


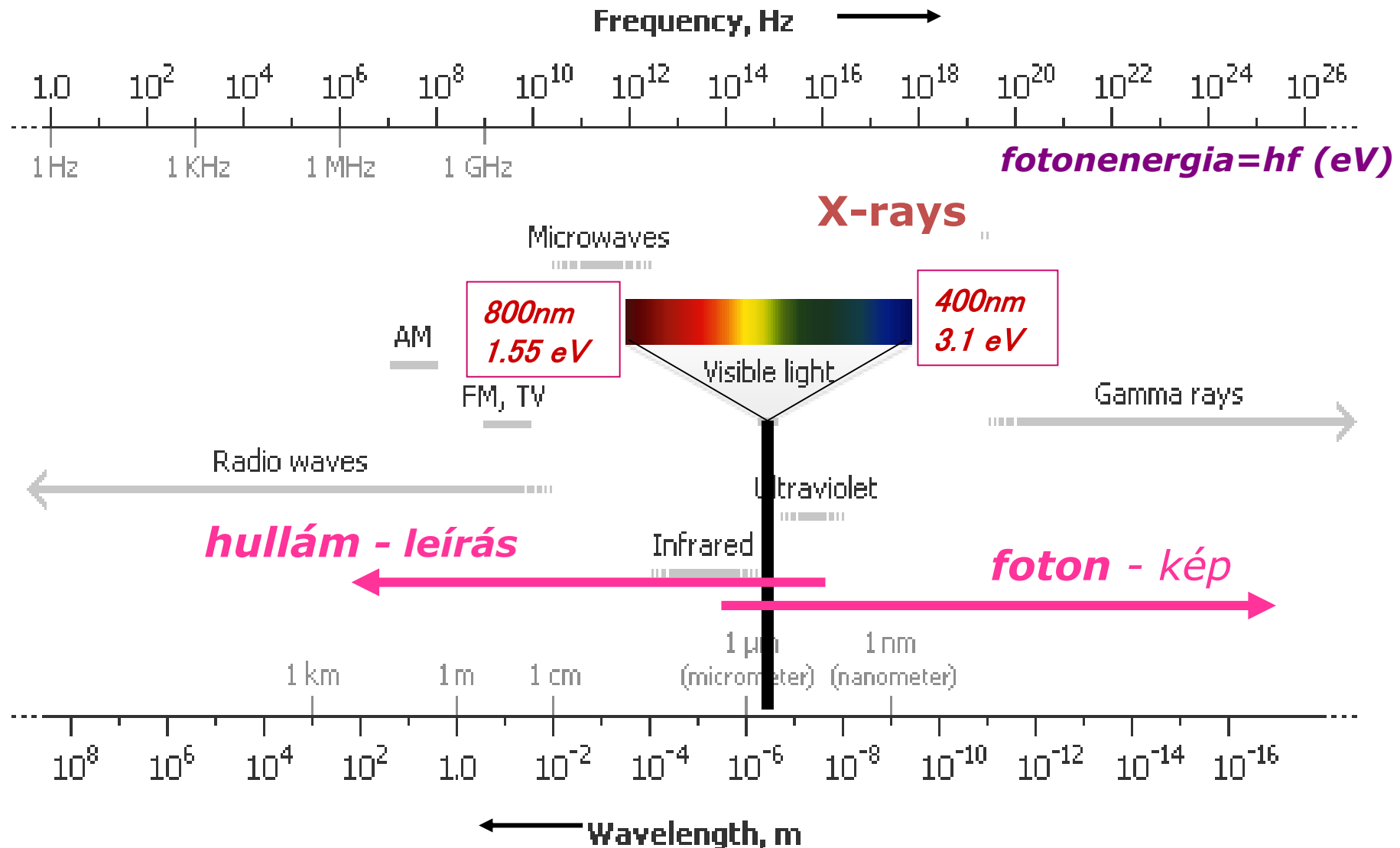
Elektromágneses sugárzások; fény-röntgen-gamma-
sugárzások kölcsönhatása a biológiai anyaggal.
Alapjelenségek, fény tartomány.

Prof. Emeritus Fidy Judit
2022, Március 30

 -al jelölt diák: idő hiányában nem beszéljük meg, de része az anyagnak. Konzultáció!

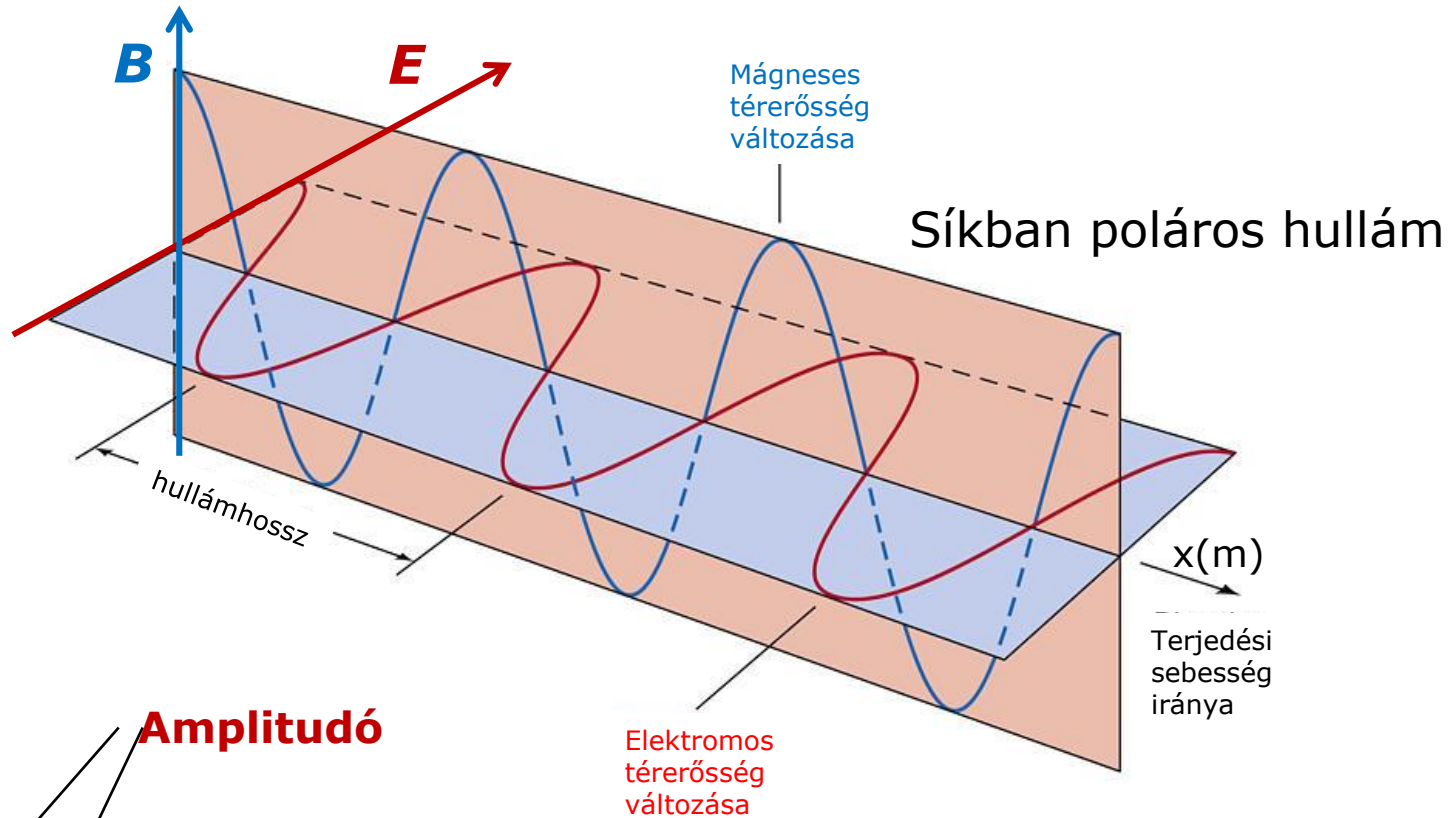
Elektromágneses sugárzások – kettős természet

Logaritmikus skála





Elektromágneses sugárzások, mint hullámok



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

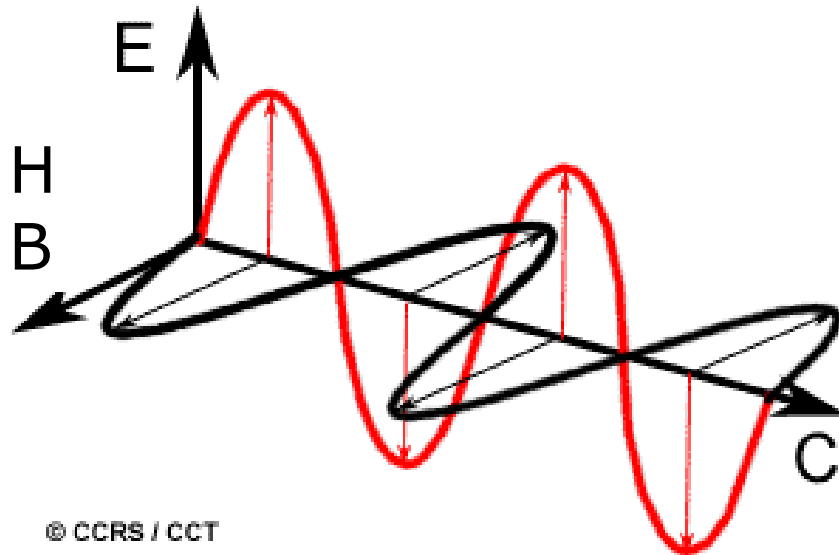
$$B = B_{\max} \cdot \sin\left(2\pi \frac{t}{T} + 2\pi \frac{x}{\lambda} + \Phi\right)$$

*Az elektromos és mágneses
térerősség változásnak
azonos a fázisa és a
periodicitása (T, λ)*

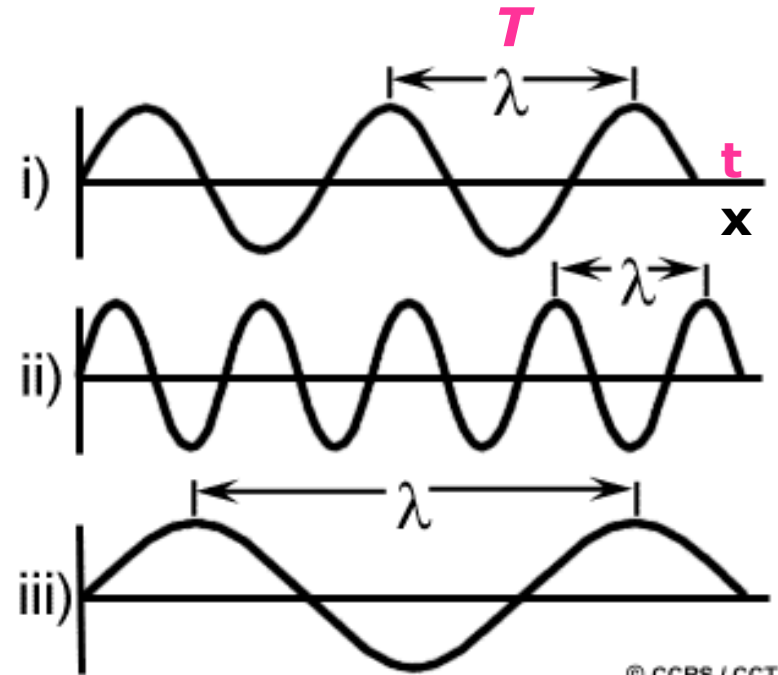
Fázis



EM hullámok paraméterei



© CCRS / CCT



© CCRS / CCT

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

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

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



emlékeztető

EM sugárzások foton-képe

Fotonenergia fogalma:

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

Planck, Einstein

$$h = 6.626 * 10^{-34} \text{ J} * \text{s}$$

Fotonenergia egysége: elektron-volt, eV

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

elektron töltése

1 Volt feszültséggel gyorsított elektron energiája

A látható fény fotonenergiája néhány eV

$$pl.f = 4 * 10^{14} \text{ Hz} \rightarrow h * f = 2.65 * 10^{-19} \text{ J} = 1.66 \text{ eV}$$

mélyvörös szín

Elektromágneses sugárzások kölcsönhatása a biológiai anyaggal – alapja: **energiaátadás**



sugárzás intenzitása gyengül

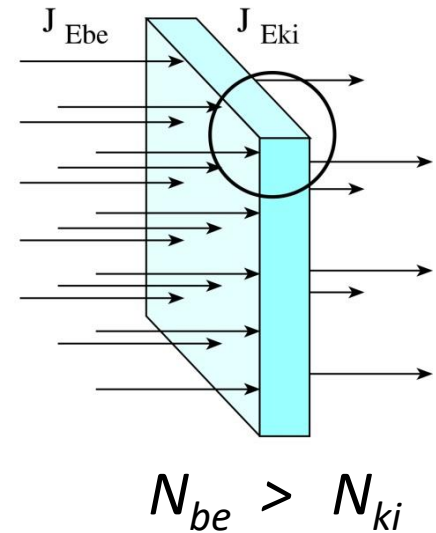
$$P = \frac{\Delta E}{\Delta t} = \frac{\Delta N \cdot hf}{\Delta t}$$

$$J = \frac{\Delta P}{\Delta A} \quad J \left[\frac{W}{m^2} \right]$$

$$J_{ki} = J_{be} e^{-\mu x}$$

$$E = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{foton-szám}}}{N} \cdot hf$$

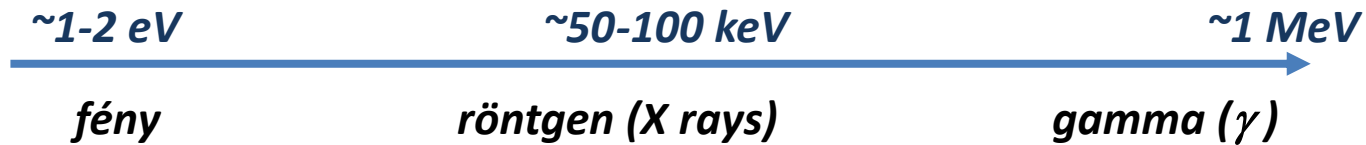
a **foton-kép**



Energiaátadás feltétele: legyenek olyan energiaállapotai az anyagnak, amelyek a sugárzás fotonjainak energiáját fel tudják venni

Mi veszi fel a fotonenergiát az anyagban?

Orvosi alkalmazások



Általánosságban:

az EM foton „partnere” az elektron
a tárgyalt energiatartományban

1 foton

oszthatatlan
energiaadag



1 elektron (felhő)

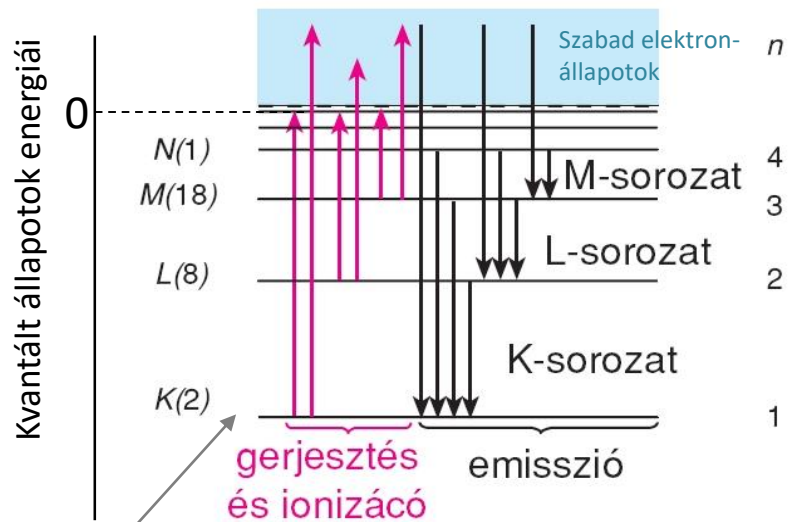
1 elektron
energia-állapot-változása

Milyen energiaállapotai lehetnek az anyag elektronjainak?

