

# Elektromágneses sugárzások és biológiai rendszerek

## Ionizáló és nem-ionizáló sugárzások

### **Fény – Biológiai hatások - Fényforrások**

Dr. Fidy Judit  
egyetemi tanár  
2017 április 5

## Sugárzások és biológiai rendszerek

### Ionizáló és nem-ionizáló sugárzások



**Látható fény** (nem ionizáló)

**Röntgensugárzás** (ionizáló)  
(Röntgen-cső, szerkezetvizsgálat, diagnosztika)

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

Mai kérdés:

Milyen tulajdonság alapján mondjuk egy folyadékról, hogy  
„Newton-i folyadék”?

### emlékeztető

**Fotonenergia fogalma:**

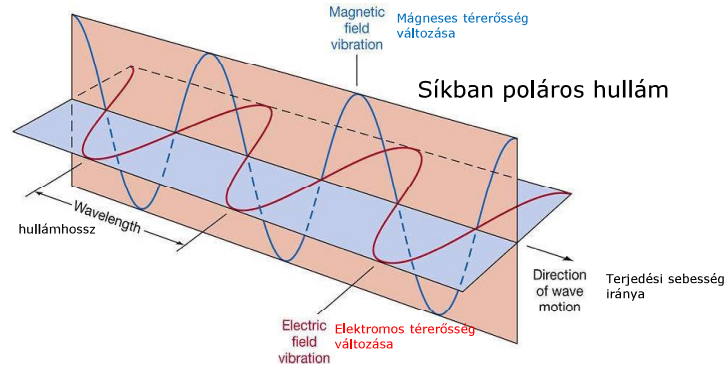
Planck, Einstein  $E_{\text{foton}} = h * f = h * \frac{c}{\lambda}$

**Fotonenergia egysége:** elektron-volt, eV

$$1 \text{ eV} = \underbrace{1.6 \times 10^{-19} \text{ C}}_{\text{elektron töltése}} \times 1 \text{ V} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ Joule}$$

1 Volt feszültséggel gyorsított elektron energiája

## Elektromágneses hullámok - emlékeztető

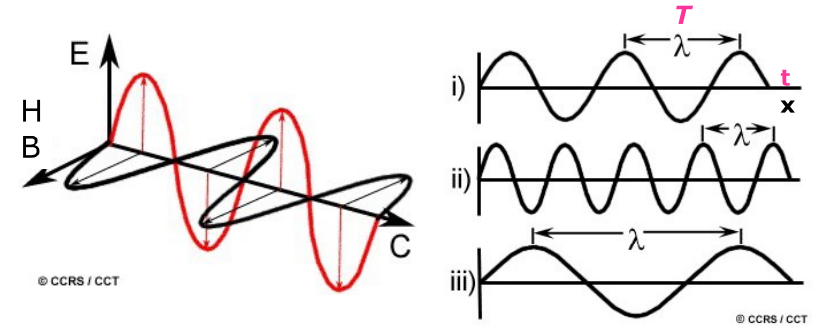


$$E = E_{\max} \cdot \sin \left( 2\pi \frac{t}{T} + 2\pi \frac{x}{\lambda} + \Phi \right)$$

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

Az elektromos és mágneses térerősség változásnak azonos a fázisa és a periodicitása ( $T, \lambda$ )

