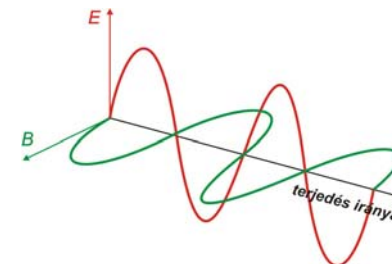


Fényszórás mérése

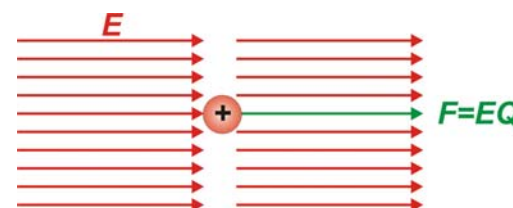
A megfigyelhető jelenségek



A jelenség magyarázata



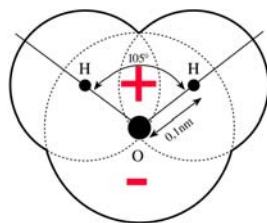
A fény
elektromágneses
hullám.



Az elektromos tér
töltésekre
erőhatást fejt ki.

A dipólus keletkezése

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



pl. víz – állandó dipólus

Időlegesen létrejövő
dipólusok



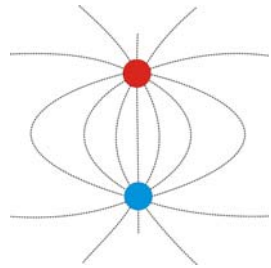
Oscilláló dipólusok

Váltakozó elektromos
erőtér.

Oscilláló dipólusokat
hoz létre.



Dipólusok erőtere



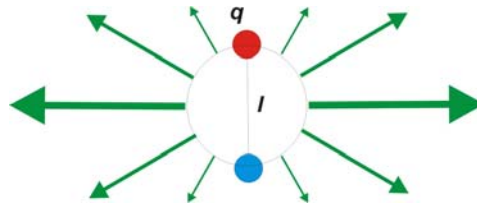
Jellemző mennyiségek:

q – töltés

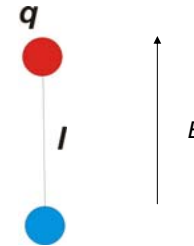
l – a töltések közötti távolság

d – dipólus momentum

$d = ql$
(vektor mennyiség)



Polarizálhatóság



Polarizálhatóság:

Egységnyi erősségű elektromos tér által keltett dipólmomentum nagysága.

$$d = \alpha E$$

Kvantitatív felhasználás

Mérhető mennyiség: a szórt fény intenzitása.

Mitől függ?

1. A részecskék számától.
2. A részecskék méretétől.
3. A megfigyelés irányától

A szórt fény intenzitása

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

α – polarizálhatóság

N – részecskeszám

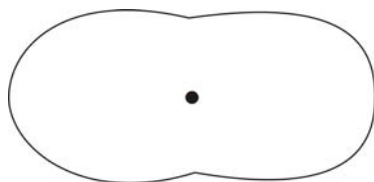
λ – hullámhossz

R – a detektor távolsága

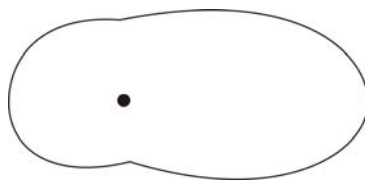
Θ – a megfigyelés szöge

Szórásprofil

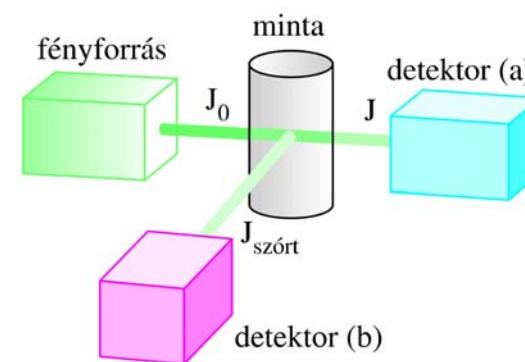
Raleigh-szórás
A részecskék mérete $< \lambda$



Mie-szórás
A részecskék mérete $> \lambda$



Intenzitás mérések



Nefelometria

Kismértékű fényszórás esetében.

A szórt fény intenzitása
arányos a
koncentrációval.