Izolált atomok: maghoz kötött elektronok kvantált energia-állapotai

- alapállapot: a maghoz legközelebbi állapotok „betöltve” elektronokkal (energia-minimum)
- „gerjesztett” állapot: egy elektron távolabbi (magasabb energiájú) energianívóra kerül
- „ionizáció”: az elektron kiszakad a mag kötelékéből--> „szabad elektron”

pl. Cu(29)



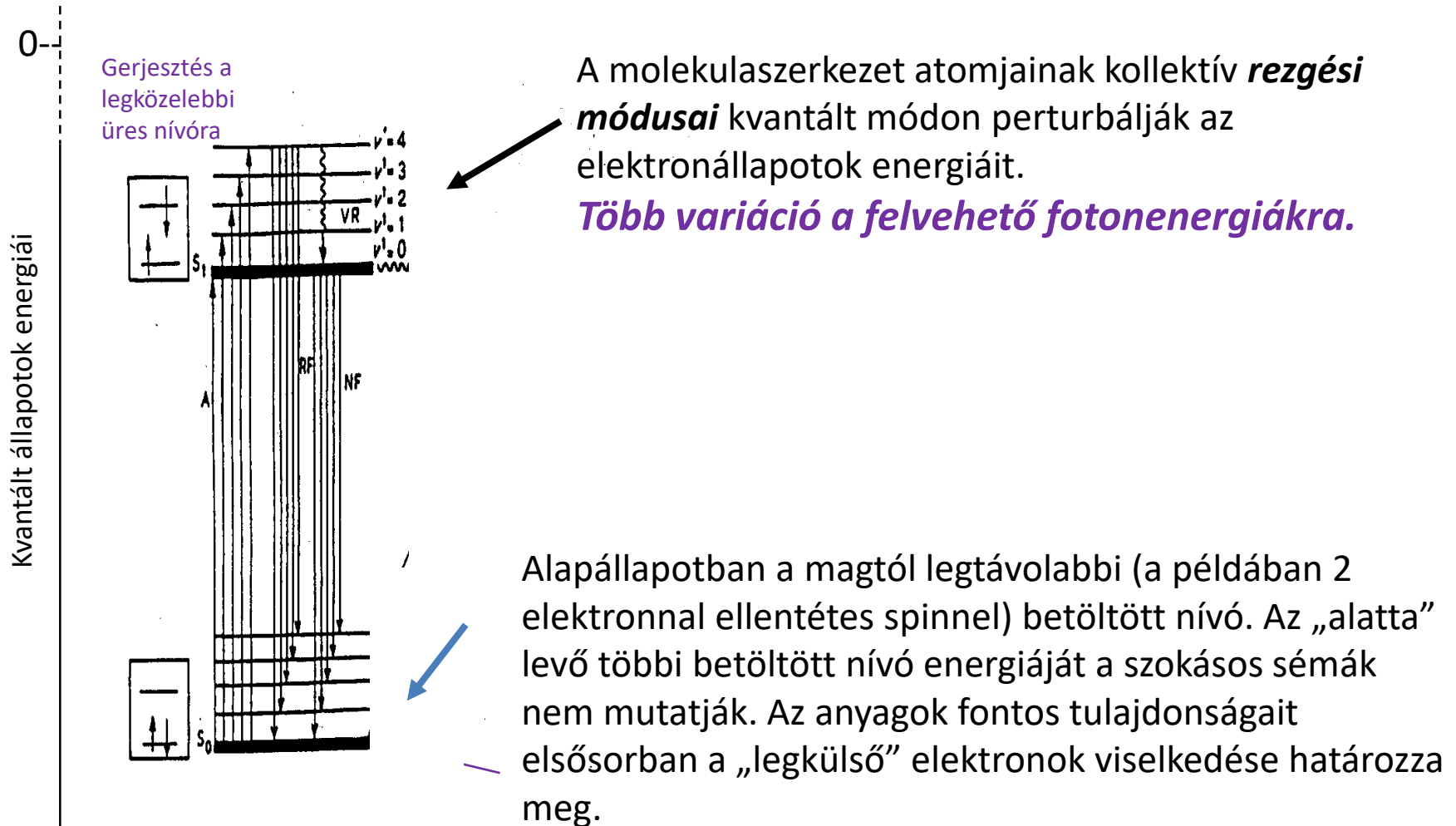
Maghoz legközelebbi állapot
 $n=1$, 2 elektron ellentétes spinnel

***K-héjról történő ionizációhoz
szükséges energia minimuma***

H(1)	0.0136 keV = 13.6 eV
Al(13)	1.6 keV
Fe(26)	7.1 keV
Cu(29)	9.0 keV
Zn(30)	9.7 keV

Milyen energiaállapotai lehetnek az anyag elektronjainak?

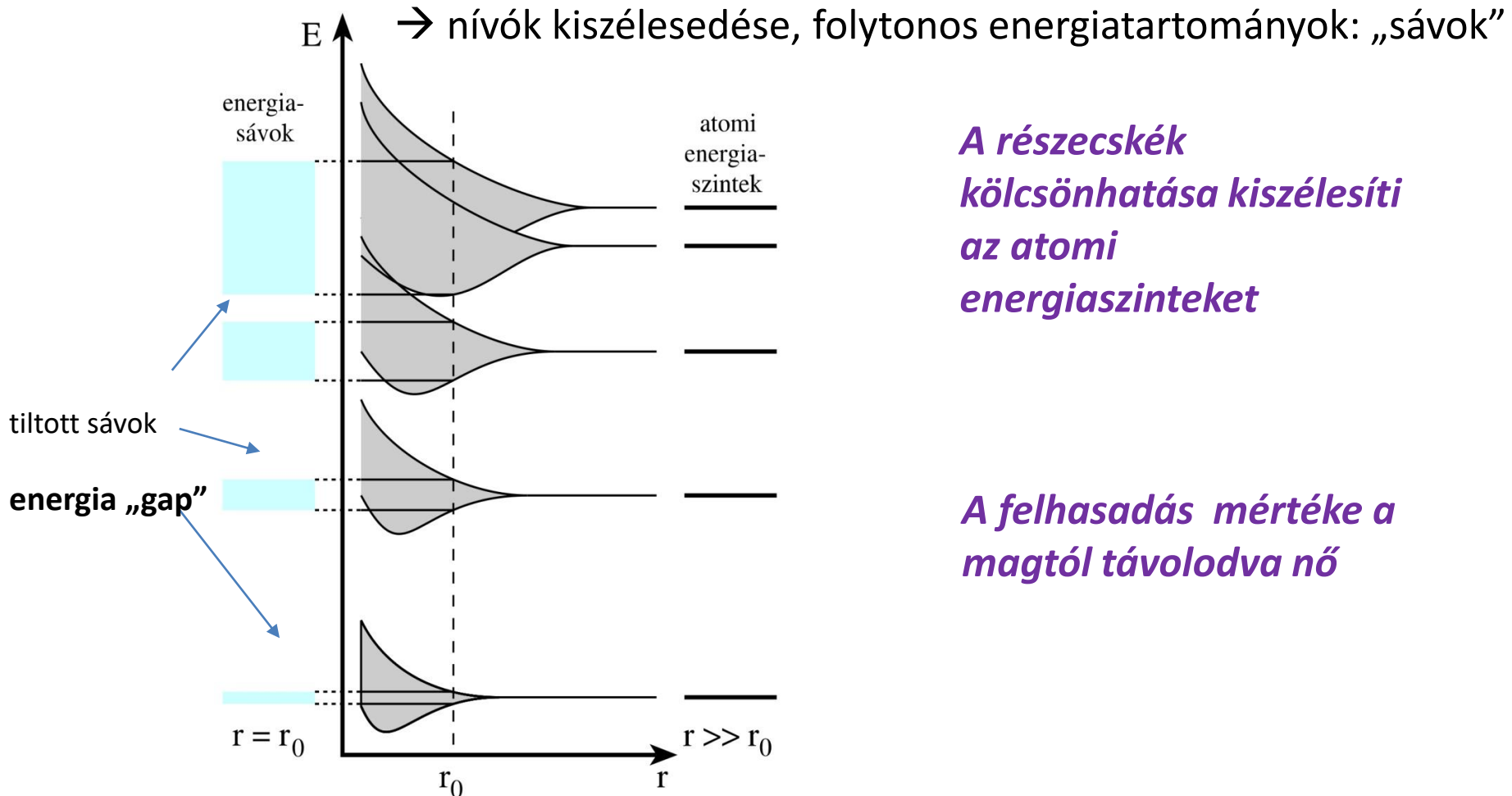
Izolált molekulák



Milyen energiaállapotai lehetnek az anyag elektronjainak?

Kölcsönható atomok/molekulák: szilárd kristályos anyagok

Kristályban N kölcsönható azonos atom \rightarrow egy atomi nívó N nívóra hasad: $N \sim 10^{23}$



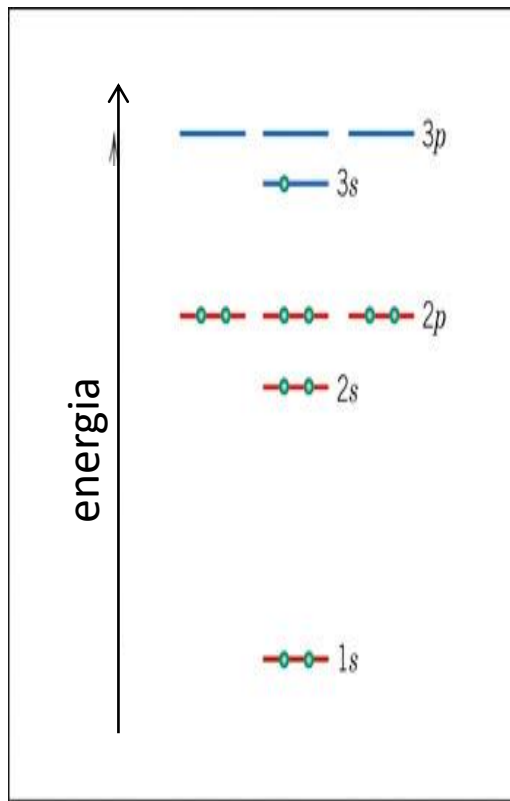
A részecskék kölcsönhatása kiszélesíti az atomi energiaszinteket

A felhasadás mértéke a magtól távolodva nő

r_0 : atomok egyensúlyi távolsága a kristálysírkban

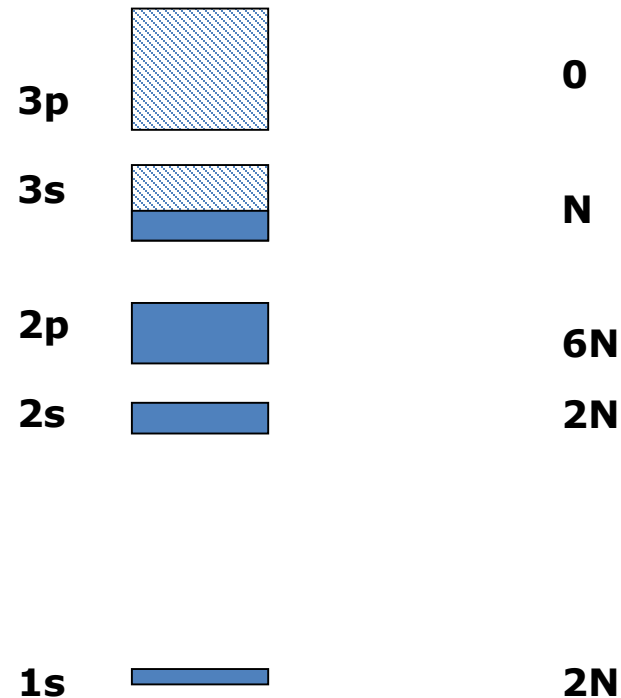
Példa: szilárd kristályos Na energia-sáv (band) modellje

Izolált Na energianívói és azok betöltöttsége



$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Szilárd Na energiasávjai és azok betöltöttsége



Részen
betöltött
nívó

Egy „sávban levő” elektronok száma: $2(2l + 1)N$
 $N \sim 10^{23}$
 ↑
 mellékkvantumszám

Mi szabályozza az állapotváltozás **valószínűségét**?

Az elektron-átmenetekben a pályák között a kvantumszámok változását **kiválasztási szabályok** kötik meg:

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

megengedett

átmenetek

tiltott

Legszigorúbb tiltás: az elektron spinállapota nem változhat

Fontos az elektronrendszer spinállapota → Elnevezések, jelölések

„S” (szingulett) állapot

Az atom/molekula összes elektronja
spinkvantumszámának összege

$$\sum_i s_i = 0$$

**pl. S_0 : a legalacsonyabb
energiájú szingulett állapot -
alapállapot**

„T” (triplett) állapot

$$\sum_i s_i = 1$$

EM sugárzás energiaátadásának feltétele:

legyenek olyan energiaállapotai az (anyagnak) elektronoknak, amelyek a sugárzás fotonjainak energiáját fel tudják venni →

Feltétel: a foton meghatározott (diszkrét) energiaadagja egy elektron energiáját

- *megengedett átmenetben*
- *nem betöltött* energiaállapotba vigye át

Mi szabályozza az elektronállapotok betöltöttségét?

Az eddigi leírás

- az **energiaminimum-elv**nek felelt meg*
- a hőmérséklet szerepéről nem volt szó, **$T=0$** (?)*

Reális hőmérsékleten a Termodinamika II. főtételét is figyelembe kell venni!

Modell:

egy sok részecskés (pl. elektronok) izolált rendszerünk van (N , E állandó) reális hőmérsékleten, környezetével termikus egyensúlyban (T állandó), ahol a megkülönböztethető részecskék többféle meghatározott energiát (l. elektron-energia-nívók) vehetnek fel.

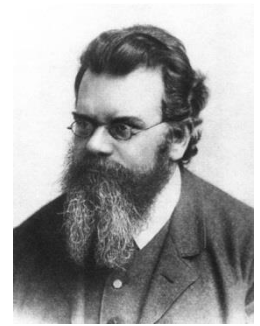
L.E. Boltzmann:

Az *entrópia abszolút értékének definíciója:*

$$S = k_B \cdot \ln \Omega$$

$$k_B = 1,380649 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

Ω jelentése: az S entrópiájú **makroállapotot** megvalósító **mikroállapotok száma**



Ludwig Eduard Boltzmann
1844-1906, osztrák fizikus

Példánk: elektronok eloszlása az energiaállapotokban

$$\Omega \leftrightarrow W$$

Mikroállapot: *melyik* részecske *mekkora* energiával rendelkezik
– minden részecskére megadva

Makroállapot: N, T, S, E



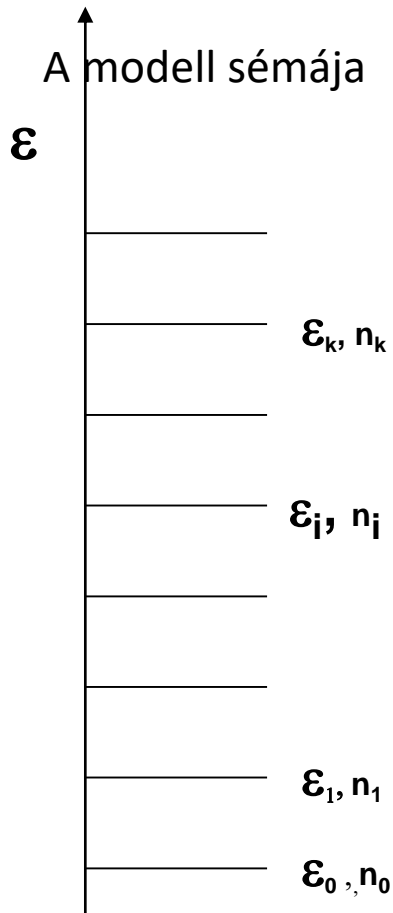
II. Főtétele

Olyan betöltési számok valósulnak meg, amelyeket a legtöbb féle mikroállapot valósít meg →

$$S = S_{\max}$$



$$S = S_{\max} \text{ (egyensúlyi állapot) } \longrightarrow \textbf{Boltzmann eloszlás}$$



N igen nagy számú megkülönböztethető, független részecske
 Termikus egyensúlyban (zárt rendszerben),
 $T > 0$ hőmérsékleten

ε_j egy részecske lehetséges energiája

n_j az ε_j energiával bíró részecskék száma

$$E = \sum_j n_j \varepsilon_j \quad N = \sum_j n_j \quad N, E, T = \text{állandó}$$

A Boltzmann eloszlás egyik függvényformája

$$\frac{n_k}{n_j} = e^{-\frac{\varepsilon_k - \varepsilon_j}{kT}} = e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}$$

