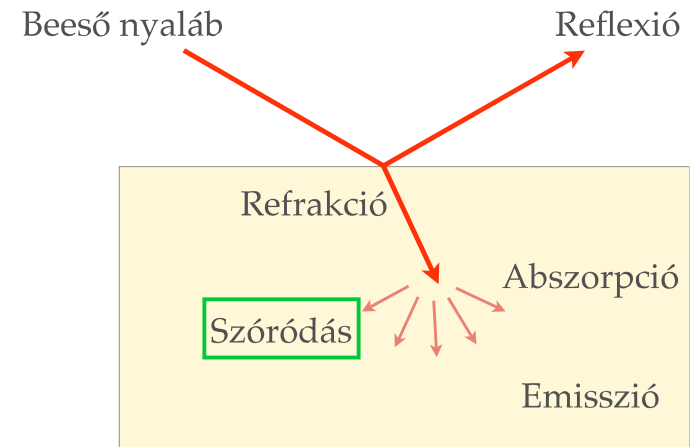


FÉNY KÖLCSÖNHATÁSA AZ ANYAGGAL: SZÓRÁS, ABSZORPCIÓ

KELLERMAYER MIKLÓS

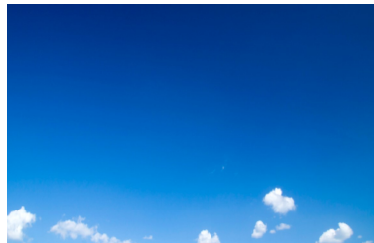
FÉNY KÖLCSÖNHATÁSA AZ ANYAGGAL



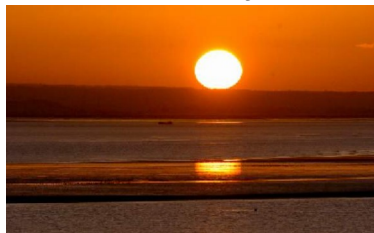
FÉNYSZÓRÁS



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: $Qd t^{-1}$

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

N.B. - Coulomb törvény:

$$F \sim \frac{Q_1 Q_2}{r^2}$$

(dimenziója $Q^2 d^{-2}$)

Dimenzionális
levezetés

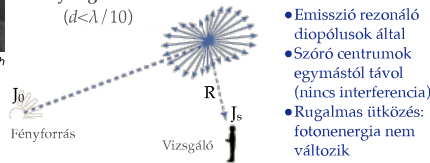
| Fizikai kifejezés | Dimenzió | Művelet |
|--------------------------|--------------------------|--------------------------------------|
| p_0^2 | $Q^2 d^2$ | Négyzetre emelés |
| p_0^2 / c^3 | $Q^2 d^{-2} d^4 = F d^4$ | Bővítés $d^2 d^{-2}$ -nel |
| $(p_0^2 / c^3) \omega^4$ | $F d t^3$ | Osztás c^3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

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

FÉNYSZÓRÁS



Rayleigh szórás
($d < \lambda / 10$)



- Emisszió rezonáló diopólusok 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
 α = polarizálhatóság (E/d)
 λ = hullámhossz
 R = távolság a vizsgáló és szóróközeg között
 Θ = megfigyelő - sugárforrás közötti szög



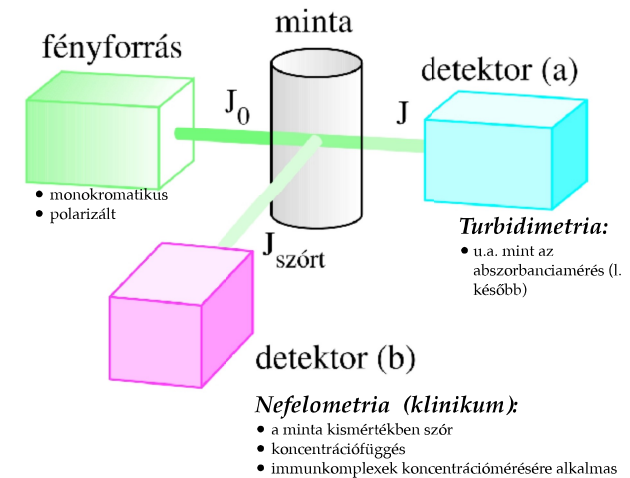
Erős hullámhosszfűggés → a szórt fényben a rövid hullámhosszak dominálnak → kék ég



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

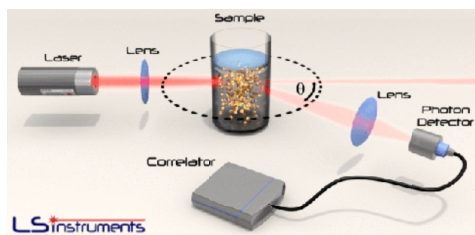
Ha a szóró centrumok egymással kölcsönható atomok hullámhossz-méretű halmazai → interferencia, kioltás → esőcseppek kiszürkülnek (felhők)