## EM hullámok – paraméterek – emlékeztető (Huygens elv, diffrakció, interferencia)



$$c = \lambda / T, \quad f = 1/T, \quad c = f \cdot \lambda (m/s)$$

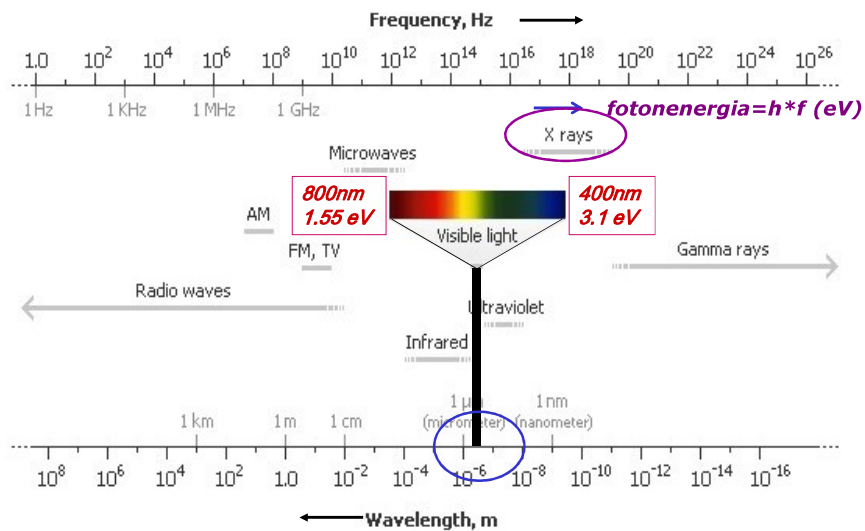
$$c = 299,792,458 \text{ m/s vákuumban}$$

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

## Fény – Röntgen sug. : elektromágneses hullámok

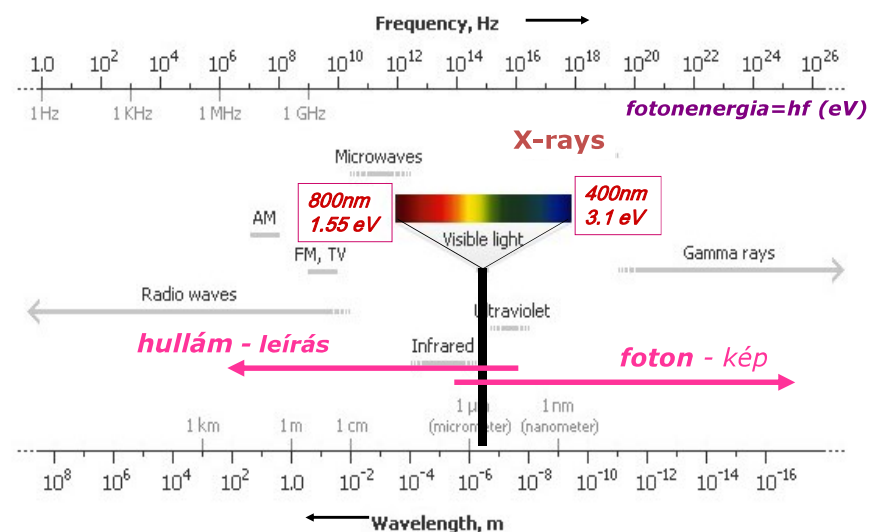
Logaritmikus skála

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



## Elektromágneses hullámok – kettős természet ?

Logaritmikus skála



## Fény – Biológiai hatások

### A fény biológiai hatásai

A hatás alapja energiaátadás a biológiai „anyag”-nak.  
Energiaátadás = **fényelnyelődés**

#### Szemponatok:

Milyen mechanizmust jelent a fényabszorpció?  
Mi nyeli el?  
Milyen mélyre jut?  
Milyen szöveteket ér fény?  
Fénnyel kiváltott reakciók, terápiás beavatkozások.

**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 fényelnyelés mechanizmusa (modellje)

#### foton-kép

**izolált atomok, molekulák**

**fényfoton elnyelése → elektron-gerjesztés**

$$E_{n+1} - E_n = h \cdot f = h \cdot \frac{c}{\lambda}$$

A fény-elnyelés energetikai feltétele

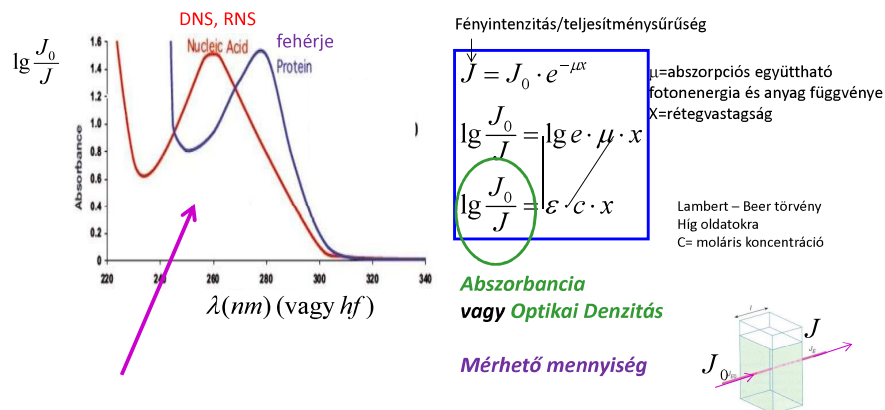
**függ a hullámhossztól --- fotonenergiától**