**Boltzmann
faktor**

Az energia-szintek bármely (j,k) kombinációjára igaz

Boltzmann eloszlás - diszkusszió

$$E = \sum_j n_j \varepsilon_j \quad N = \sum_j n_j$$

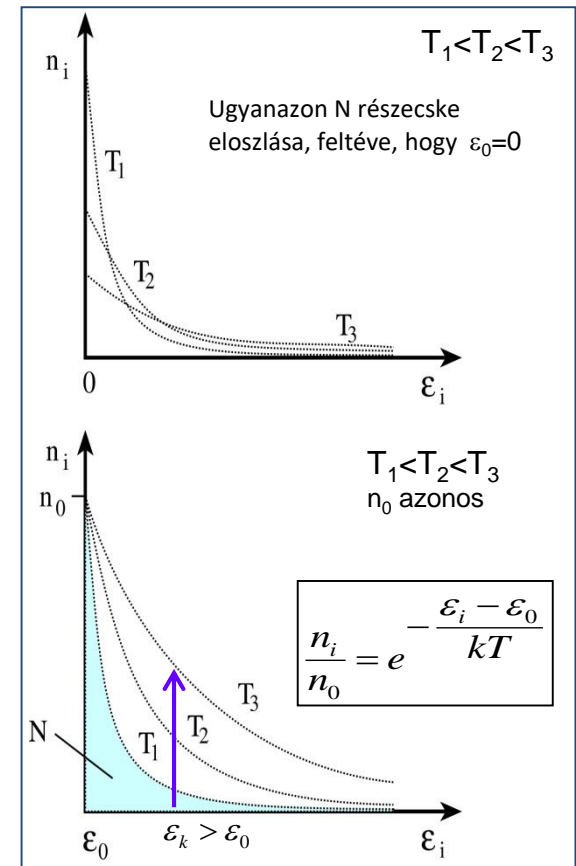
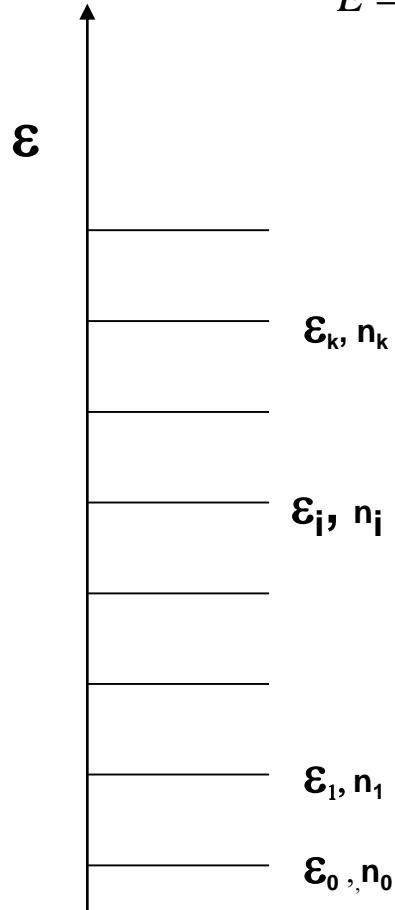
$$\frac{n_k}{n_j} = e^{-\frac{\varepsilon_k - \varepsilon_j}{kT}} = e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}$$

Populációk: a részecskék „eloszlanak” az energia-szinteken

$$\frac{n_i}{n_0} = e^{-\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_0}{kT}} = e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}$$

Minden hőmérsékleten igaz, hogy a betöltöttség a kis energiák felé nő.
Alacsonyabb hőmérsékleten az alsó nivók populációja megnövekszik

Egy kiválasztott $\varepsilon_k > \varepsilon_0$ nagyobb energiájú nivó populációja az energiaminimum populációjához képest nő a hőmérséklettel.



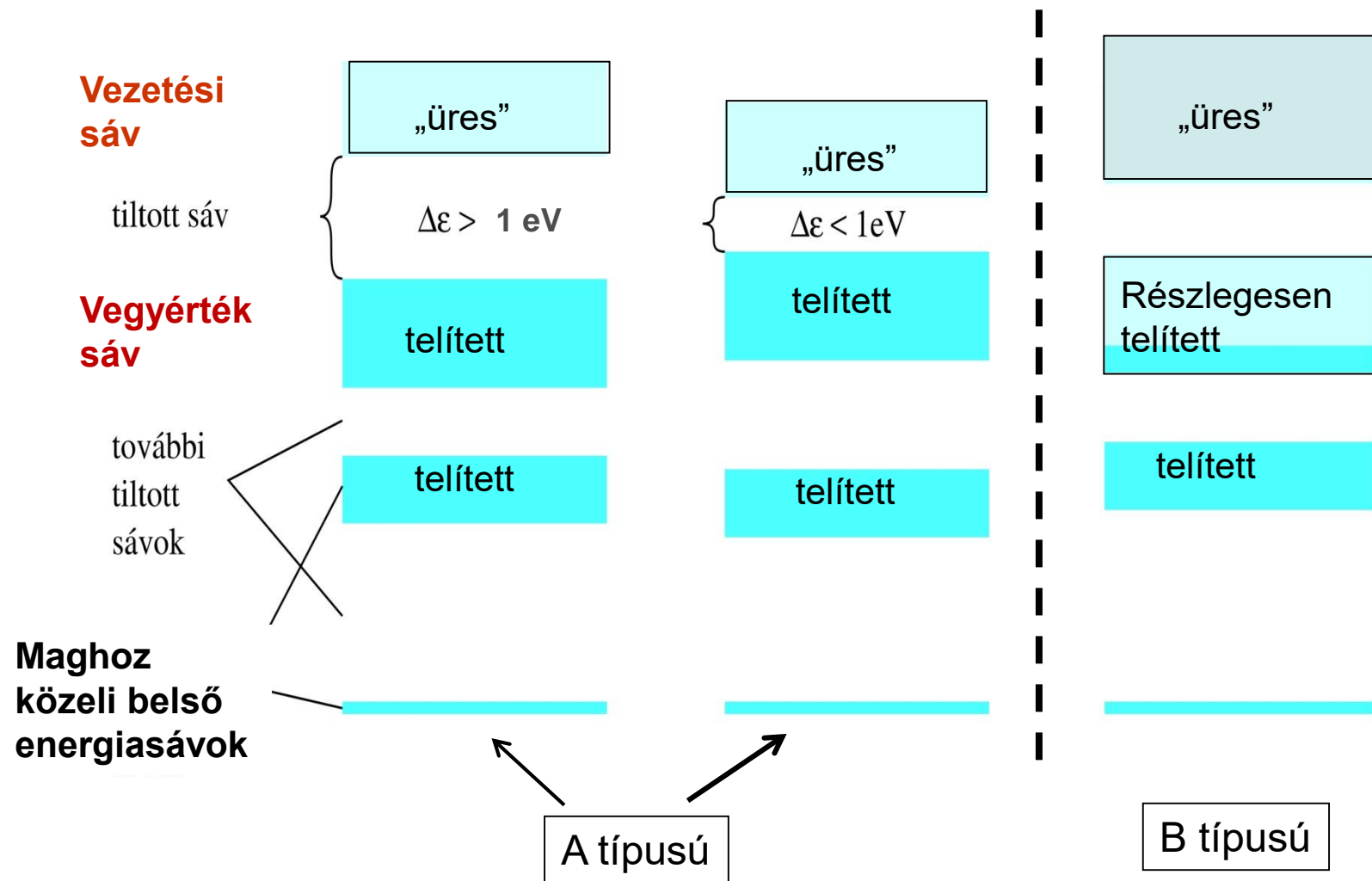
Hogyan befolyásolja az EM fotonok elnyelését a Boltzmann eloszlás?

Pl. Szilárd fázisban (kölcsönható rendszerek)



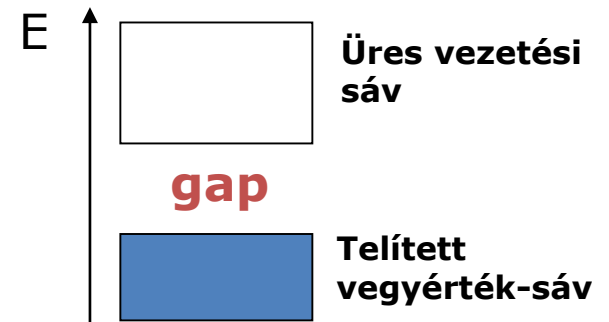
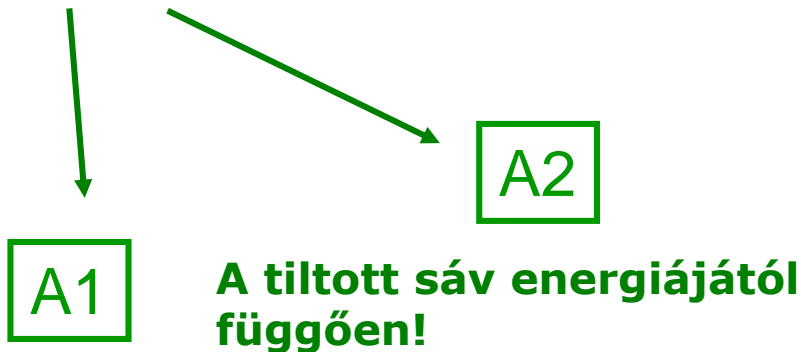
Energia-sáv modell

A fizikai/kémiai tulajdonságok a legfelső telített és a legalsó üres sáv energetikai tulajdonságaitól függenek → **három jellegzetes anyagcsalád: A1 – A2 - B**



Tiltott sáv → „gap”

A - Telített vegyértéksáv – üres vezetési sáv



Miért?

$$\frac{n_{\text{vezetési}}}{n_{\text{vegyérték}}} = e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}$$

$\Delta\varepsilon = E_{\text{gap}}$ és kT viszonya dönti el, hogy lehetnek-e termikus okokból elektronok a vezetési sávban

$kT \sim 0.023 \text{ eV}$ $T=300 \text{ K}$,
 $k=1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ Boltzmann állandó

A1

E_{gap} túl nagy kT -hez képest \rightarrow
szigetelők

$$E_{\text{gap}} \gg 1\text{eV}$$

Pl. gyémánt $E_{\text{gap}} = 5.4\text{ eV}$

$$\frac{n_{\text{vezetési}}}{n_{\text{vegyérték}}} = e^{-\frac{5.4}{0.023}} = e^{-235} = 0$$

- Nincs elektromos vezetés (elektromos letörés: $\sim V/\text{kötés} \rightarrow 10^{10} V/m$)
- Nincs fényelnyelés a VIS tartományban: $E_{\text{VISfoton}} < E_{\text{gap}} \rightarrow$
VIS-ben átlátszóak
- lehetséges, hogy $E_{\text{UVfoton}} \cong E_{\text{gap}} \rightarrow$ **UV-ben lehet, hogy nem átlátszóak**
- **IR elnyelés**: egyensúlyi kötéstávolság körüli rezgések gerjesztése

A2

E_{gap} nem túl nagy kT -hez képest \rightarrow termikusan legyőzhető
(tisztá) félvezetők

$$E_{gap} \leq 1eV$$

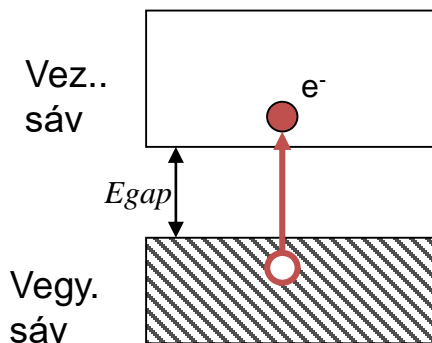
	$E_g (eV)$	
0 K		
Si	1.1	
Ge	0.75	

$$\frac{n_{vez}}{n_{vegy}} = e^{-\frac{0.75(Ge)}{0.023}} = e^{-33} = 7 * 10^{-15}$$

$$n_{vegyérték} \approx 6 * 10^{23} ! \Rightarrow n_{vezetési} \approx 4 * 10^8$$

\downarrow
1 M- \rightarrow 32g ($\rho=5.5 \text{ g/cm}^3$) $\rightarrow 4 * 10^8 \text{ e}^- / 6 \text{ cm}^3$

A vezetési elektronok a vegyérték sávból termikus „gerjesztéssel” jönnek létre \rightarrow kétféle töltéshordozó



n -típusú töltéshordozó (vezetési **elektron**: **negatív töltés**)

p – típusú töltéshordozó (**lyuk**: **elektron-hiány**:
pozitív töltés)

(tiszt) félvezetők - folytatás

Elektromos tulajdonságok

$$\sigma = konst. * e^{-\frac{E_{gap}}{2kT}}$$

Gyengén függ T-től

Kétféle töltéshordozó keletkezése és rekombinációja együtt – keletkezési valószínűség arányos a B. faktoral.

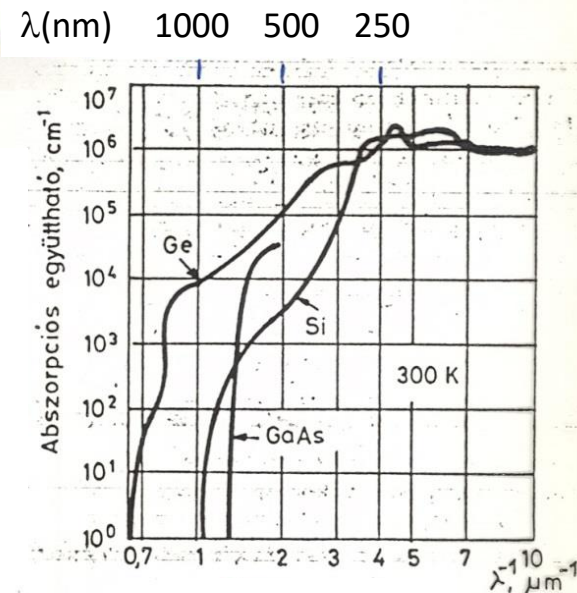
A fajlagos vezetőképesség (σ) a hőmérséklet emelkedésével nő →
→ **termorezisztorok** → **hőmérséklet-mérés**

Optikai tulajdonságok

$$hf_{VIS} > E_{gap}$$

Fényfoton elnyelődhet! →
gerjesztés a vezetési sávba

- VIS átlátszatlanság
- Fényelnyelés elektromos vezetést indukál →
→ **fotodetektorok**



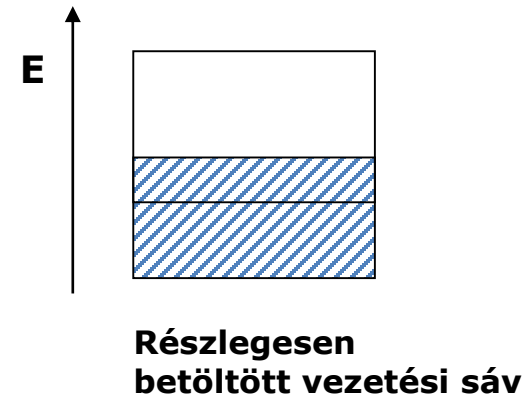
**B**

nincs tiltott sáv a vegyérték és a vezetési sáv között → jó vezetők : fémek

Pl. 1- és 2-vegyértékű fémek: Na, Mg, Cu..

