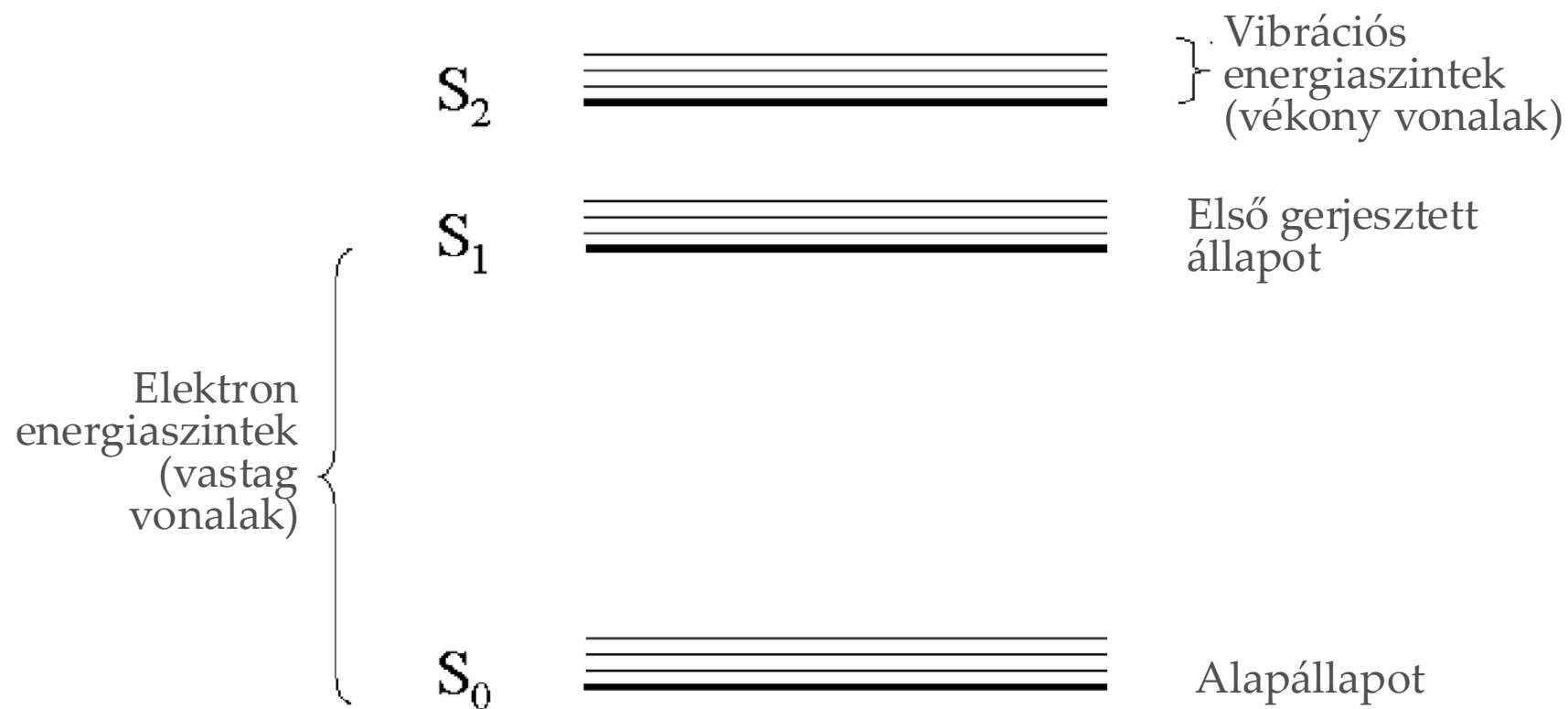
$$\sim 3 \times 10^{-19} \text{ J } (\sim 2 \text{ eV}) > \sim 3 \times 10^{-21} \text{ J } > \sim 3 \times 10^{-23} \text{ J}$$

# Energia állapotok ábrázolása

Jabłoński-féle termséma:  
egy molekula elektronállapotait, és a közöttük  
végbemenő átmeneteket (nyilakkal) mutatja