Várható-e egy anyagban fényabszorpció? Honnan tudjuk?

Abszorpciós spektroszkópia - spektrofotometria

Milyen fotonenergiákon van abszorpció – a molekula elektronállapotaitól függ



Abszorpciós spektrum

## Optikai elektron-átmenetek

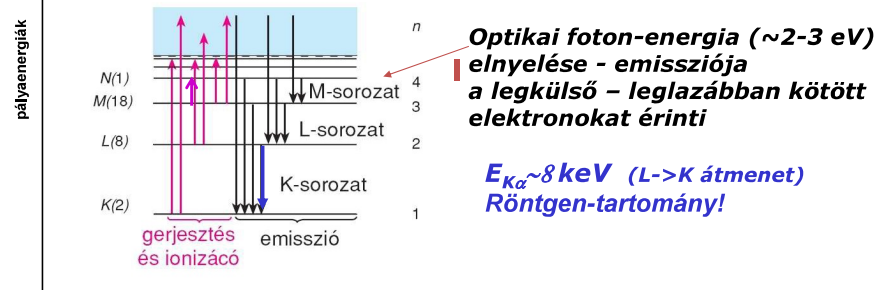
izolált atomok, molekulák

FOTON  $\leftrightarrow$  ELEKTRON

abszorpció és emisszió foton-képpen

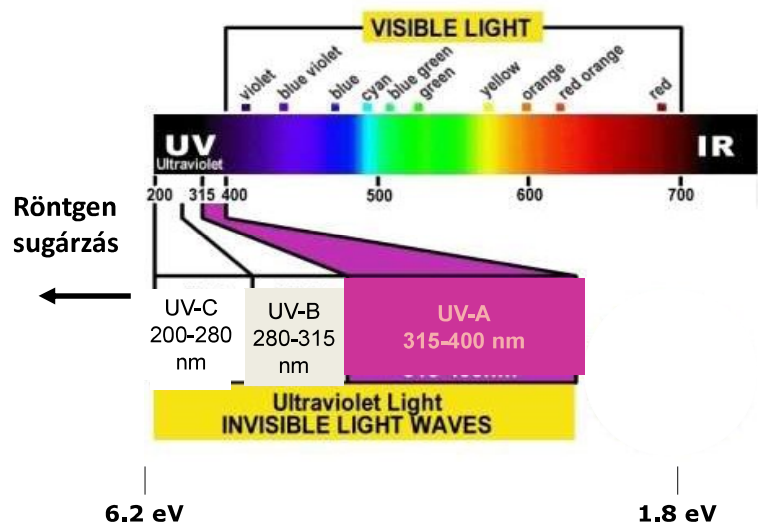
Sok-elektronos rendszerek elektron-energiái