	Cu	Si	T=293 K
n(töltés)/m ³	9x10 ²⁸	1x10 ¹⁶	
fajlagos ellenállás (1/σ) (Ohmxm)	2x10 ⁻⁸	3x10 ³	

↑
Igen kis ellenállás → nagy vezetőképesség



Az elektronok energia-felvétele széles tartományban lehetséges a részlegesen betöltött vezetési sávon belül

Tulajdonságok

- Elektron-vezetés, nagy vezetőképesség
- Széles energiatartományú foton-abszorpció → átlátszatlanság

$$\sigma \approx \frac{1}{T}$$

A fajlagos vezetőképesség **csökken** a hőmérséklettel
↗ **félvezetők!**

Különleges család A2-n belül

Szennyezéses félvezetők

„Szennyezés” (*Doping*) speciális technika: igen tiszta félvezető kristályban (*host*) igen kis mennyiségben egymástól távol, izoláltan elhelyezett idegen komponens

$$\frac{N_{host}}{N_{dopant}} \approx 10^6$$

→ **Izolált szennyezők (dopants)**

Ötlet: megfelelően kiválasztott **dopant csökkenti az E_{gap}** -t, így a termikusan létrehozott töltések száma megnövekszik

Kétféle kombinációt realizáltak

4-vegyértékű gazda-rácsban **5**-vegyértékű dopant

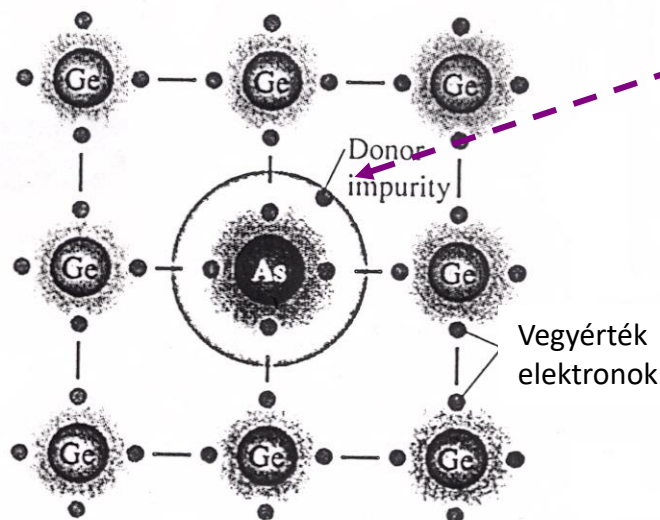
4-vegyértékű gazda-rácsban **3**-vegyértékű dopant

↗ **n-típusú félvezető**
↘ **p-típusú félvezető**

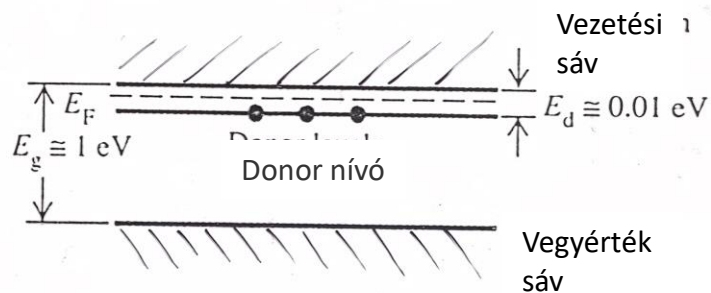
Host (gazdarács): Ge, Si

Dopant: 5-vegyértékű : P, As, Bi
3-vegyértékű : B, Al, Ga, In

Pl. 4-vegyértékű Ge kristályrács szennyezve 5-vegyértékű As atomokkal



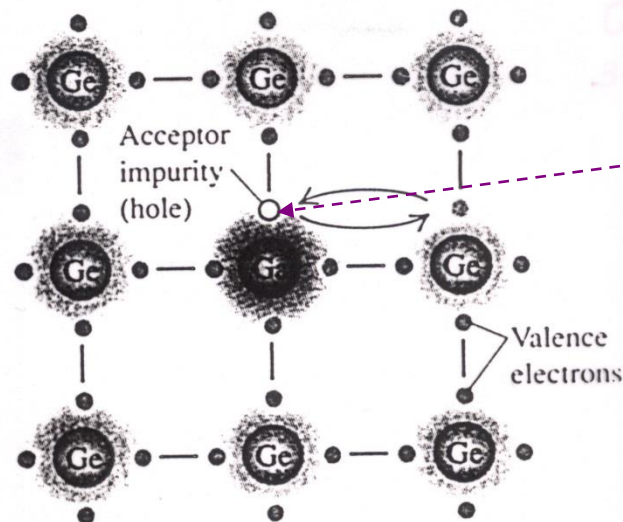
(a)



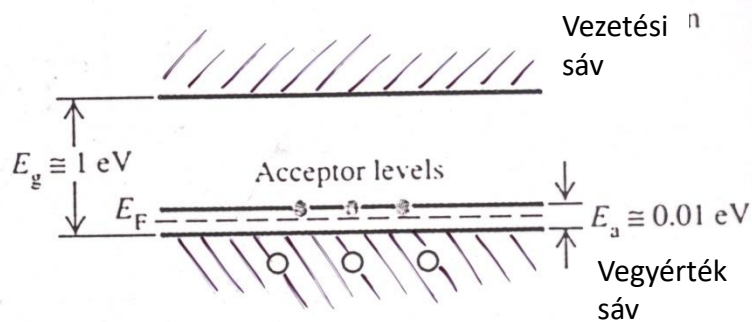
Az ötödik As-elektron nem tud részt venni kovalens kötésben \rightarrow gyengén kötött a szennyezés helyén \rightarrow kis energiával kiszabadulhat és részt vehet a vezetésben: „donor” állapot \rightarrow ***n-típusú vezetés***

A donor nívók csak a szennyezőkön léteznek, nem tudnak delokalizálódni. Ha gerjesztődnek ezek az elektronok, akkor a hátramaradt „lyukak” szintén lokalizáltak, nem vesznek részt a vezetésben.

Pl. 4-vegyértékű Ge kristálysírács szennyezve 3-vegyértékű B atomokkal



(a)



(b)

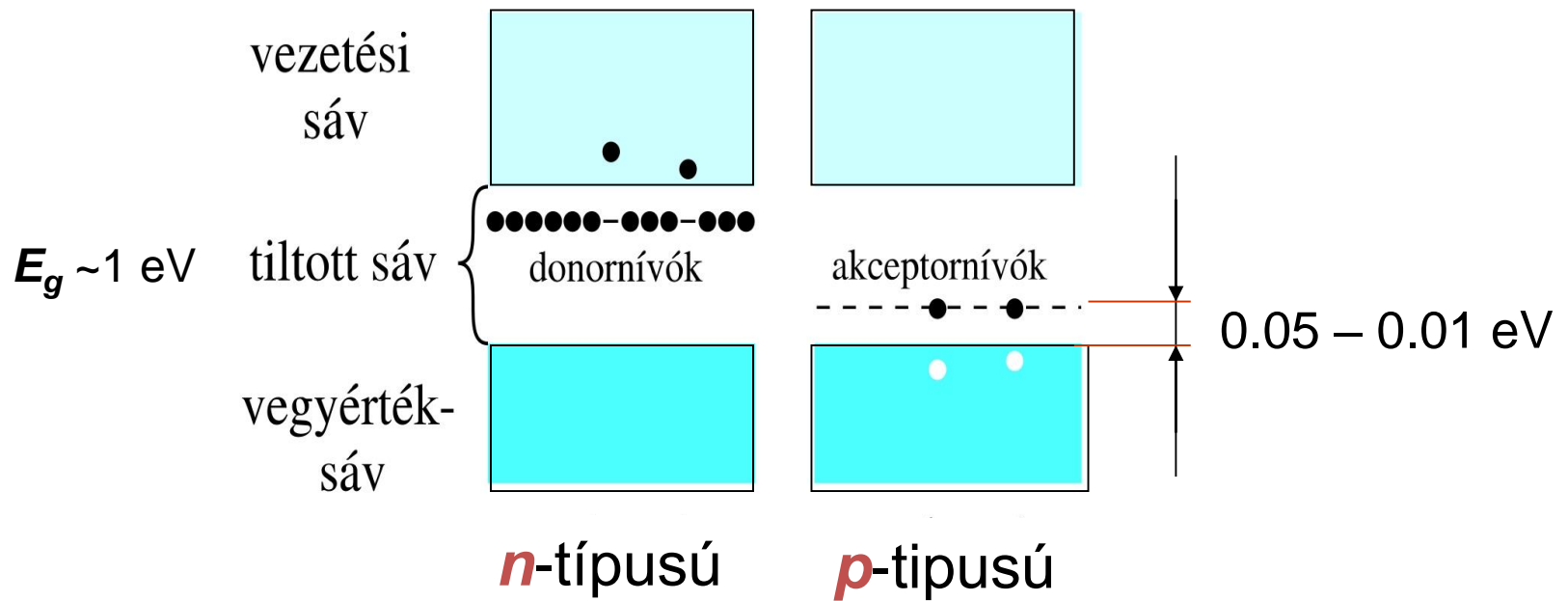
A B atomnál egy kötő elektron „hiányzik” → könnyen tud kötni egy szomszédos elektront a Ge atomokról: „akceptor”-hely

→ *p-típusú vezetés*

Az „akceptor” energia-szint csak az izolált szennyező atomoknál létezik, de az elektron-hiány (lyuk) diffundálhat a Ge-atomok között



Összefoglalás: *n*- és *p*-típusú szennyezéses félvezetők



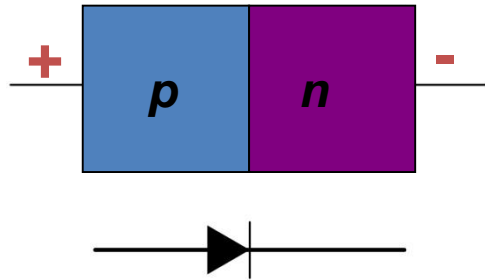
A szennyezőn létező donor nívó termikusan gerjesztett **elektronjai** vezetnek

A szennyező atomnál lekötetlen gazda-atom elektron „fogad” gerjesztett gazda-rács elektronokat : lokalizált akceptor-nívó populálása. A gazda-rácsban hátramaradó **lyukak** vezetnek

Az áramkörök alapelemei: dióda és tranzisztor

előállíthatók n- és p- típusú szennyezéses félvezetők

„nyitó” irányú kapcsolás: vezetés

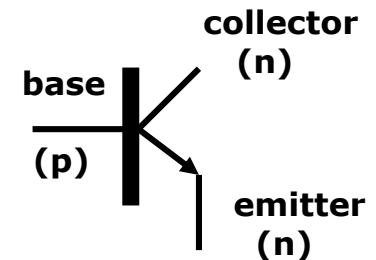
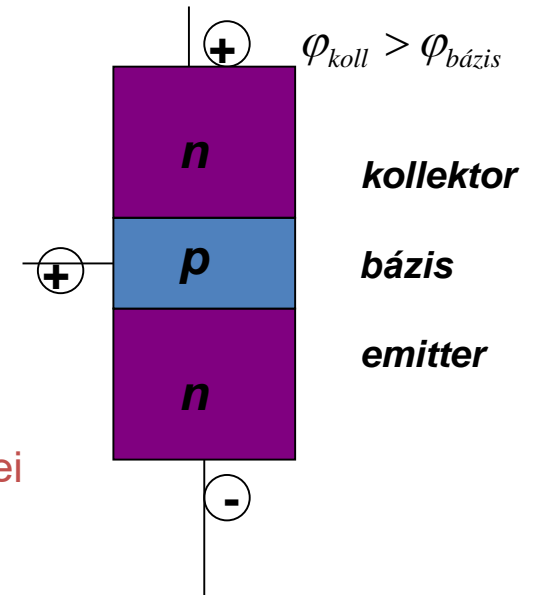


Dióda:

- egyenirányító
- elektromos feszültség → fényforrás LED
- megvilágítás → feszültség → pixel CCD kamerában

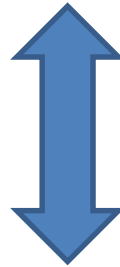
Tranzisztor:

- áramerősítő
- digitális memória elemei
- számlálók
- multivibrátorok



Feltétel a megfelelő szennyezés → *igen kis méretben* előállítható áramkörök → *mikroelektronika* lehetősége

***A fény
nem ionizáló sugárzás***



Diagnosztikai és terápiás alkalmazások

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)

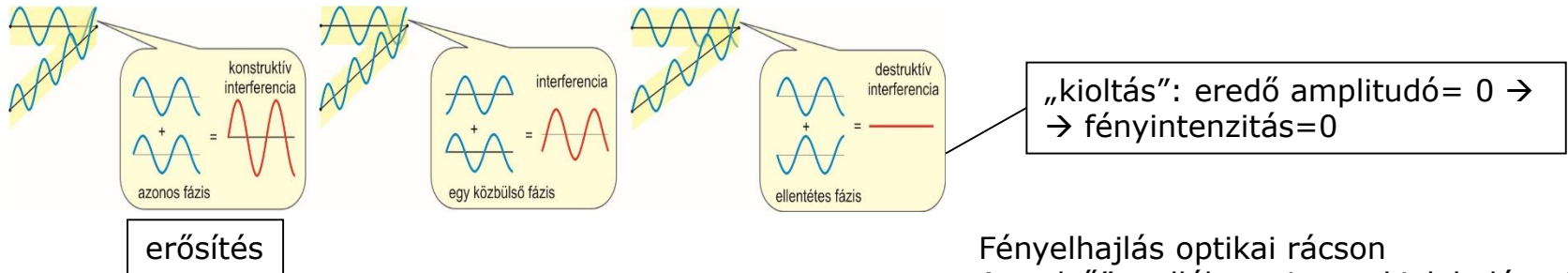
fotoelektromos hatás

energiaátadás anyagoknak kvantált energiaadagokban
kölcsönhatásokban partnere az elektron



Fényinterferencia – hullám leírás *emlékeztető*

Huygens elv – diffrakció – hullámok „szuperpozíciója”
eredő = hullámfüggvények összege



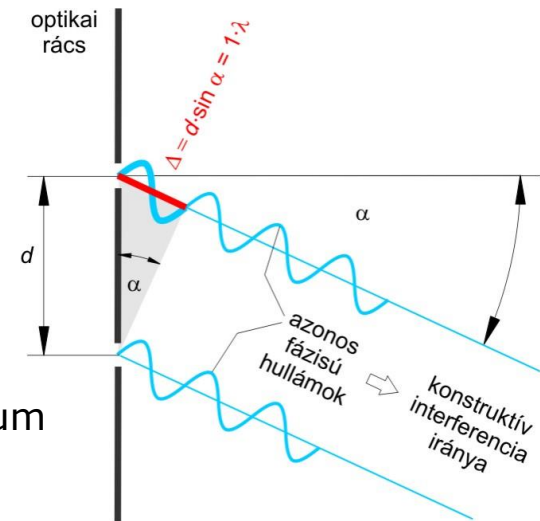
Az erősítés feltétele „**d**” periodicitású optikai rácson való fényelhajlás esetén α_k irányban

$$\Delta = d \sin \alpha_k = k\lambda$$

$$k=0,1,2,3,\dots$$

A megvilágítás irányához képest α_k irányokban erősítés
 $\alpha_0=0$ (megvilágítás iránya, $k=0$) → „nullad rendű” főmaximum

Fényelhajlás optikai rácson
Az „első” mellékmaximum kialakulása ($k=1$)



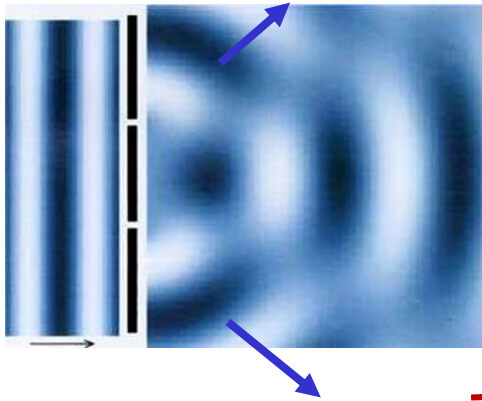
Fényintenzitás $J \left[\frac{\text{Joule}}{\text{m}^2 \text{s}} \right] = J \left[\frac{\text{W}}{\text{m}^2} \right] \approx (\text{Amplitudó})^2$

Az első interferencia-kísérlet: 1802,
Young: diffrakció két résen → interferencia

Thomas Young
1773-1829

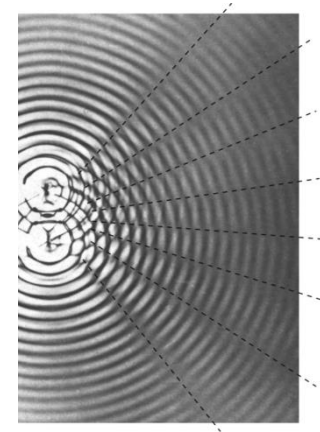


Hasonlóság: két pontforrás
hullámainak interferenciája

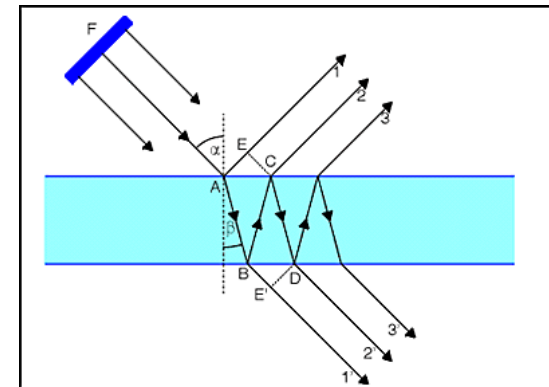
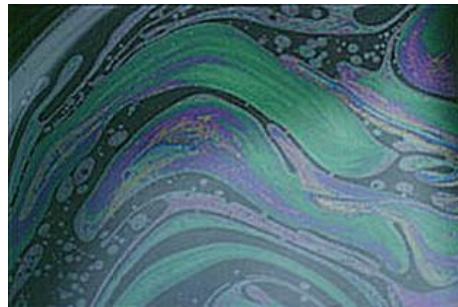