A FÉNYSZÓRÁS MÉRÉSE, ORVOSI ALKALMAZÁSAI

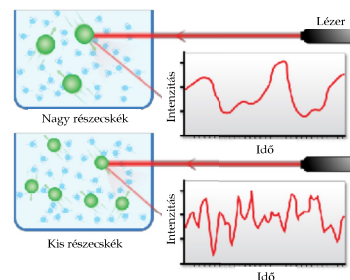


DINAMIKUS FÉNYSZÓRÁS

Diffundáló nm-skálájú részecskék



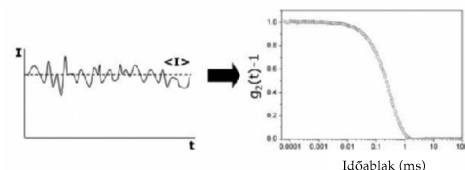
Szórt fény intenzitása időben fluktuál



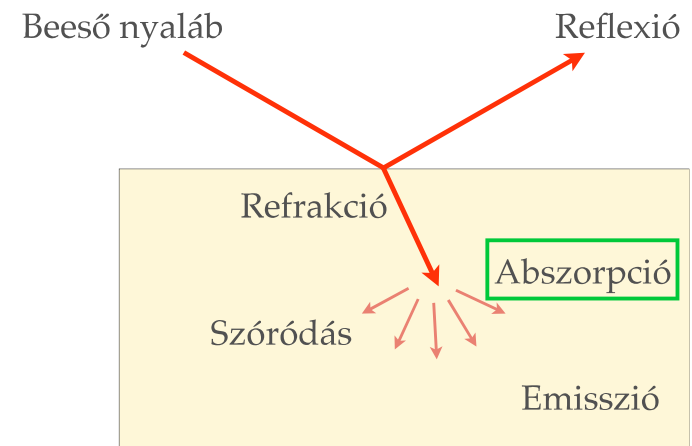
A fluktuáció sebessége a részecskemérettől függ

- 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)

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

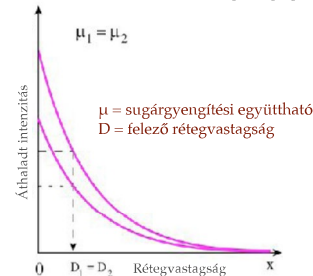
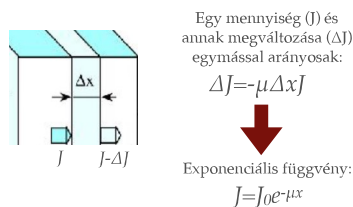
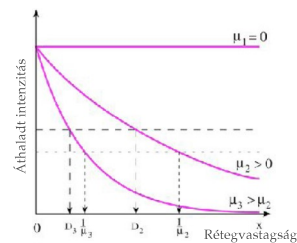
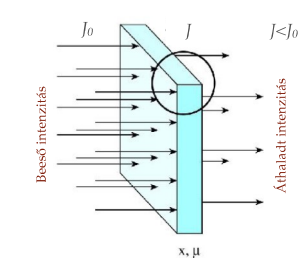


FÉNY KÖLCSÖNHATÁSA AZ ANYAGGAL



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

ÁLTALÁNOS SUGÁRGYENGÍTÉSI TÖRVÉNY

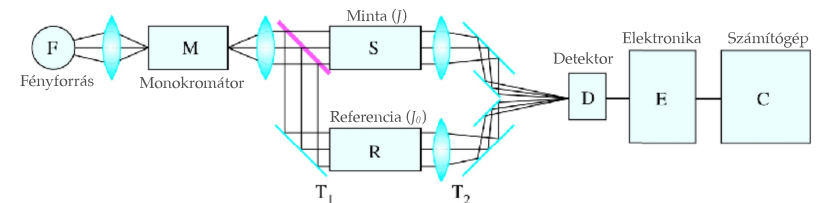


AZ ABSZORPCIÓ PARAMÉTEREI ÉS MÉRÉSE

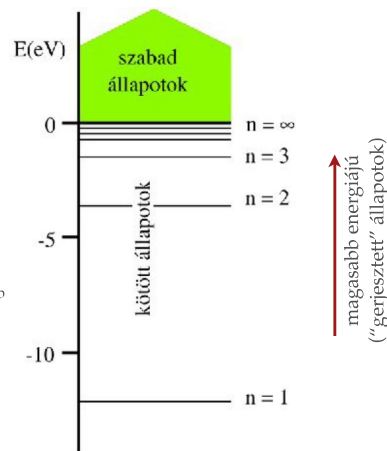
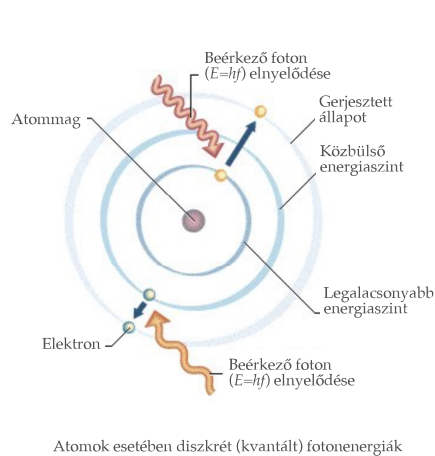
Abszorbanca (A): $A = \lg \frac{J_0}{J} = \lg e \cdot \mu \cdot x$ Dimenzió nélküli szám
Színónimák: extinkció, optikai
denzitás (OD), optikai sűrűség