Egyszerű példa: Cu atom

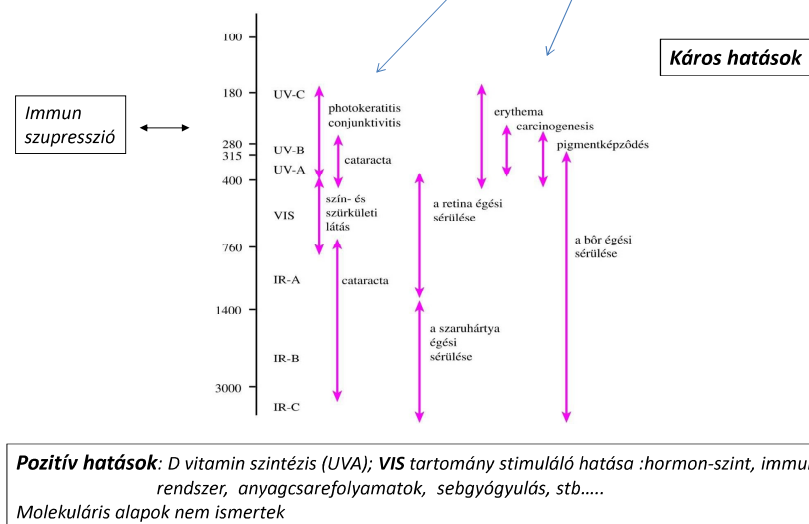


## A fényelnyelés tartományai és az emberi szervezet

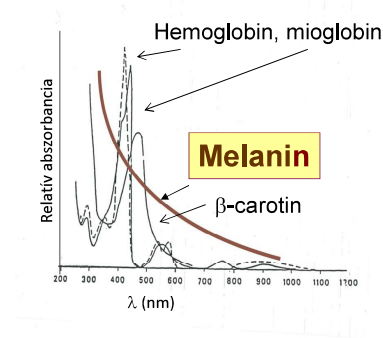
Az UV tartomány hatásai szempontjából különösen fontos



## A fény-elnyelés elsődleges célszervei : szem, bőr



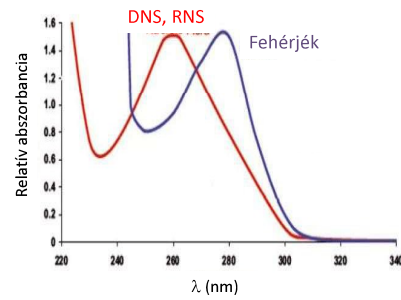
## Molekuláris szintről indulva – mi az ami elnyeli a fényt?



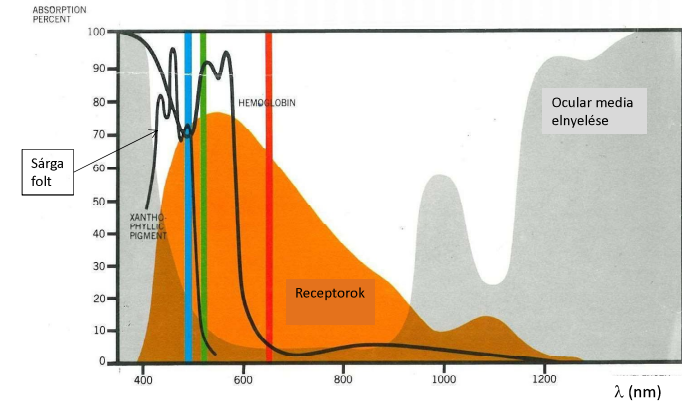
### +Exogén kromofórok

- ételfestékek
- gyógyszerkomponensek
- kozmetikumok
- .....