Turbidimetria

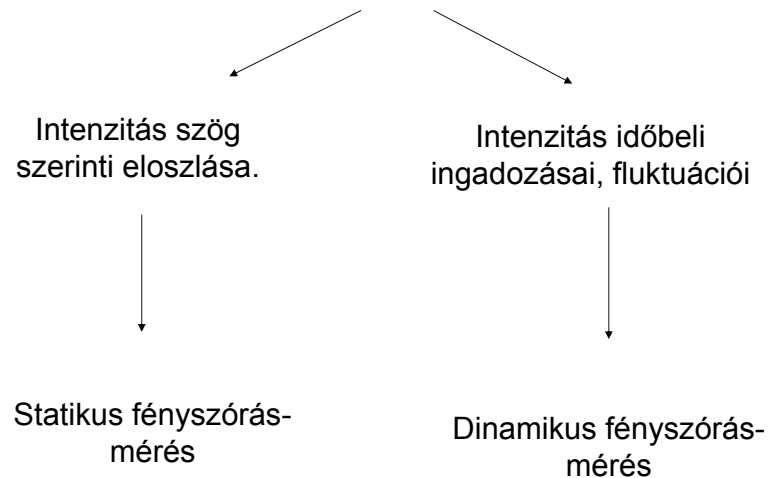
Nagymértékű fényszórás esetében.

Az eredeti irányba továbbhaladó fény
intenzitását mérik.

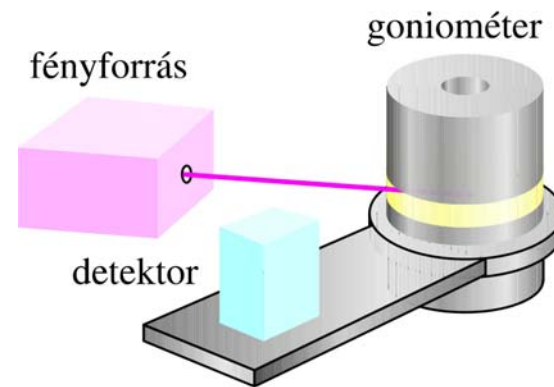
A mért optikai densitás arányos a
koncentrációval.



Részletesebb információ

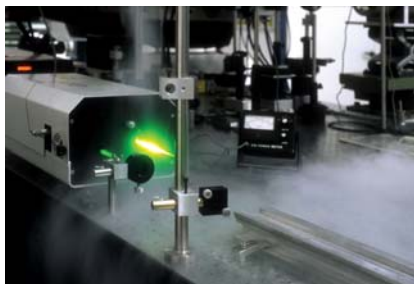


Fényszórás mérő felépítése



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

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

$$q = \frac{4\pi n}{\lambda} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \quad R_{ex} = \frac{J_{oldat} - J_{oldószér}}{R^2 J_0}$$

Információk

Kisméretű részecskék
esetében $P(q) = 1$



ha c és Θ tart a nullához, a
mólsúly meghatározható

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

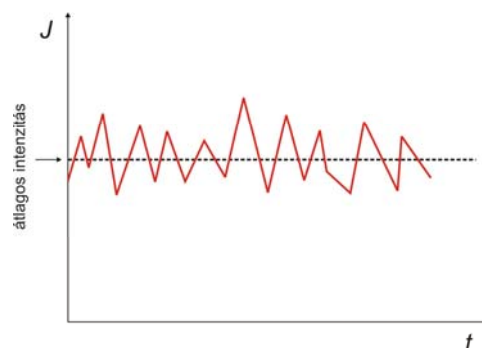
Nagyméretű
részecskék esetében



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

Dinamikus fényszórás-mérés

Az intenzitás időbeli változásának,
fluktuációjának megfigyelése.



A fluktuáció oka:

A részecskék
véletlen mozgása,
diffúziója.

Diffúzió

Jellemző mennyiség: a diffúziós állandó (D).

Fick I.:

$$\frac{dm}{dt} = -D \cdot q \cdot \frac{dc}{dx} \quad \bar{R}(t) = \sqrt{3Dt}$$

Gömb alakú részecskék esetében:

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

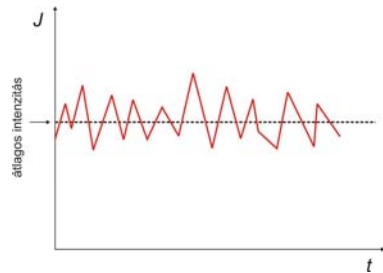
k – Boltzmann áll.