Főmaximum=megvilágítási irány

α



Fényinterferencia olajfolton – egyenlő vastagság megjelenítése

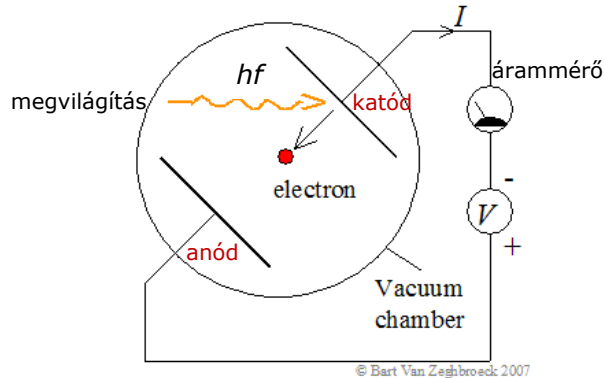


Szemészeti diagnosztika: Optikai Koherencia Tomográfia OCT

A fotoelektrikus hatás - kísérlet

emlékeztető

és Einstein magyarázata a foton-képpel



Kísérleti tapasztalatok:

Wilhelm Hallwachs (1859-1922): UV fény negatív töltéshordozókat váltott ki fémfelületből
Philippe Lenard (1862-1947) : részletes vizsgálatok, tapasztalatok 1902-ben:

- A fény által kiváltott töltéshordozók elektronok, amelyek a megvilágítással egy időben lépnek ki az anód anyagából
- Csak elegendően nagy fény-frekvencia (kis hullámhossz) felett (alatt) van áram
- A fényintenzitás növelésével, azonos frekvenciát tartva, nő az áramerősség
- A kibocsátott elektronok száma/idő (áramerősség) nő a fény-frekvenciával

Magyarázat: Albert Einstein 1905:

A fény energiaátadása, ami elektronokat vált ki a katódból kvantumokban történik egy kvantum \longleftrightarrow egy elektron

foton

Tömege nincs
Impulzusa (p) van

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$E_{\text{foton}} = hf$$

$$hf = W_{\text{el.ion.}} + \frac{1}{2} m_e v_e^2$$



Fény és anyag kölcsönhatása

Fényszórás
Fényvisszaverődés
Fénytörés



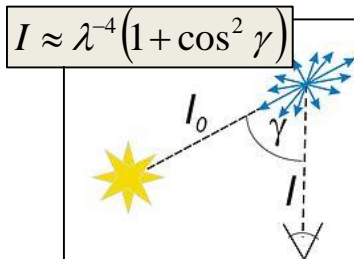
Hullám-kép
Geometriai optika

Energia-átadás: Fényelnyelődés – abszorpció ↔ Foton-kép

emlékeztető

Fényszórás

Rayleigh szórás $d < \lambda$



Fény által indukált
rezgő dipólok
sugárzása

Fényvisszaverődés-fénytörés

Fermat-elv: legkisebb idő elve

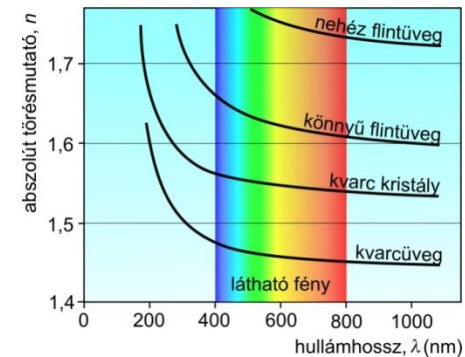
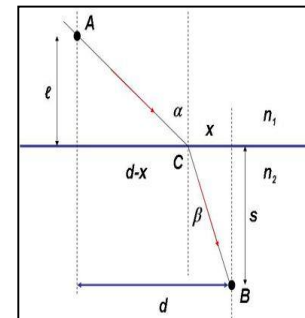


Snelius-Descartes törvény

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{c_1}{c_2}$$



Teljes visszaverődés, határszög

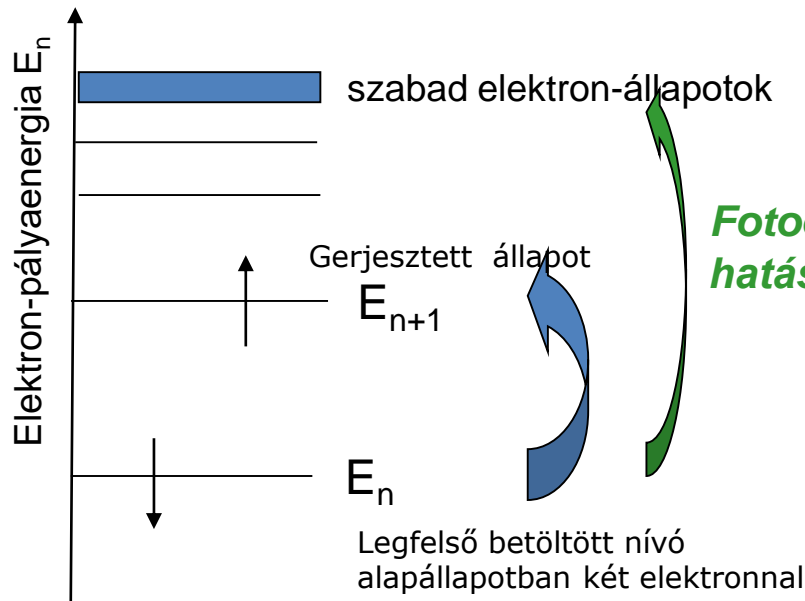


Optikai eszközök

A fényelnyelés modellje

Mire használódtak el a fényfotonok az anyagban?

1. (izolált) atomok, molekulák



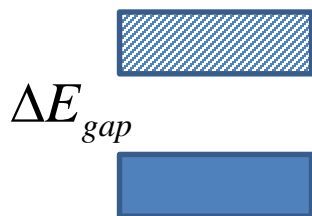
Látható tartományú fény-fotonok elnyelésének vezető mechanizmusa: „Legkülső” pálya elektronjának gerjesztése

Fotoelektromos hatás: ionizáció

Gerjesztés: fény-foton energiája felhasználdik arra, hogy magasabb energiájú kötött állapotba visz át egy alapállapotú elektront

$$\longrightarrow E_{n+k} - E_n = h * f = h * \frac{c}{\lambda}$$

2. Szilárd testek (félvezetők)



$$\text{ha } hf > \Delta E_{gap}$$

\longrightarrow Töltéshordozók keltése - **ionizáció**, elektromos vezetés

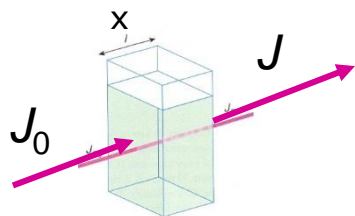
Abszorpciós spektroszkópia-spektrofotometria



Molekulák/ionok **híg oldatai** – izolált molekulák

$$J \left[\frac{\text{energia}}{\text{idő} * \text{felület}} \right] = J \left[\frac{N * (hf)}{\text{idő} * \text{felület}} \right] \quad \text{Fényintenzitás, } N = \text{fotonszám}$$

Fényelnyelés követi az exponenciális abszorpciótörvényt



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

Abszorpciós együttható

$J < J_0$: Fotonok „elvesztek” a sugárzásból!

Moláris koncentráció

Küvetta vastagsága

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

Abszorbancia (A) v.
Optikai denzitás (OD) –
jól mérhető mennyiség -

Moláris extinkció – függ a
-fotonenergiától
-anyagi minőségtől

Lambert-Beer törvény

Molekulák híg színes oldataiban az abszorbancia arányos a koncentrációval →
koncentráció-mérés

spektrofotometria



Milyen hullámhosszú sugárzás esetén várható energia-átadás?

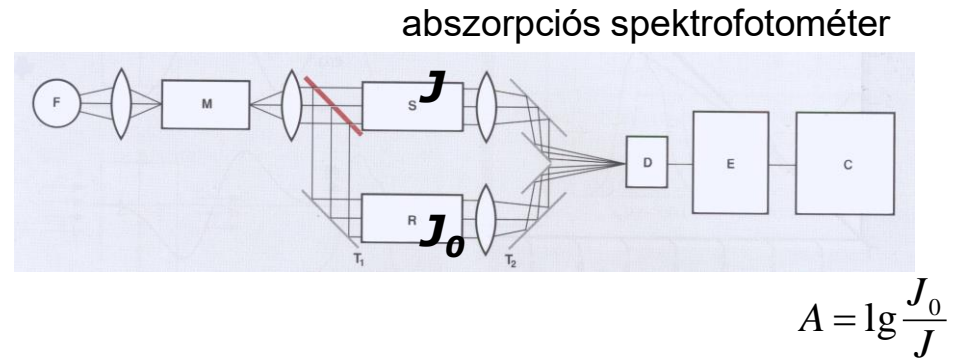
Milyen fény-fotonokat tud „elnyelni” az anyag?

Mérés: **optikai abszorpciós spektrum**

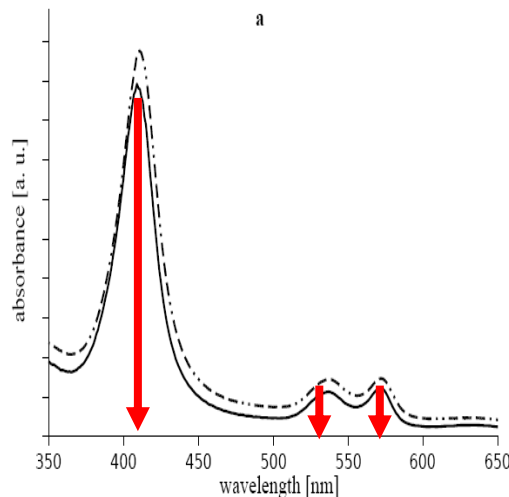
$$A = \lg \frac{J_0}{J}$$

a

λ



Vagy $\lambda = \frac{c}{f} \rightarrow hf$ fotonenergia



Pl. Hemoglobin oldat abszorpciós spektruma

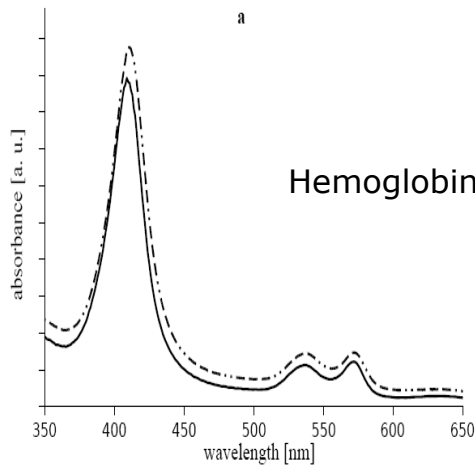
↓
az elnyelt fotonok energiája

↓
kötött elektronok energia-szintjei

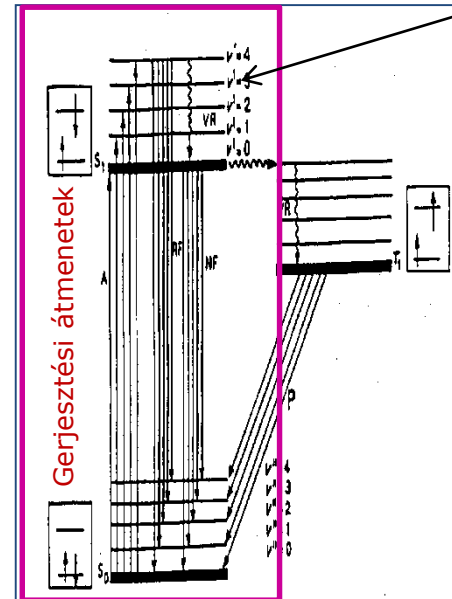
↓
a molekula azonosítása – minőségi jellemzés



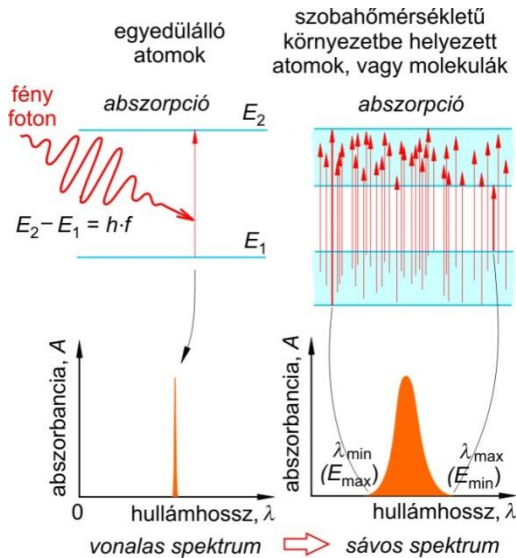
Molekulák oldatainak spektruma nem éles vonalakból, hanem **széles sávokból** áll. Miért? --- **olvasmány**



1. Az elektron-pályák energiáit a **molekulák** diszkrét **vibrációs** állapotai kis mértékben perturbálják



2.



Magyarázat:

1. molekulák elektron-vibrációs átmenetei
2. a környezet sokfélesége -> energiaállapotok variációja
3. $T > 0 \text{ K}$ (Boltzmann eloszlás)

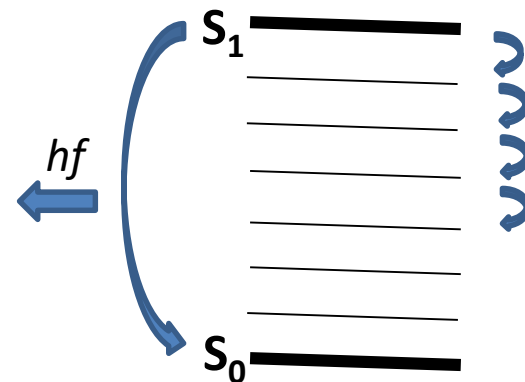
A fény biológiai hatásai - alkalmazások

A kölcsönhatás vezető mechanizmusa az **elektron-gerjesztés**.
nem ionizáló sugárzás