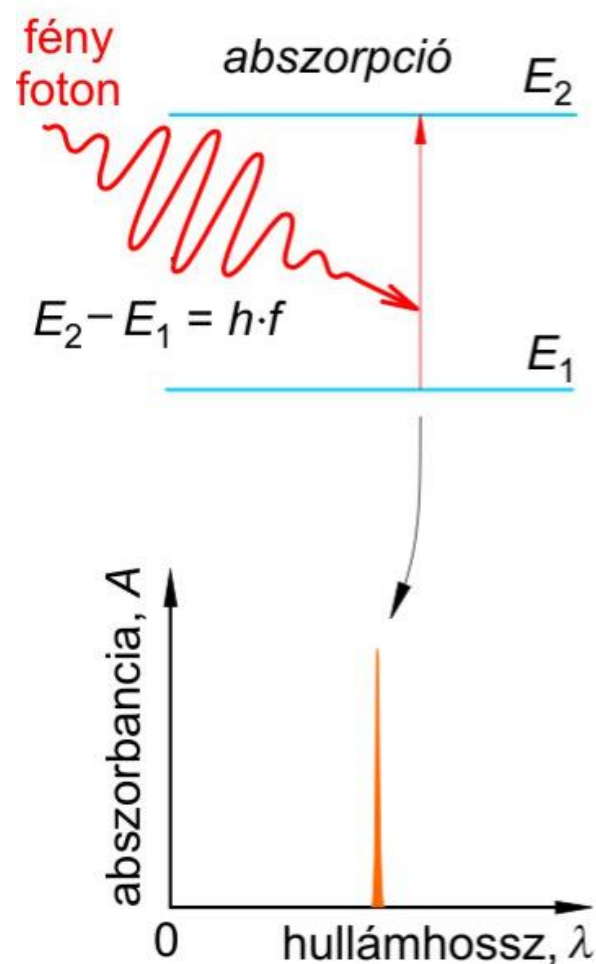


Alexander Jabłoński  
(1898-1980)