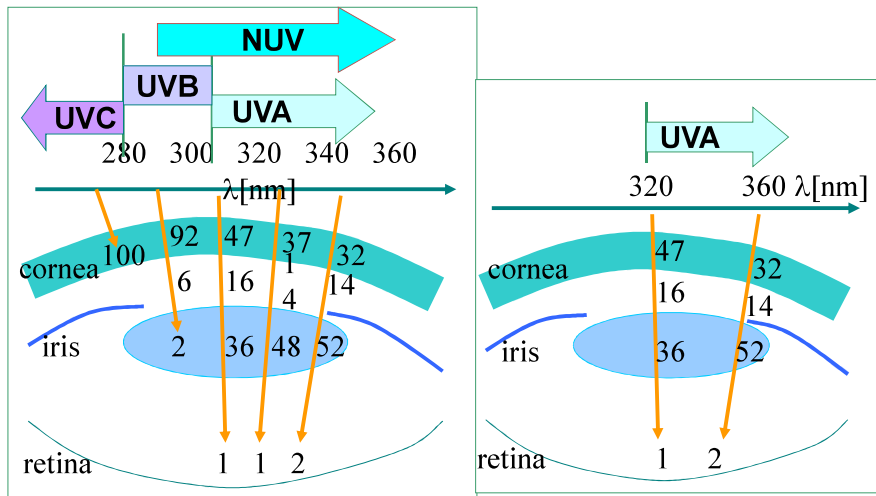
### Endogén kromofórok



## Fény-elnyelő molekulák a szemben

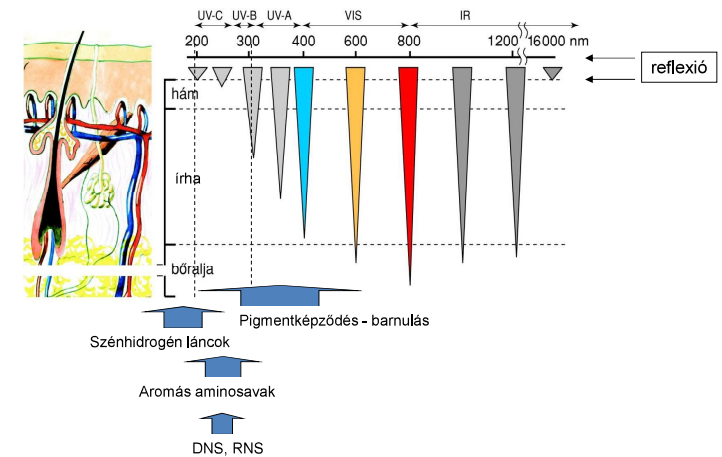


## Az UV tartomány veszélyességének alapjai - szem



## A fény elnyelődése a bőr rétegeiben – behatolási mélység

Hosszabb hullámhosszak mélyebbre hatolnak, de csak a bőr aljáig!



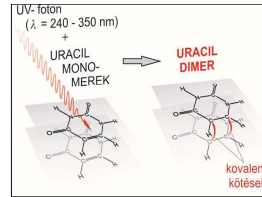
## A fényelnyelés lehetséges következményei: fotokémiai reakciók gerjesztett állapotból

**UV-elnyelés direkt hatása → DNS, RNS sérülés: pontmutációk**

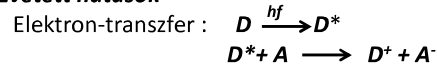
Pirimidin bázisok fotodimerizációja: citozin, timin uracil

Nukleotid bázisok és fehérjék keresztkötése

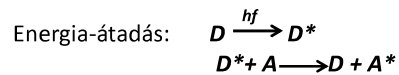
Nukleotid bázisok fotohidratációja



### Közvetett hatások



reaktív szabad gyökök



A=oxigén A\*=reaktív szinglet oxigén

## Fényabszorpció – fényemisszió Gyakorlati jelentőség

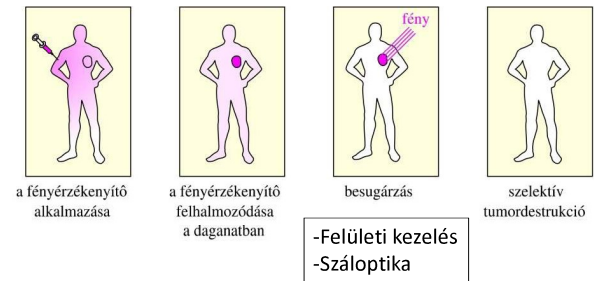
## Fotoszenzibilizátorok terápiás alkalmazása

### Fotoszenzibilizátor molekula:

nagy hatásfokkal gerjesztődik

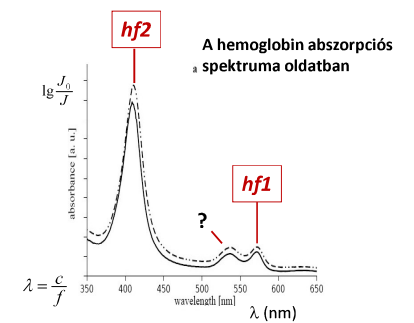
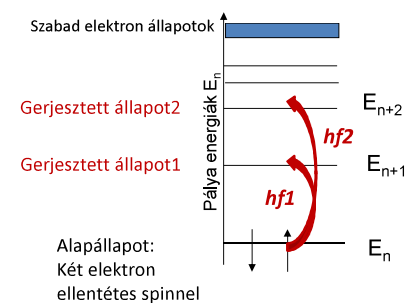
nagy hatásfokkal kelt szinglet oxigént vagy szabad gyökök