Az alkalmazások a gerjesztett állapot **következményein** alapulnak

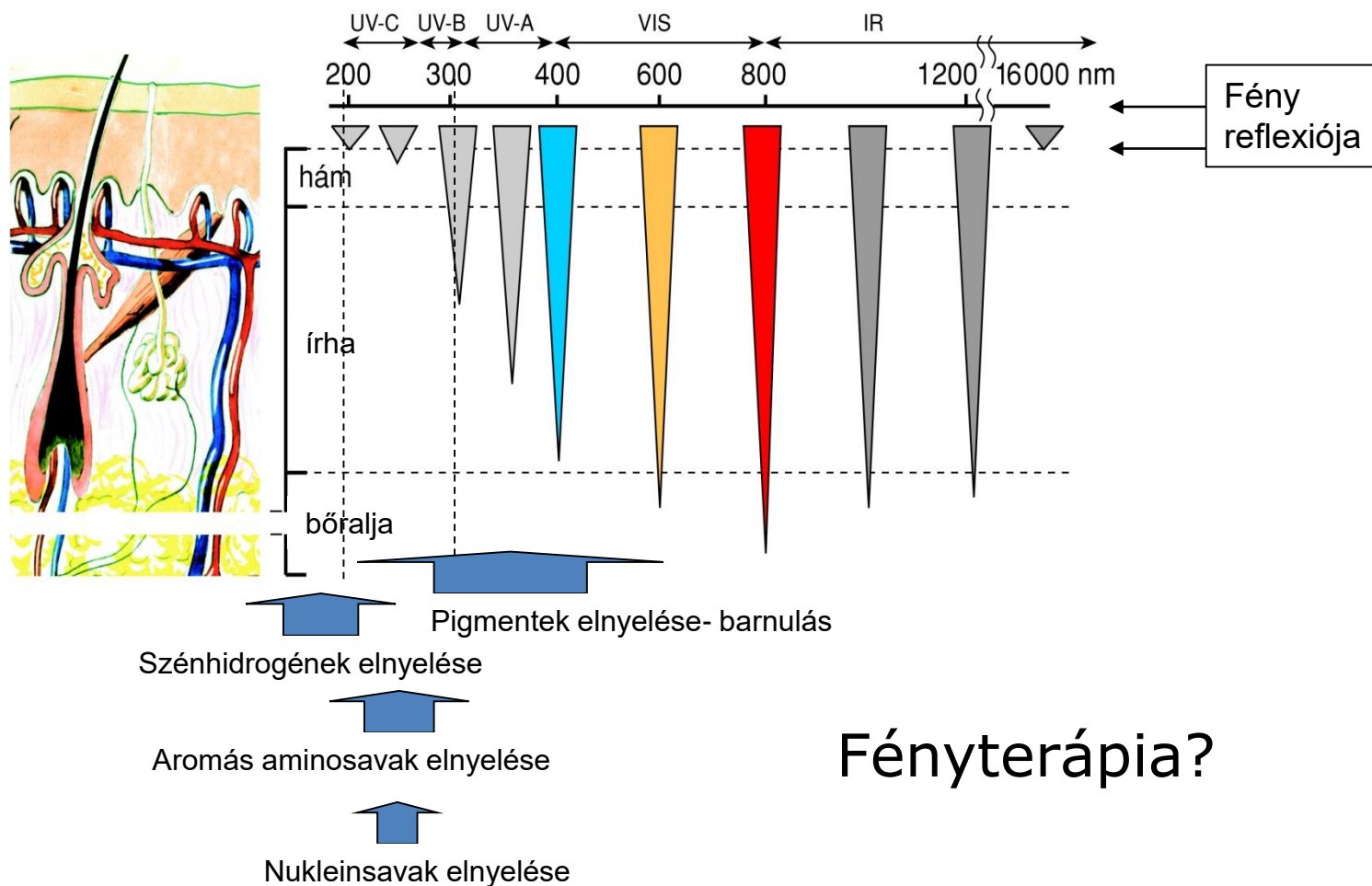
A gerjesztéskor felvett fotonenergia leadási mechanizmusai

1. a gerjesztett elektron egy lépésben visszatér alapállapotba
→ **spontán fényemisszió: lumineszcencia**
2. fokozatos energiavesztés vibrációk gerjesztésével
→ **hőkeltés – lézersebészet**
3. Gerjesztett állapotban a környezettel kölcsönhatás
→ **kémiai reakciók, szabad gyökök keltése**
 - → **környező szövetek degradációja**
 - pl. bőrgyógyászati alkalmazások.
 - Psoriasis kezelése specifikusan kötődő molekulák gerjesztésével
 - „fotodinamikus terápia”



Behatolási mélység?

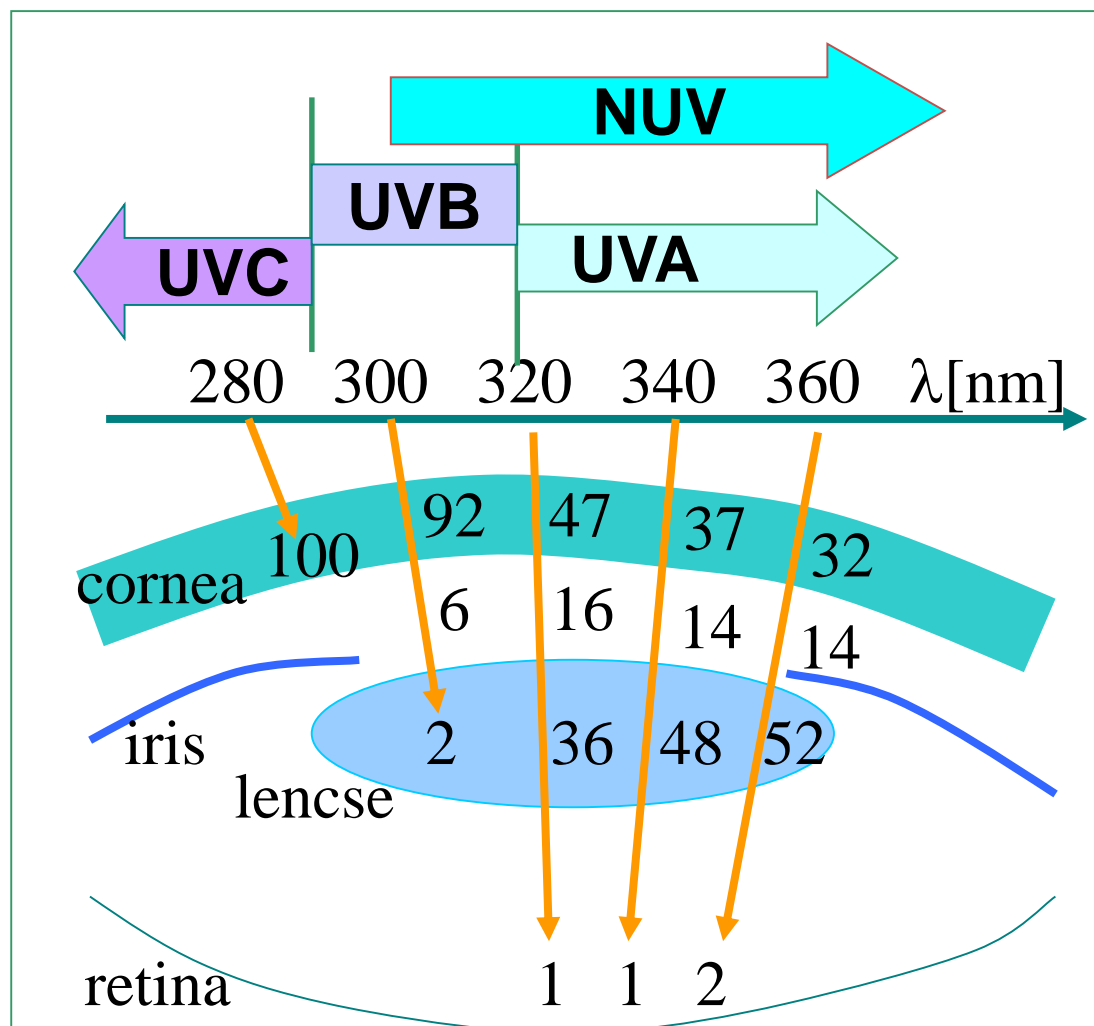
Bőr



Fényterápia?

Behatolási mélység?

Szem: fontos szempont az UV sugárzás káros hatásának elkerülése

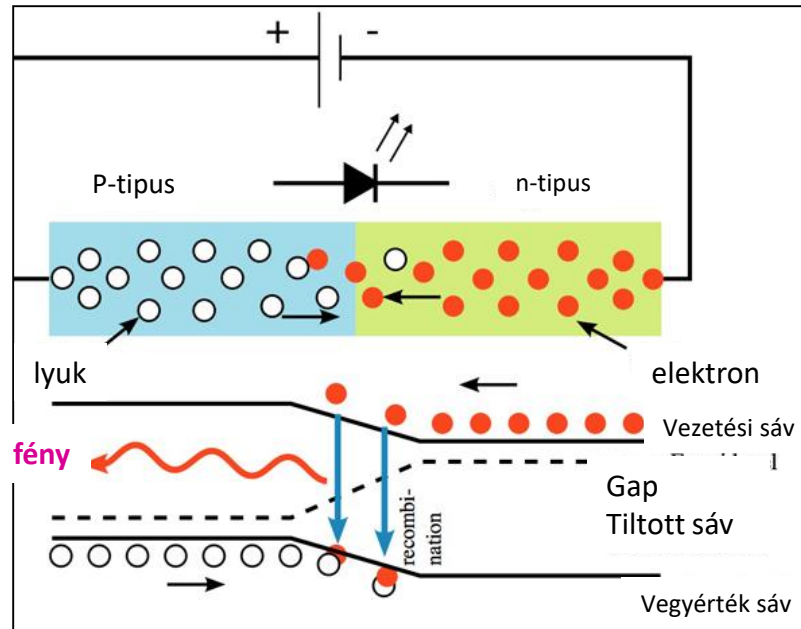


1. A közeli UV-A tartományú fény a szemlencsében nyelődik el \rightarrow cataracta
2. A távoli UV-C tartomány a szemfelszínen hat \rightarrow látáskorrekciós műtétek a szaruhártyán

Fény-keltő mechanizmusok és fényforrások

- Hőmérsékleti sugárzás – I. korábbi előadás
- Spontán fotonemisszió gerjesztett elektronállapotból:
Lumineszcencia
- Fény-emisszió indukált emisszió révén: **LASER**
- (LED : elektronok és lyukak elektromos tér által indukált rekombinációja félvezető diódákban.)

1. Jelenlegi legmodernebb (köznapi) fényforrás: LED

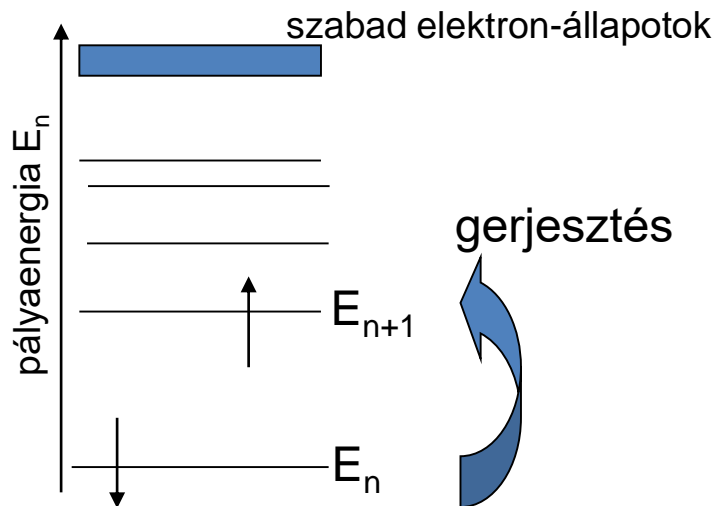


*Elektromos vezetés hatására a p-n határrétegben többségbe került elektronok és lyukak rekombinációja →
→ elektronok energia vesztese fényemisszióval*

2. Lumineszcencia

Spontán fényemisszió „gerjesztett” elektronállapotból
Kevéssé valószínű folyamat, az elektronok általában hőleadással kerülnek vissza alapállapotba

A lumineszcenciát **elektron-gerjesztésnek** kell megelőznie



Alapállapot: legmagasabb energiájú
nívón (n) két ellentétes spinű elektron
(pl. aromás szénhidrogének)

Sokféle módon lehetséges

-(fény) foton elnyelése: **fotolumineszcencia**

-kémiai reakció energiája: **kemo/bio-lumineszcencia**

-ütközés elektromos térrel gyorsított töltésekkel:
elektrolumineszcencia

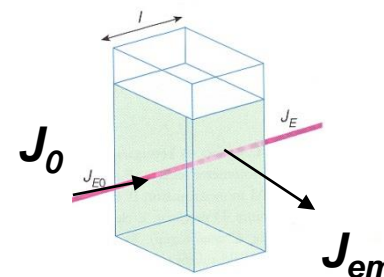
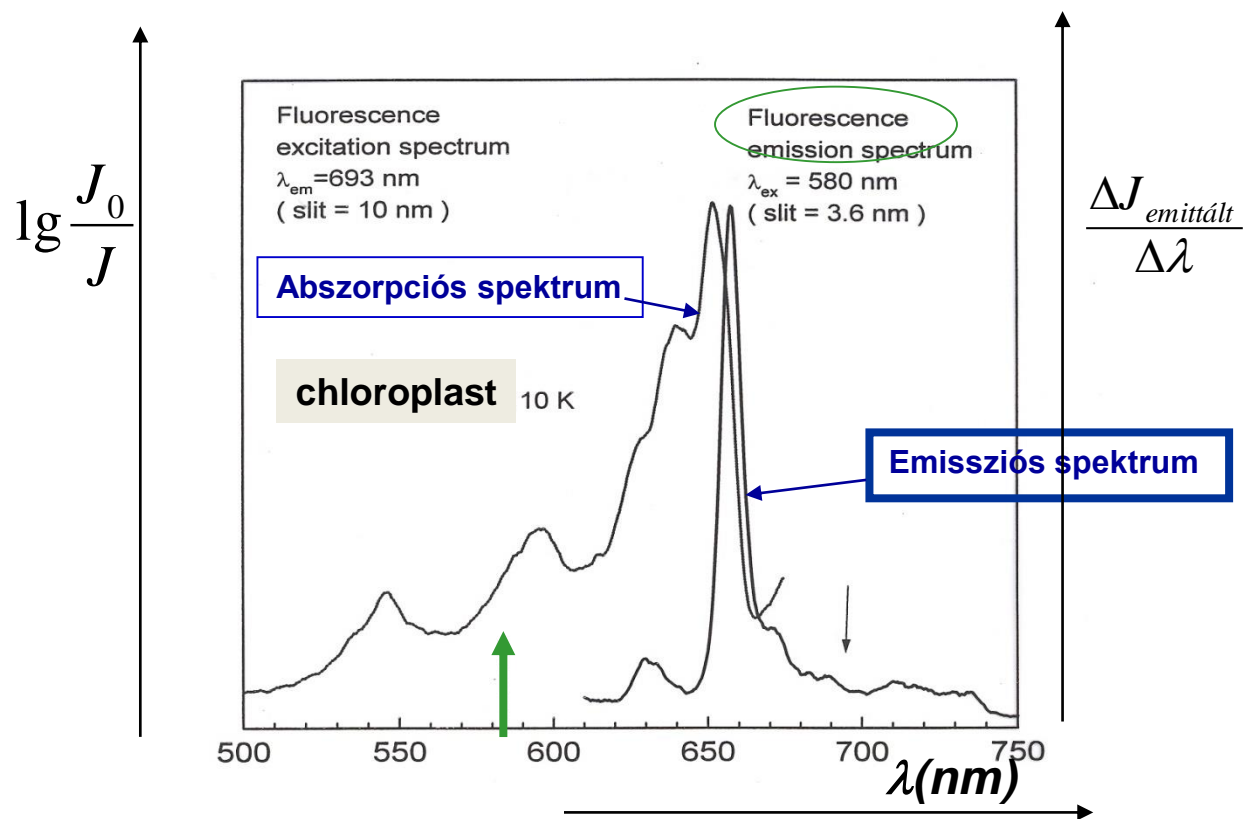
-mechanikai deformáció: **tribolumineszcencia**

-hőközlés: **termolumineszcencia**

Fotolumineszcencia

Emissziós és abszorpciós spektrum: ugyanazon mintán

Maximumok normálva



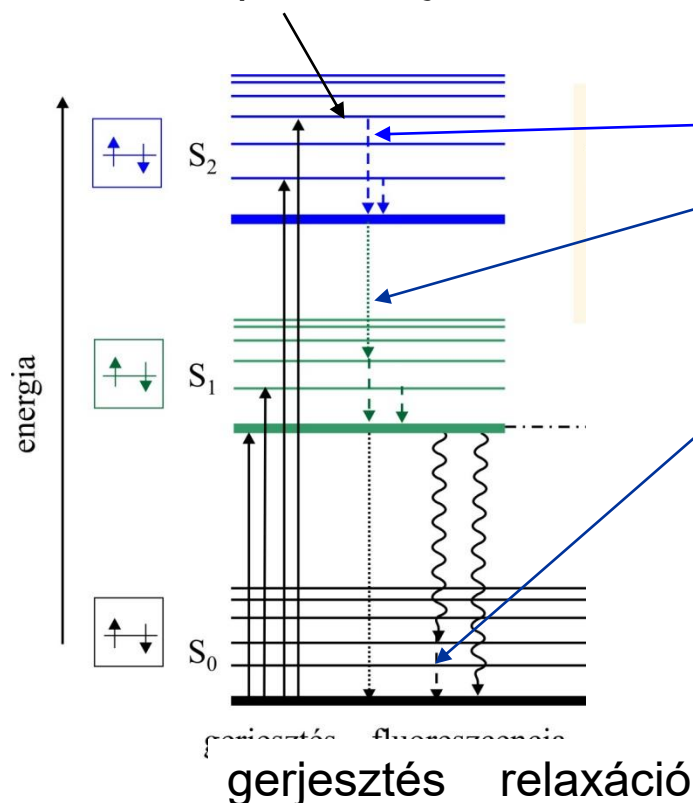
Molekula – kölcsönhatásban a környezettel
„sávós” spektrumok, emisszió hosszabb λ -nál