T – hőmérséklet

η – a közeg viszkozitása

r – a részecske sugara

Feldolgozás



A fluktuációk jellegzetes időskálája μ s nagyságrendű.

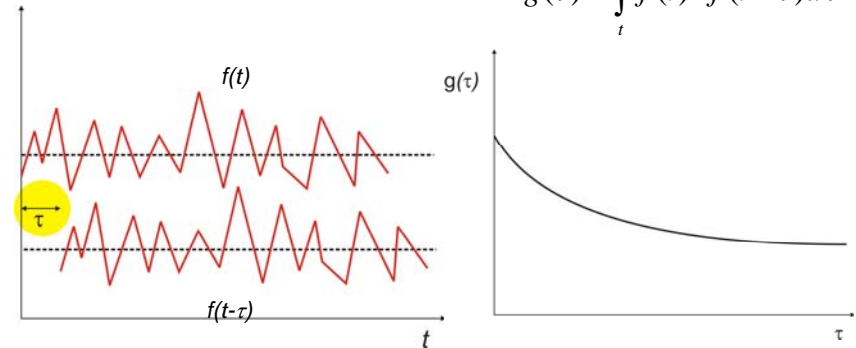
Az egymás után beérkező fotonok számlálása.

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

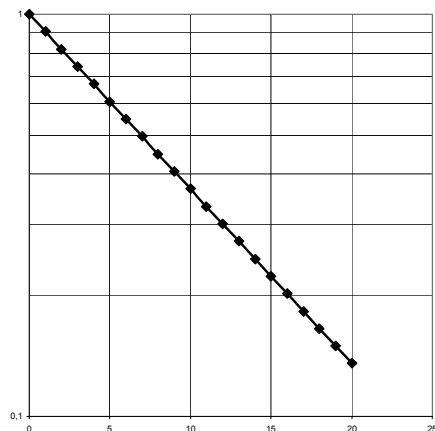
A részecskék mérete azonos, a mozgásukra jellemző diffúziós állandó is azonos.

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 \underline{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.

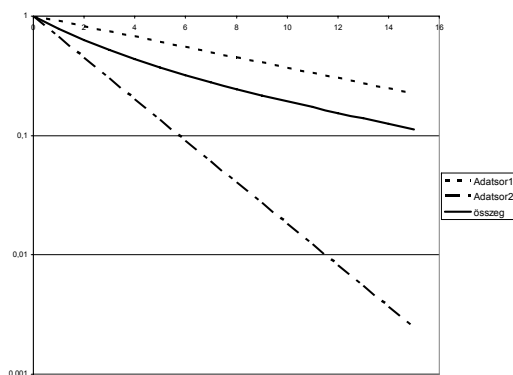
Polidiszperz rendszer



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!



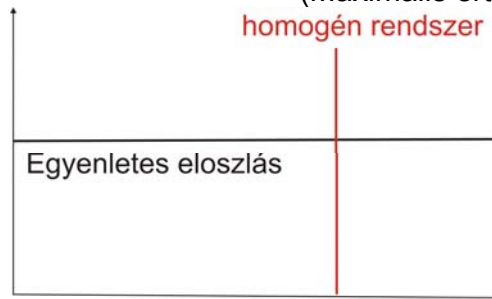
?

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

Q

Maximum entrópia
elve

S

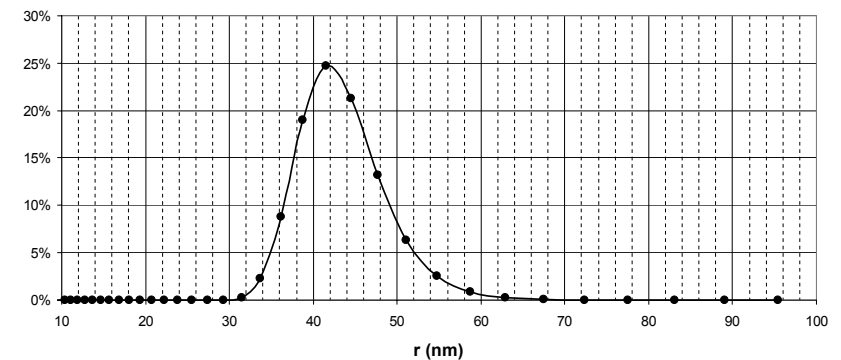
$$L = Q - \alpha S$$

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

Kalibrálás

Pl. meghatározott méretű és eloszlású polisztirol
gömböcskék segítségével.

polisztirol (86 nm) részecske méreteloszlás



Egy alkalmazás