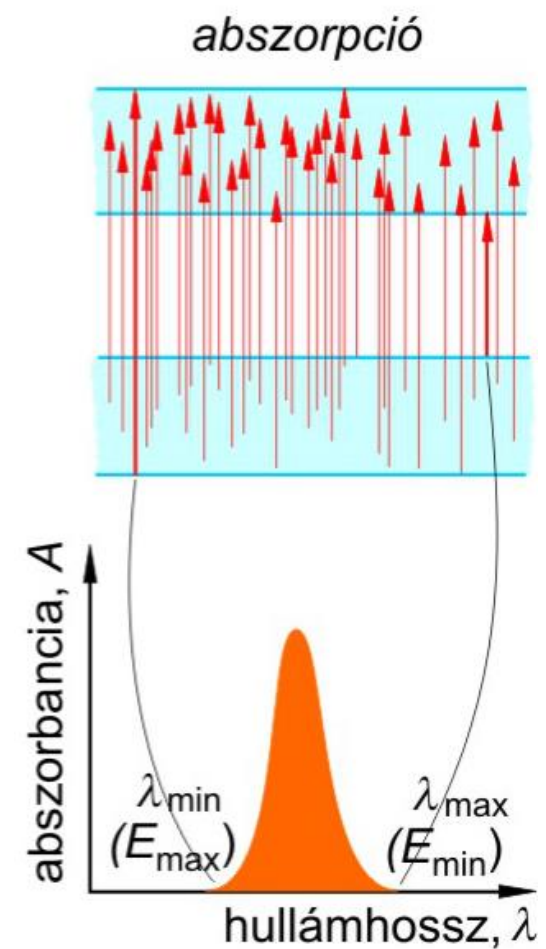


# A sávos színeképek eredete

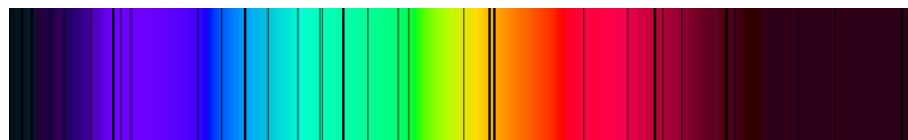
Egyedülálló atomok



Molekulák



Vonalas  
abszorpciós  
színekép



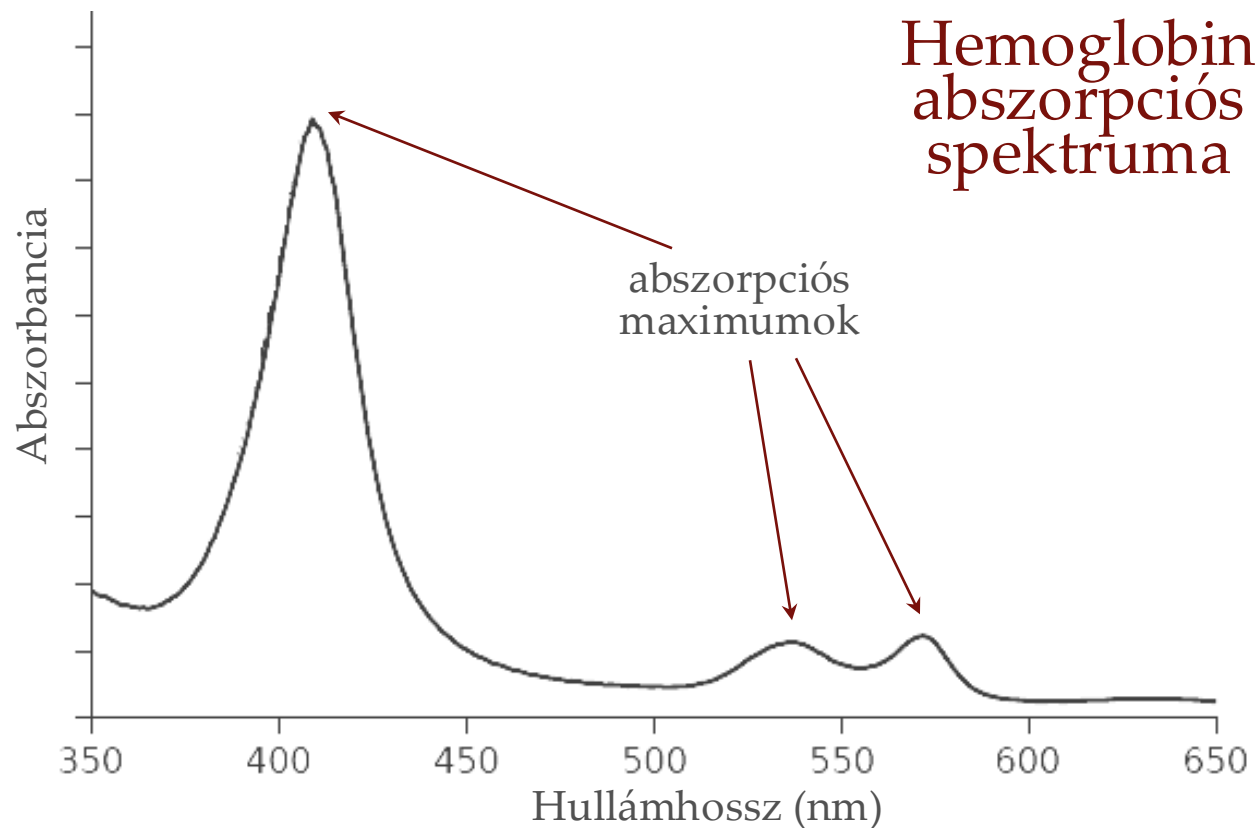
A fényforrás spektrumában megjelenő keskeny eloszlású hiányok: abszorpciós vonalak

Sávos színekép - eredete:

- kémiaiailag ugyanolyan molekulák eltérő energiaállapotban vannak
- hőmozgás
- oldatkörnyezet

# A fényabszorpció hullámhosszfüggő

Magyarázat: atom és és molekulaszervezet!



Általános sugárgyengítési törvény:

$$A = \lg \frac{J_0}{J} = \lg e \cdot \mu \cdot x$$

Híg oldatokra - Lambert-Beer törvény:

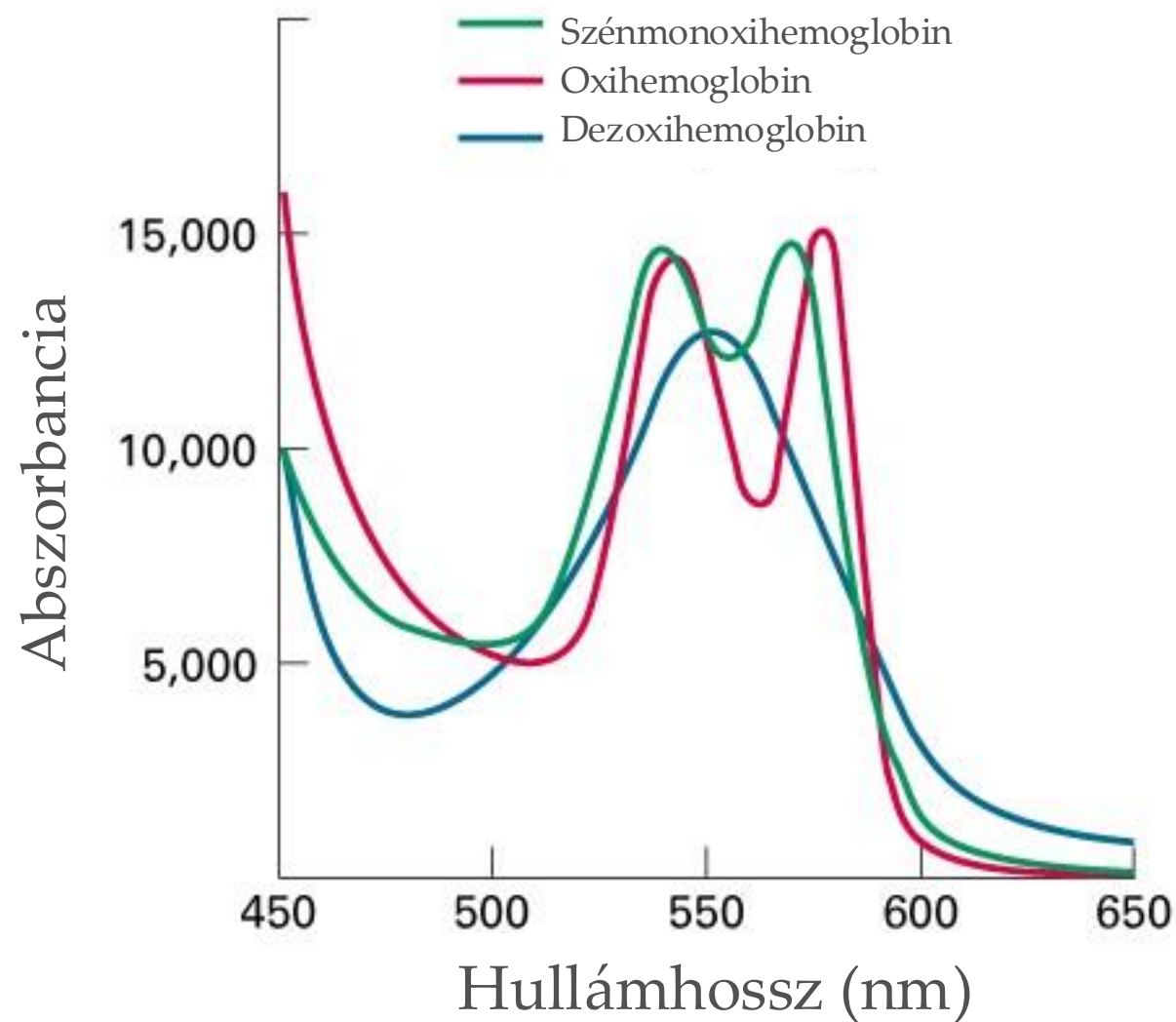
$$A_\lambda = \lg \frac{J_0}{J} = \varepsilon_\lambda \cdot c \cdot x$$

$\varepsilon_\lambda$  = moláris extinkciós együttható  
 $c$  = koncentráció

- A moláris extinkciós együttható ( $\varepsilon_\lambda$ ) mértékegysége (SI):  $\text{m}^2\text{mol}^{-1}$
- Koncentrációmérésre alkalmas módszer
- A hullámhossz alapján az energiaátmenet nagysága kiszámítható:

$$E_2 - E_1 = E_{\text{foton}} = h \cdot f = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