Fotolumineszcencia

**Molekula – kölcsönhatásban a környezettel
emisszió csak a legalsó gerjesztett állapotból - okok?**

Az elektron-pályák energiáit a **molekulák** diszkrét **vibrációs** állapotai kis mértékben perturbálják



Kasha-szabály

A felsőbb gerjesztett állapotokból
nincs átmenet az alapállapotba
fotonemisszióval – vibrációs
relaxáció (energialeadás hő
formájában) az elektronállapotokon
belül az S_1 állapotba

Emisszió csak az S_1 nívóról

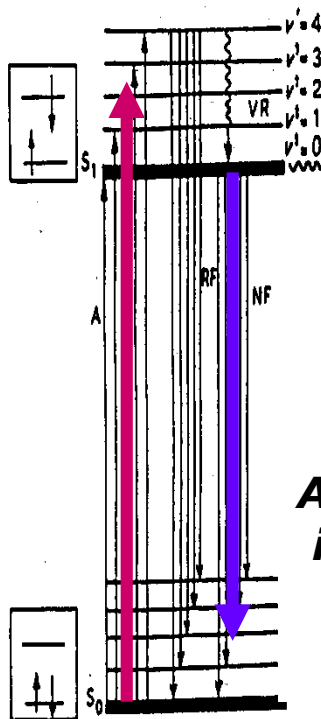
Aromás szénhidrogének



Fotolumineszcencia

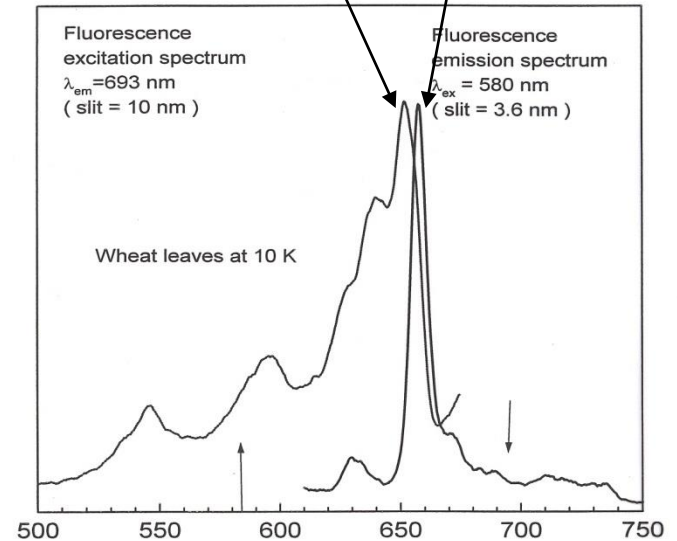
A mért abszorpciós és emissziós sávok energiája eltér egymástól

Stokes-féle eltolódás



Gerjesztés után
relaxáció a vibrációs
szinteken

**Az abszorpció és az emisszió
is a legalsó vibrációs szintről történik**



$$\overline{hf}_{abs} > \overline{hf}_{fluo}$$

$$\lambda_{abs} < \lambda_{fluo}$$

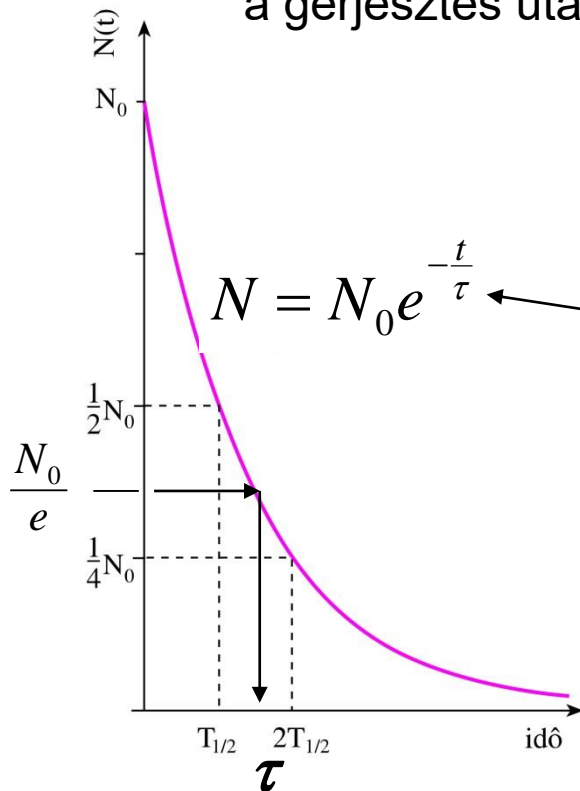
Maximum-helyek

Lumineszcencia- a gerjesztett állapot élettartama



**Energiaminimumra való törekvés
→ a gerjesztett állapot
spontán lebomlása**

N_0 a gerjesztett molekulák száma a megfigyelés kezdetén, $t=0$. N csökken a gerjesztés után az idő függvényében.



Exponenciális lebomlás impulzus-gerjesztés után.

τ a gerjesztett állapot élettartama

Megengedett átmenet : τ rövid $\tau \sim 1 - 10$ ns

Tiltott átmenet : τ hosszú $\sim \mu\text{s} - \text{s}$

metastabil nívó

Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia

Fluoreszcencia:

- Megengedett elektron-átmenetből ($S_1 \rightarrow S_0$) származó spontán fényemisszió
- Élettartama rövid, $\tau \sim 1-10 \text{ ns}$ \leftrightarrow gerjesztési idő $\sim 10^{-3} \text{ ns}$
- Karakterisztikus fotonenergia(tartomány) –szín jellemzi, $\lambda_{\text{gerj.}} < \lambda_{\text{fluo.}}$
- Többféle gerjesztési átmenettel is gerjeszthető



Spontán fényemisszió: Lumineszcencia

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia

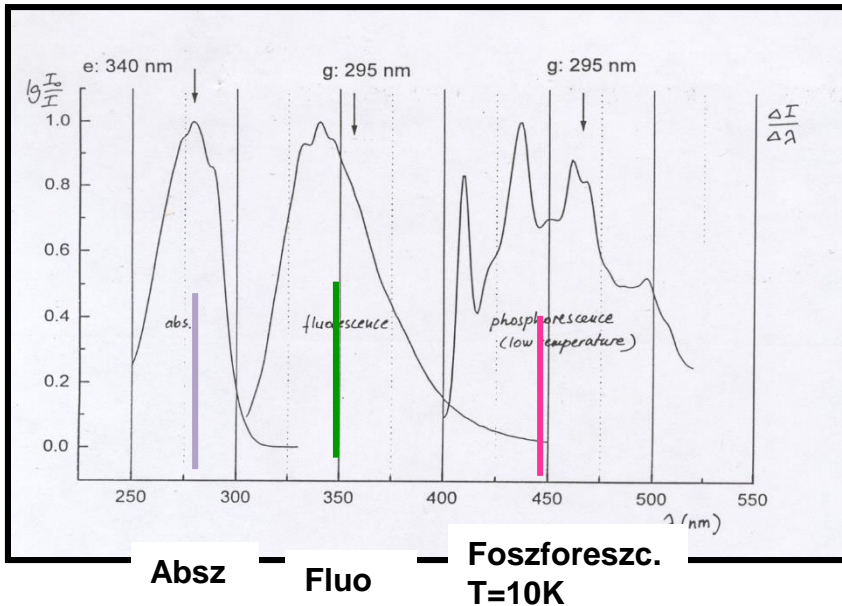
Foszforeszcencia:

- Spontán fényemisszió *metastabil állapotból*
- Az emittáló nívó élettartama hosszú $\tau \sim \mu s, ms, sec \dots$
metastabil állapot
- Az emittált fény fotonenergiája kisebb mint a fluoreszcenciáé
- Hosszú élettartam -> lehetőség a környezeti energialeadásra
emissziós intenzitás igen kicsi -> orvosi alkalmazása csekély

Fluoreszcencia és Foszforeszcencia spektrumok összehasonlítása

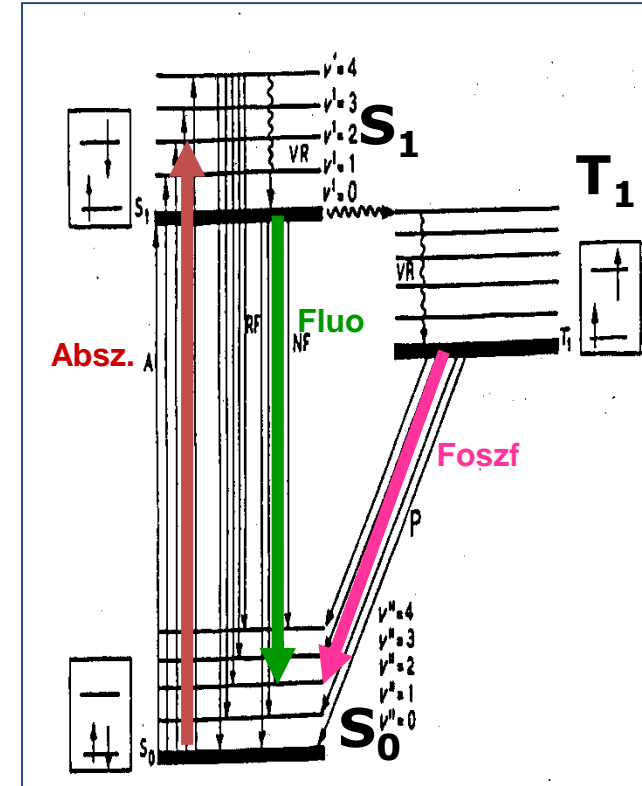


természetesen lumineszkáló aminosav
Triptofán - egy fehérjében



Stokes-féle eltolódás

Jablonszki diagram



$$\lambda_{\text{foszf}} > \lambda_{\text{fluo}} > \lambda_{\text{absz}}$$

Foszforeszcencia tiltott átmenetből: $T_1 \rightarrow S_0$

Gerjesztés: $S_0 \rightarrow S_1$, majd $S_1 \rightarrow T_1$ spinátfordulás, energiavesztés (belső konverzió)

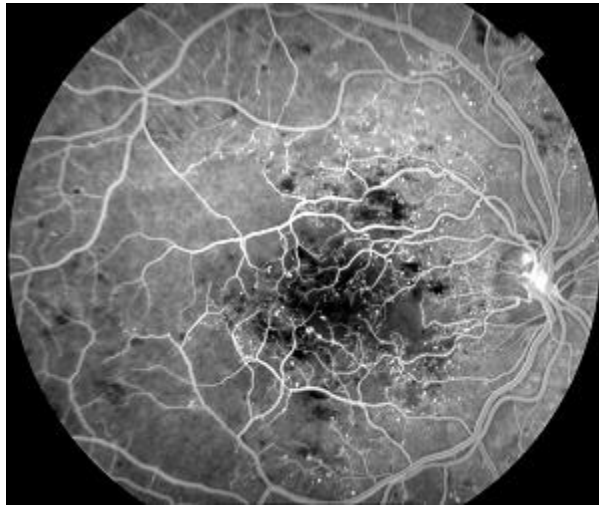
Kis intenzitás, gyakorlati jelentősége kicsi

Fluoreszcencia – miért érdekes az orvosi gyakorlatban?

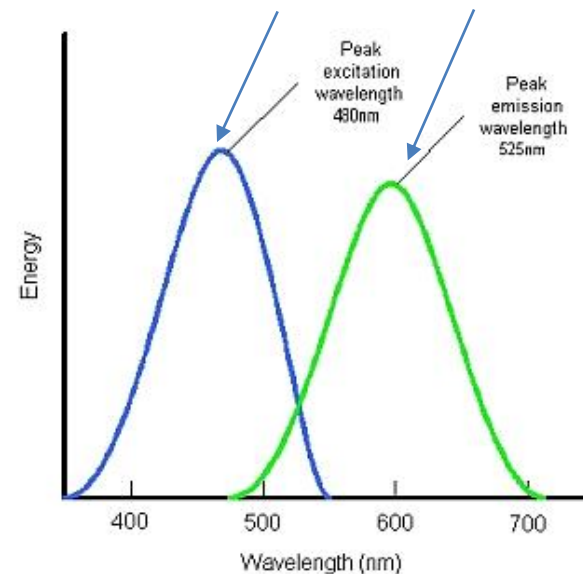
Fluoreszcens jelzés lehetősége

- Alapja: a szövetekben igen kevés fluoreszkáló molekula van → szelektíven kötődő fluoreszcens festés után a kötődés helyét fluoreszcencia alapján leképezhetjük
- A festék gerjesztéséhez megfelelő fotonenergiájú (hullámhosszú) fényforrás szükséges

Angiográfia fluoreszcens festéssel



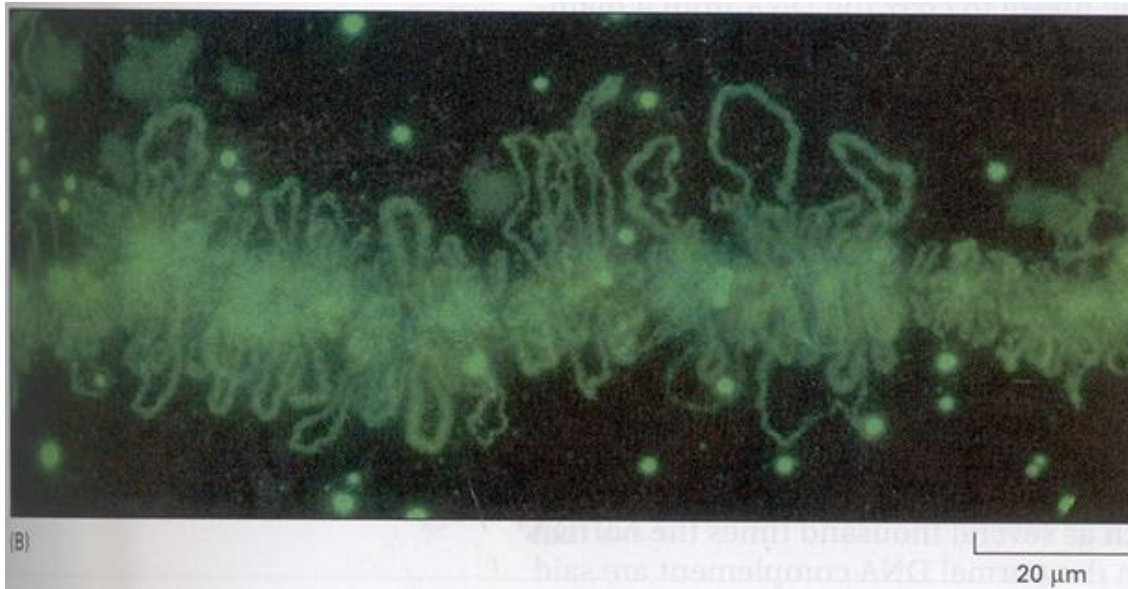
Fluoreszcein abszorpciós és emissziós spektruma



Vérerek jelölése a retinán fluoreszcein-festékkel, vizsgálat reflexióban.
A megvilágító fény filterrel kiszűrhető a Stokes shift alapján

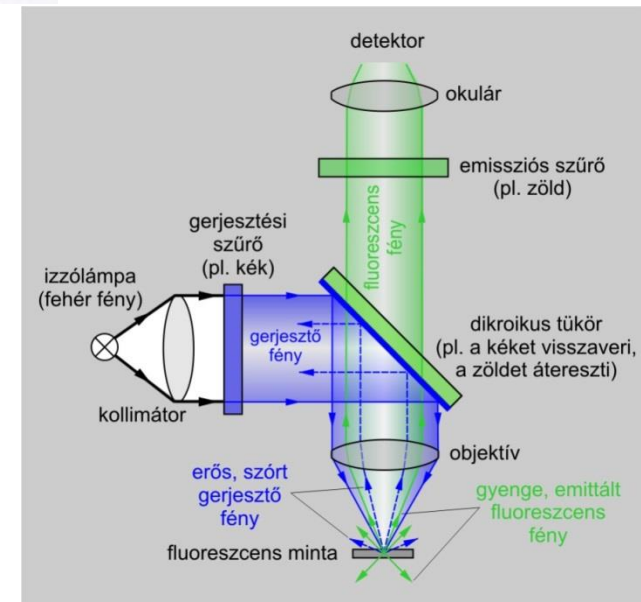
Fluoreszcencia-mikroszkópia → élettudományi kutatások

I. Kellermayer prof. előadása



A gén-expresszió egy állapota: az RNS-re kötődő fehérjék zöld fluoreszcenciája alapján az RNS kirajzolódik.