ha szelektíven célbajuttatható, fotodegradációt eredményez



## Vissza a fényabszorpcióhoz.....

### Az abszorpciós spektrum értelmezése

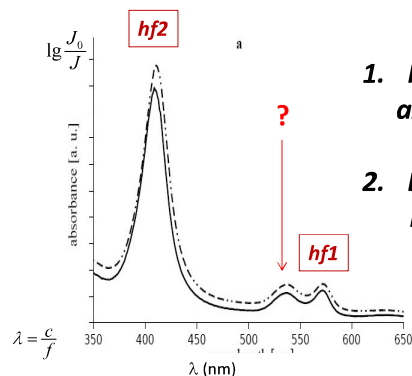


A séma egyszerűsítései:

- a betöltött pályák közül csak a legfelső pályát tüntetjük fel:  $E_n$
- a legfelső pályán két elektron van – a festékek legtöbbje ilyen

## A séma kiegészítésre szorul! Problémák:

$$\Delta E = hf \quad \text{teljesül, DE}$$



1. Miért különböznek abszorbanciában az abszorpciós átmenetek?

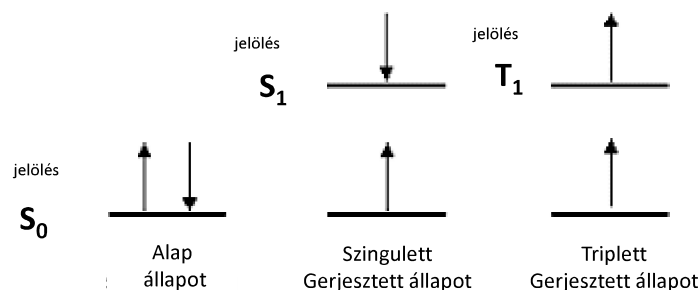
2. Éles abszorbancia maximumok helyett széles „sávok” vannak!

**Válasz1:** az elektronok gerjesztési átmeneteinek valószínűsége függ attól, hogy milyen kvantumszámú pályák kombinálódnak →  
→ kiválasztási szabályok vannak

## definíciók:

**Szingulett állapot:** a molekula összes elektronja párokban kompenzált spinű  $\sum_j s_j = 0$

**Triplett állapot:** egy elektron-pár van azonos spinel  $\sum_j s_j = 1$



Gerjesztésnél:  $S_0 \rightarrow S_1$  vagy  $S_0 \rightarrow S_2$ .....

$S_0 \rightarrow T_1, T_1 \rightarrow S_0$   
Tiltott átmenet

## Kiválasztási szabályok

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

Mennyit változhatnak a kvantumszámok elektronátmenetben?

$\Delta n = \text{bármennyi}, \Delta l = \pm 1, \Delta m = 0 \text{ vagy } \pm 1$

$\Delta s = 0$

+ vibrációs módusok csatolása

Gerjesztési vagy spontán emissziós átmenetben az elektron spinállapota nem változhat

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

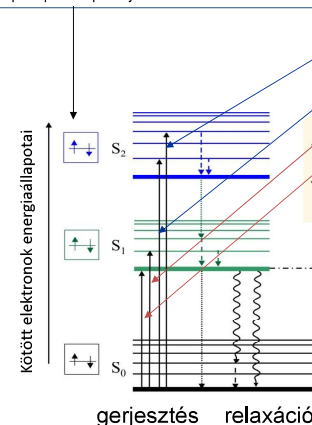
$\varepsilon(\lambda)$

Moláris extinkció kvantumkémiai értelmezése: arányos az „Átmeneti dipólus-momentum”-al

Megengedett, és tiltott átmenetek .....nagy vagy kis valószínűségű átmenetek

## Aromás szénhidrogének elektron-átmenetei kiegészítve a vibrációs állapotokkal

A két legfelső elektron spin-állapotai. Gerjesztett állapotban az egyik az alap-, a másik a gerjesztett állapot spin-állapotát jelzi