# Abszorpciós spektroszkópia

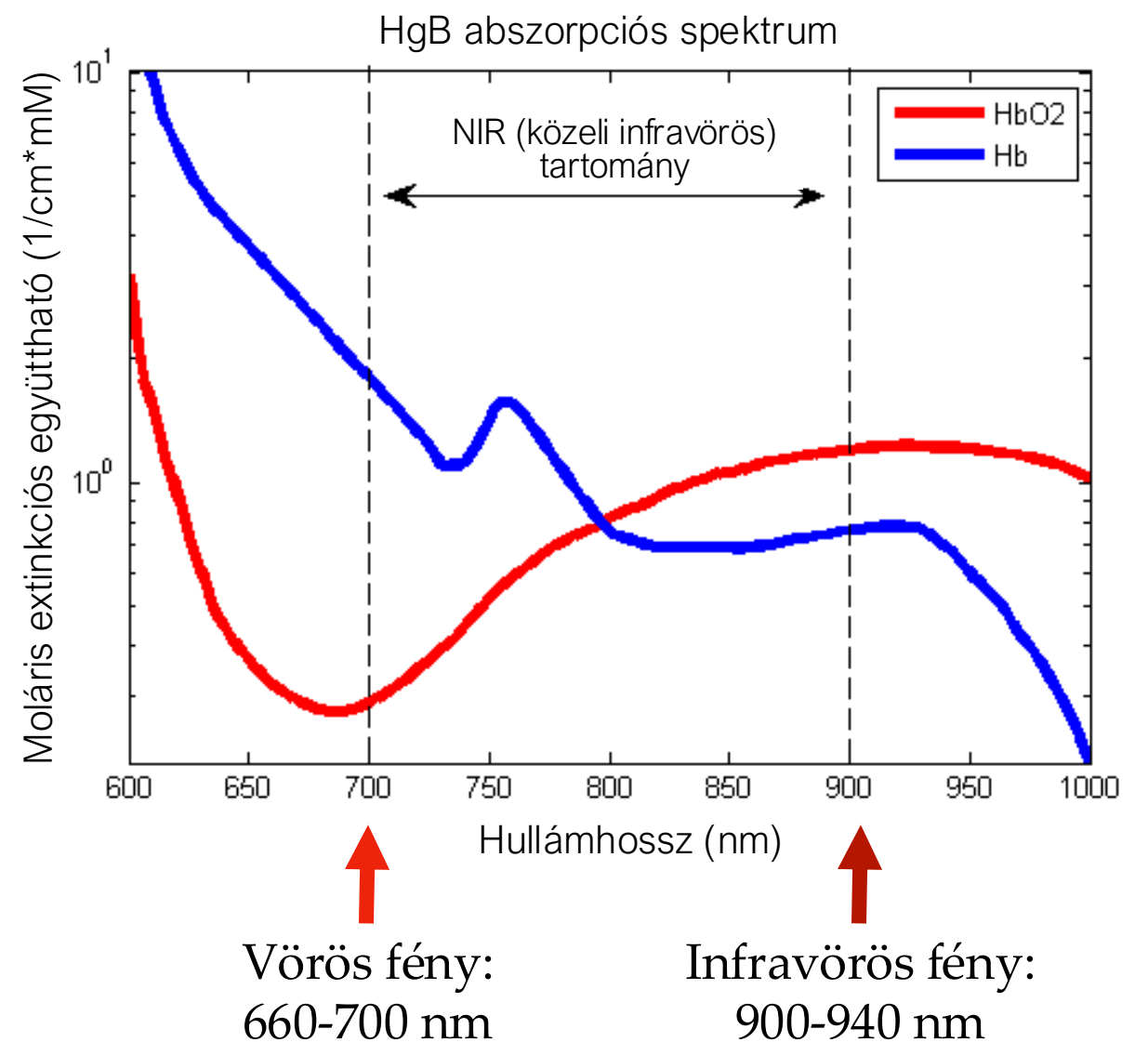
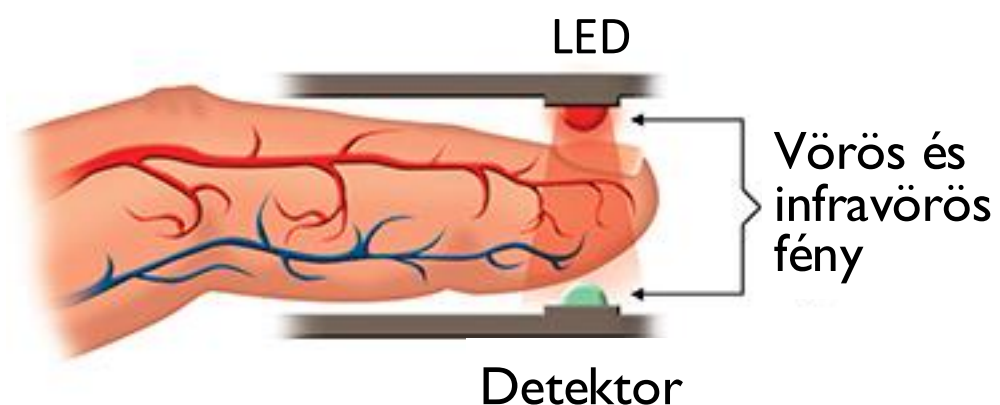


- *Spektrum*: intenzitás (vagy származtatott mennyiségei, pl. OD) a fotonenergia (vagy származtatott mennyiségei, pl. frekvencia, hullámhossz) függvényében.
- *Spektroszkópia*: a spektrum kvalitatív elemzése.
- *Spektrometria, spektrofotometria*: a spektrum kvantitatív elemzése.
- *Alkalmazások*: kémiai szerkezetvizsgálat, koncentrációmérés, stb.

# Pulzoximetria

Az oxigen szaturáció („telítettség”,  $SO_2$ ) noninzazív mérése

- $O_2$ -t szállító HgB %-os részarányának mérése
- Az artériás oxigénszaturációt ( $SaO_2$ ) a perifériásból ( $SpO_2$ ) becsüljük
- Normálérték: 95-99%
- Abszorpciós aránymérés (vörös/infravörös)



# OMHV



<https://feedback.semmelweis.hu/feedback/index.php?feedback-qr=1N6VU0VHUVB09A8V>