Konfokális Mikroszkóp: mélységbeli felbontás



3.Lézerek **fényerősítés *indukált emisszióval***

Spontán emissziós fény (lumineszcencia):

Az egyes elektronátmenetek térben és időben rendezetlenül, véletlenszerűen történnek.

Az egyes hullámvonulatok fázisa egymástól független.
A fény „inkoherens”

Indukált emissziós fény:

A fényfotonok emisszióját ***az emittálandó fotonenergiával azonos energiájú foton jelenléte indukálja.***

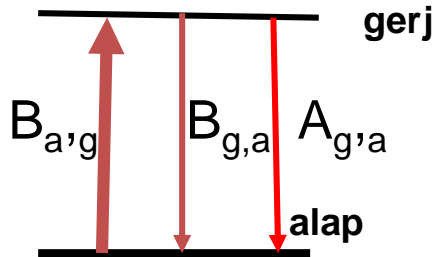
A kibocsátott hullámvonulat a kiváltóval azonos fázisban lép ki, együtt koherensek

A lézerek működési elve – indukált fényemisszió

olvasmány

Átmeneti valószínűségek

Einstein együtthatók: B_{ag} abszorpció
 B_{ga} indukált emisszió
 A_{ga} spontán emisszió

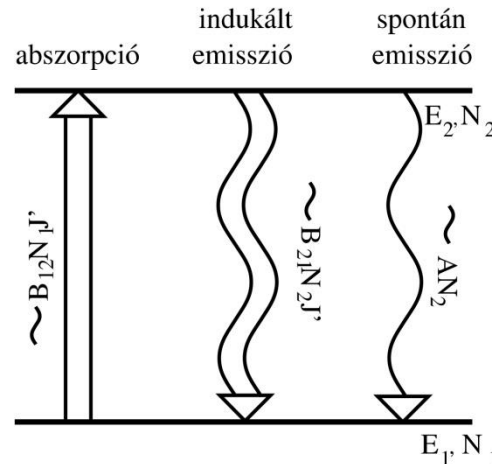
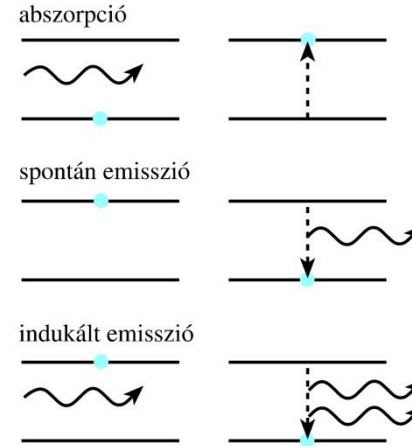


Feltétel: $hf = \Delta E_{ga}$

fotonsugárzás jelenléte

$$B_{1,2}N_1J' = B_{2,1}N_2J' + AN_2$$

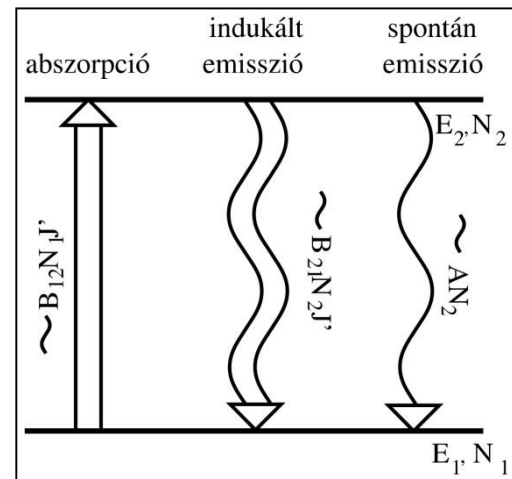
$$B_{1,2} = B_{2,1}$$



Termikus egyensúly:
 abszorpciók száma =
 spontán és indukált
 emissziók száma/idő



Fényerősítés indukált emisszióban --- populáció inverzió



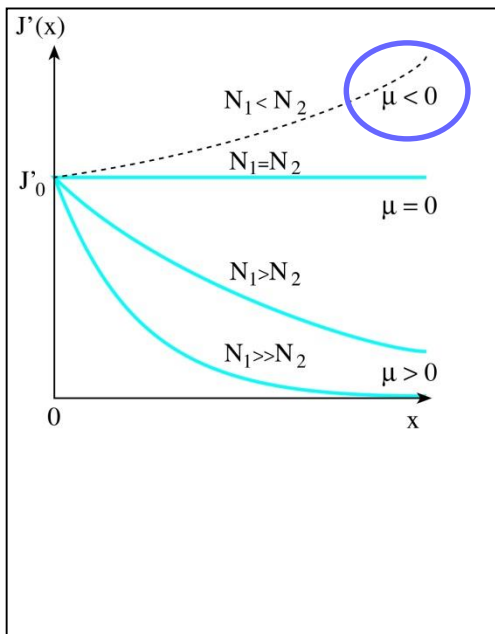
$$\Delta J' = K_1(hf)[B_{21}N_2 - B_{12}N_1]J' \Delta t$$

$$\Delta J' = K_1(hf)B[N_2 - N_1]J' \Delta t$$

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{c}$$

$$\Delta J' = K[N_2 - N_1]J' \Delta x$$

$$J' = J'_0 e^{-\mu x} \quad \mu = K(N_1 - N_2)$$



**Populáció-inverzió →
fényerősítés**

**2 állapotú rendszerben
nem alakul ki**

LASER: Light Amplification by the Stimulated Emission of Radiation

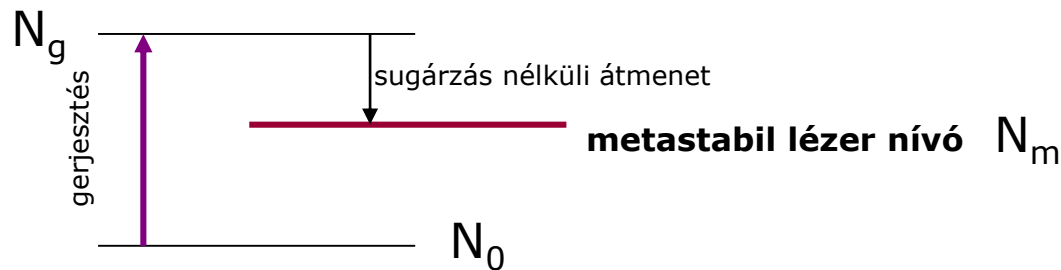
1961, Rubin-lézer

HOGYAN VALÓSÍTHATÓ MEG? Feltételek

A lézer anyaga

Gáz, folyadék, szilárd test

Követelmény: a gerjesztési és emissziós elektron-átmenetek **három energiaállapoton belül** történjenek, amelyek közül az egyik magasabb nivónak legyen hosszú az élettartama – **lézer-nívó**



A lézerek működési feltételei

A lézer anyag gerjesztése

Az elektronok gerjesztése külső forrásból:
Pl. gázkisülés, fényimpulzus

Intenzív gerjesztés \longrightarrow a felső nivå populálása \longrightarrow
átmenet a metastabil nivóra $\longrightarrow N_m$ a hosszú élettartam
miatt megnő, az alsó nivå kiürül:

$$N_m \gg N_0$$

populáció inverzió: a fényerősítés feltétele

A lézerek működési feltételei

Fényerősítés indukált emisszióval

Populáció inverzió mellett a rendszer

a **$hf = E_m - E_0$** fotonenergiájú sugárzást

erősíti, ilyen foton ***indukálja*** az emissziót

N_m nagy \longrightarrow **néhány spontán emisszió E_0 -ra**

\longrightarrow **fényerősítés**

A lézerek működési feltételei

Az optikai rezonátor

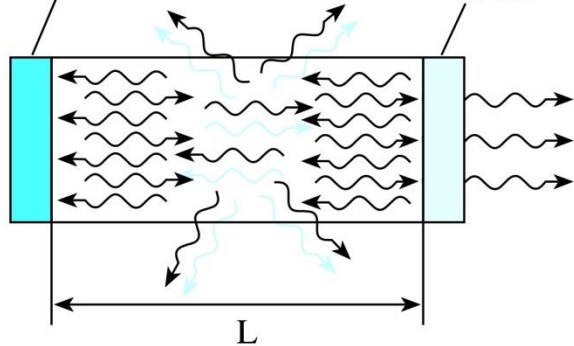
Erősíti a lézer tengelyével egyirányú sugárzást
Leszűkíti az emisszió hullámhossztartományát

99.9%

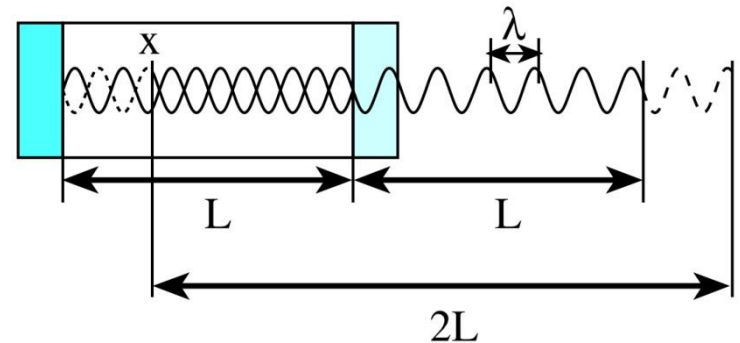
„tökéletes”
tükör

részen
áteresztő
tükör

99%



$$L = m \frac{\lambda}{2}$$



állóhullámok kialakulása

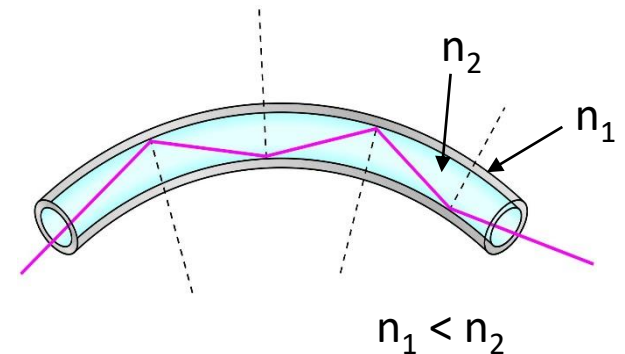
A lézer-fény speciális tulajdonságai

- monokromatikus $\Delta f/f \sim 10^{-10}$ (\leftrightarrow 10^{-6})
- koherens : nagy a koherencia-hossz (10^3 m \leftrightarrow 10^{-3} m)
- kis divergencia (néhány szögperc) \rightarrow jól fókuszálható és száloptikán kis intenzitásvesztéssel vezethető
- nagy intenzitás
átlagos intenzitás \leftrightarrow impulzus-intenzitás

Orvosi alkalmazások

- \rightarrow mikrosebészet
- \rightarrow fény-kés
- \rightarrow megvilágítás, fluoreszcencia gerjesztés száloptikán keresztül

Száloptika: fényvezetés többszörös teljes visszaverődéssel \rightarrow
fényvezetés belső üregekbe

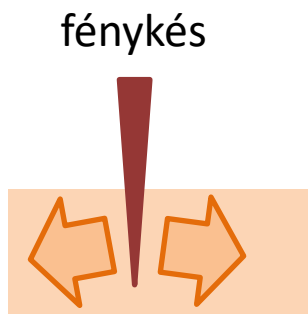


Lézerek sebészeti alkalmazása: „fénykés”

elnyelés → energia → felmelegedés → vaporizáció, karbonizáció, atomizáció → „vágás”

IR lézerek: szöveti víztartalom elnyelése → általános sebészet: CO₂, YAG lézerek

UV-C-lézerek: felületi szerves molekulákban kötések felszakítása-atomizáció –precíz „vágási élek” - látáskorrekció



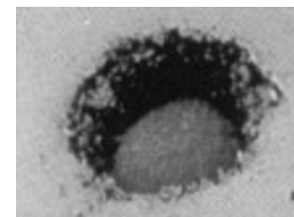
Környező szövetekben is felmelegedés → koaguláció → vérerek elzárása → sterilitás, vérzésmentesség



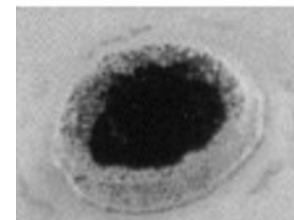
LASEK

Laser Epithelial Keratomileusis

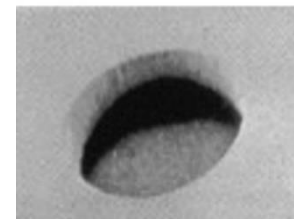
vaporizáció



karbonizáció



Atomizáció
távoli UV
fényvel



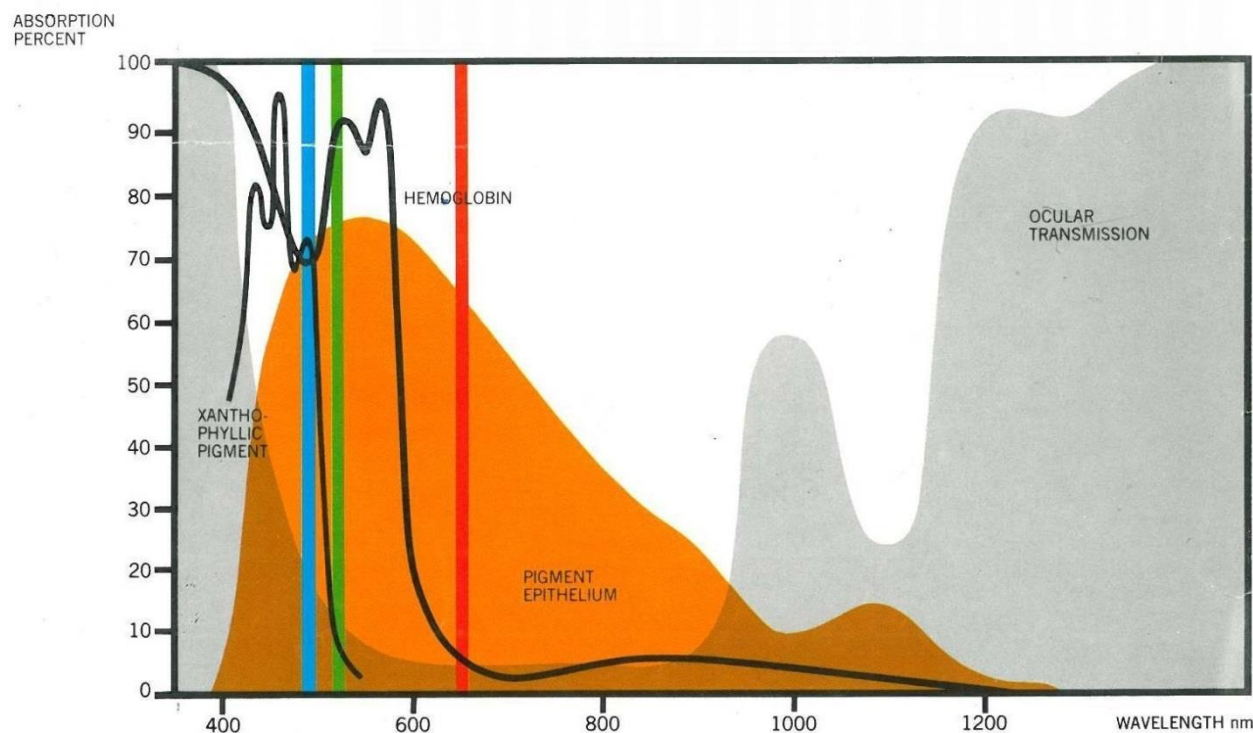
~40 C lézertermia
60 – 90 C koaguláció
100 – 150 C vaporizáció
300 C karbonizáció

Lézerek sebészeti alkalmazása pl. szemészet szem-alkotó szövetek specifikus elnyelése

Ar lézer: 488 nm, 514 nm

Kr-lézer: 548 nm, 647 nm

Spectral characteristics of the eye



Vérerek elzárása a szemfenéken fotokoagulációval
(alacsonyabb T → fehérjék denaturációja → asszociátumok)

Köszönöm a figyelmet!