Transzmittivitás (T): $T = \frac{J}{J_0} \cdot 100$ Százalékban (%) fejezzük ki
Színóníma: transzmissziós tényező

Fotometria ("fénymérés"):



FÉNYABSZORPCIÓ ATOMI ÉS MOLEKULÁRIS MECHANIZMUSAI



MOLEKULASZERKEZET

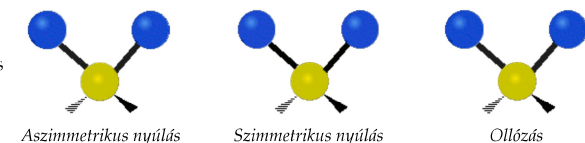
Molekula: kovalens kötéssel
összekapcsolt atomok
Legegyszerűbb eset: kétatomos
molekula (pl., hidrogénmolekula)



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
(-CH₂-):



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

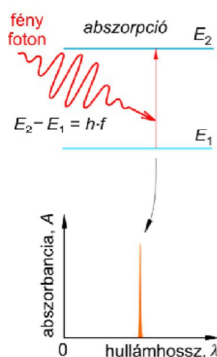
Energiaszintek közötti különbségek nagyságrendje különbözik:

$$E_e \sim 100 \times E_v \sim 100 \times E_r$$

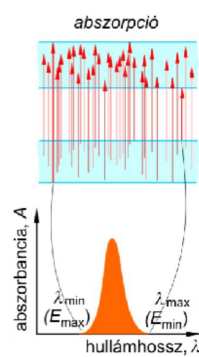
$$\sim 3 \times 10^{-19} \text{ J } (\sim 2 \text{ eV}) > \sim 3 \times 10^{-21} \text{ J} > \sim 3 \times 10^{-23} \text{ J}$$

A SÁVOS SZÍNKÉP EREDETE

Egyedülálló atomok

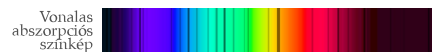


Molekulák



Sávos színkép - eredete:

- kémiailag ugyanolyan molekulák eltérő energiaállapotban vannak
- hőmozgás
- oldatkörnyezet



A fényforrás spektrumában megjelenő keskeny eloszlású hiányok: abszorpciós vonalak

ENERGIA ÁLLAPOTOK ÁBRÁZOLÁSA

Jabłoński-féle termséma:

egy molekula elektronállapotait, és a közöttük végbemenő átmeneteket (nyilakkal) mutatja

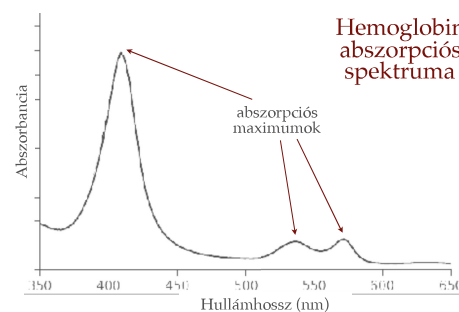


Alexander Jabłoński
(1898-1980)



A FÉNYABSZORPCIÓ HULLÁMHOSSZFÜGGŐ

Magyarázat: atom és molekulaszerkezet!



Általános sugárgyengítési törvény:

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

Híg oldatokra - Lambert-Beer törvény:

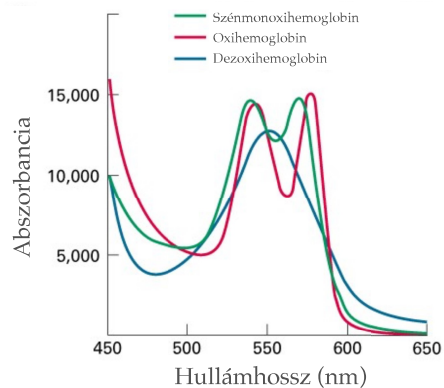
$$A_\lambda = \lg \frac{J_0}{J} = \epsilon_\lambda \cdot c \cdot x$$

ϵ_A = moláris extinkciós együttható
 c = koncentráció

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

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

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.

FÉNY KÖLCSÖNHATÁSA AZ ANYAGGAL