## Abszorpciós átmenetek:

Széles skála! A molekulák vibrációs módusai kihatnak az elektron-állapotokra: „vibronikus” átmenetek

Az elektron-átmenet (alap → gerjesztett) valószínűségének kvantummechanikai származtatása

Born-Oppenheimer közelítés:  
Az elektronok a magoktól függetleneknek tekinthetők:  
A hullámfüggvény szorzatra bomlik

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

Elektronok    Magok  
koordinátái

Átmeneti momentum

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

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



## A kiválasztási szabályok kvantummechanikai háttere

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

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

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

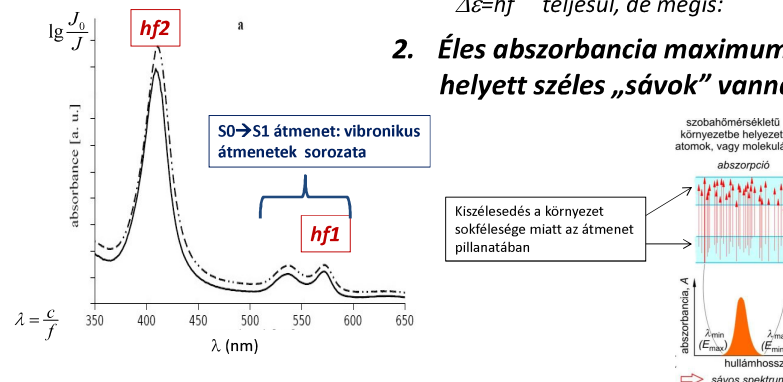
$$M_{gn \leftarrow a0} = \int \phi_{a0}^*(Q) M_{ag}(Q) \phi_{gn}(Q) dQ \cong \overline{M}_{ag} \int \phi_{a0}^*(Q) \phi_{gn}(Q) dQ$$

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

## Az elektron-állapotok sémáját molekulákra ki kell egészíteni a vibrációs állapotokkal

$\Delta \varepsilon = hf$  teljesül, de mégis:

2. Éles abszorbancia maximumok helyett széles „sávok” vannak!



Válasz2: kétféle ok: 1. molekulákban vibronikus átmenetek

2. a környezet B.eloszlása energianívókon → a gerjesztett molekula körüli elektromos tér sokfélesége → az elektromos tér perturbálja az elektron-állapotokat

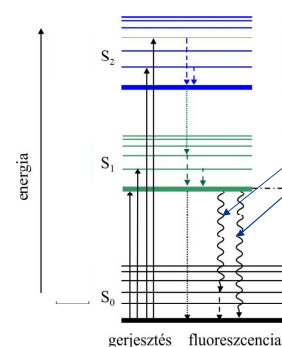
## Fényemisszióra vezető jelenségek - fényforrások

- Spontán fotonemisszió gerjesztett elektronállapotból:  
**Lumineszcencia**
- Hőmérsékleti sugárzás
- Fény-emisszió indukált emisszió révén: LASER
- LED : elektronok és lyukak elektromos tér által indukált rekombinációja szilárd (kristályos) félvezető diódákban

## Spontán fényemisszió gerjesztett elektronállapotból: Lumineszcencia

Két fajtája:  $S_n \rightarrow S_0$  átmenet **Fluoreszcencia**  
 $T_1 \rightarrow S_0$  átmenet **Foszforeszcencia**

### Fluoreszcencia



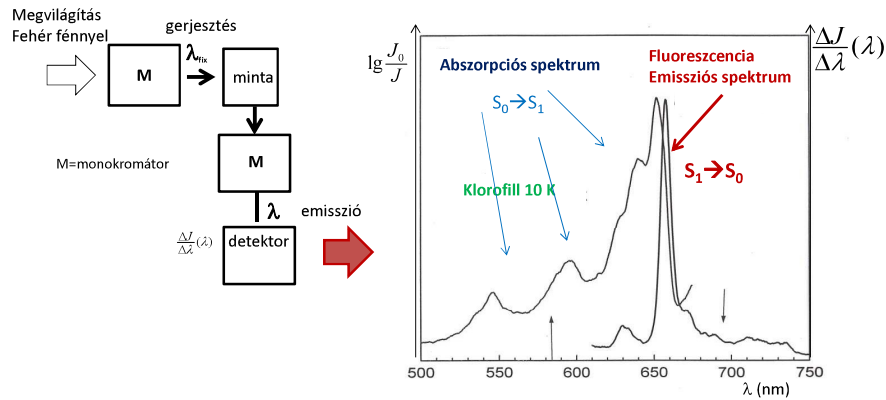
Relaxáció fotonemisszióval szingulett állapotok között

### 1.Kasha -szabály

Környezetükkel kölcsönható molekulák fluoreszcencia emissziója a **legalsó gerjesztett elektronállapot legalsó vibrációs szintjéről** történik az alapállapot vibrációs szintjeire, bármilyen magasabb nívóra is történt a gerjesztés.



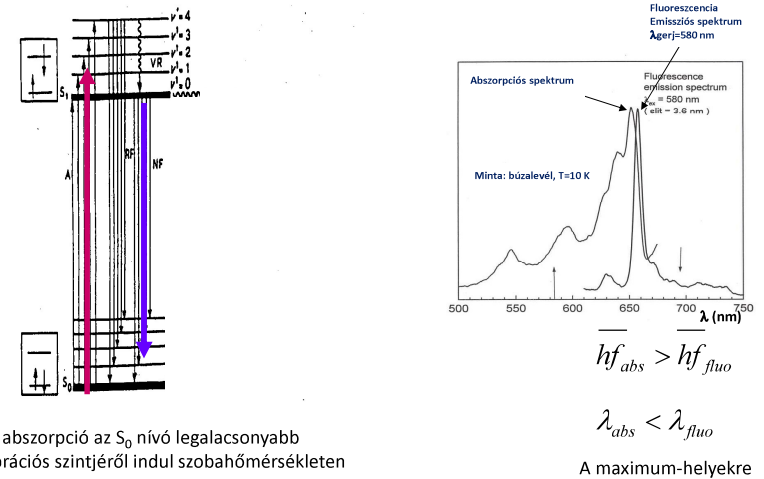
## 2. Fluoreszcencia spektroszkópia



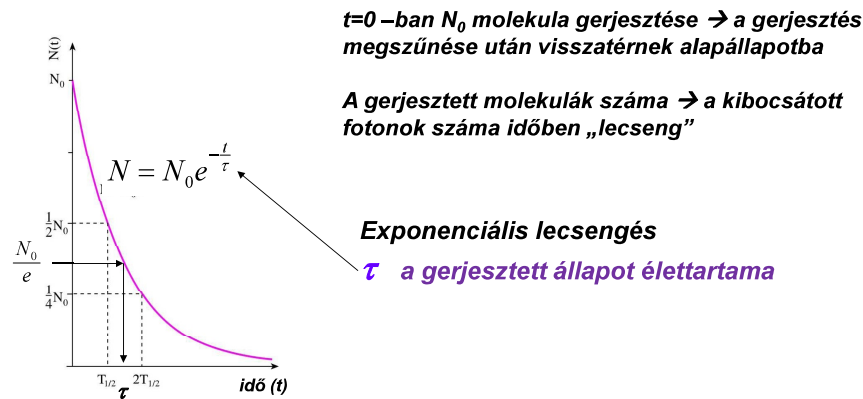
Fluoreszcencia gerjesztési spektrum:  $\frac{\Delta J}{\Delta \lambda}(\lambda_{fix})$  a  $\lambda_{gerj}$  függvényében  $\rightarrow$  arányos az abszorpciós spektrummal

## 3. Stokes-shift

Az abszorbeált és emitted fotonenergiák átlagai az emisszió előtti relaxáció és a vibrációs állapotok miatt nem egyeznek meg



## 4. A gerjesztett állapot élettartama – fluoreszcencia lecsengés



A szingulett gerjesztett állapot ( $S_1$ ) élettartama rövid  $\sim 10^{-9}$ s



Köszönöm a figyelmet!