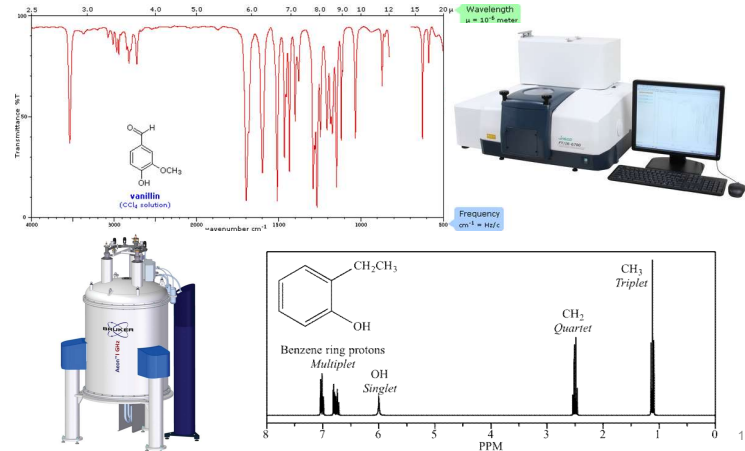


## Biofizika II.

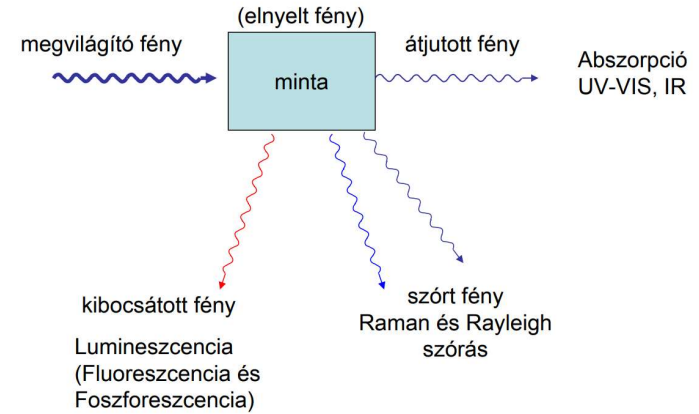
### Optikai és rádióspektroszkópai módszerek

Orosz Ádám



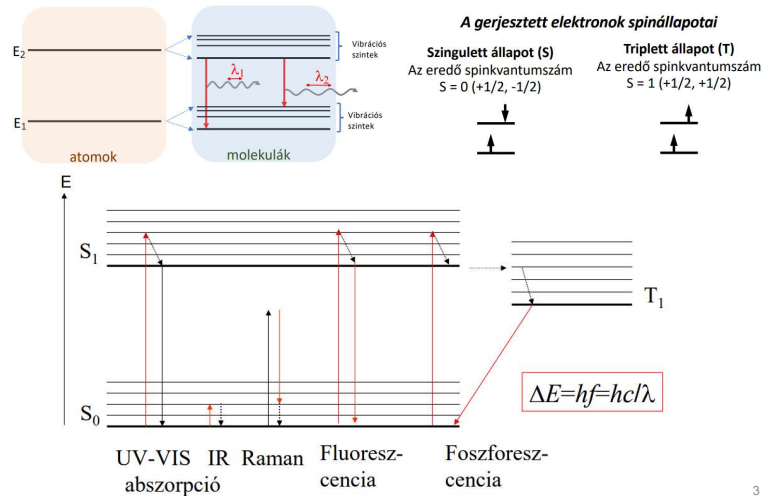
## Besugárzás elektromágneses sugárással

Milyen jeleket mérhetünk?



## Fényelnyelés és kibocsátás

Jablonski-diagram

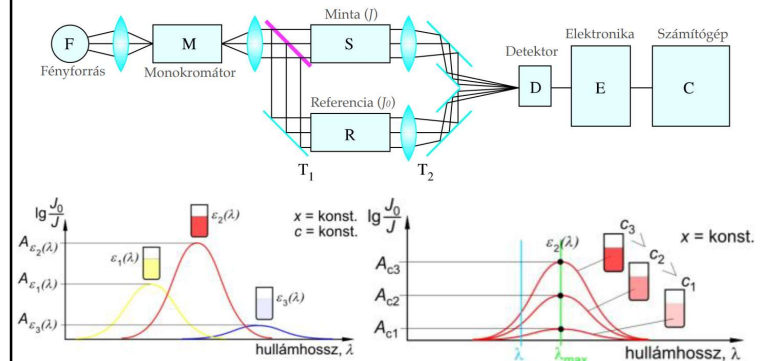


## Abszorpciós spektroszkópia

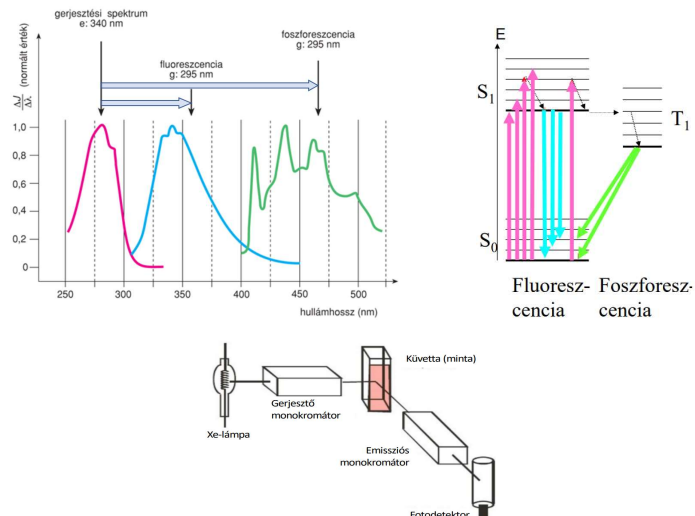
Minőségi és mennyiségi információ

$$A = \lg \frac{J_0}{J} = \varepsilon(\lambda)cx$$

$$A(\lambda)$$



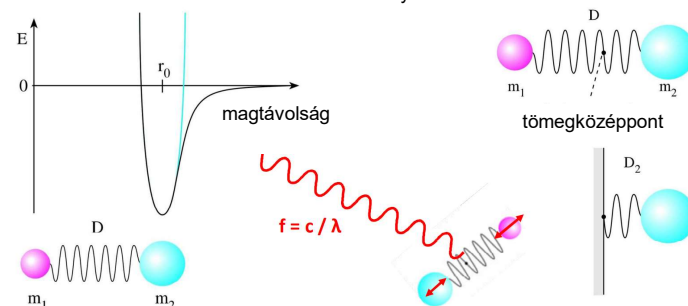
## Emissziós spektroszkópia



5

## Infravörös spektroszkópia

- Infravörös fény (IR):  $\lambda = 800 \text{ nm} - 1000 \text{ }\mu\text{m}$
- Abszorpciós spektroszkópia
- Az elnyelt infravörös sugárzás molekularezgéseket kelt
- Molekulaszerkezetre vonatkozó információ nyerhető

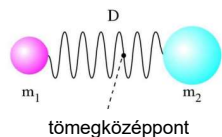


6

## Hullámhossz és hullámszám

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D}{m_{\text{red}}}} \quad \lambda = \frac{c}{f} = 2\pi c \sqrt{\frac{m_{\text{red}}}{D}} \quad \nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{D}{m_{\text{red}}}}$$

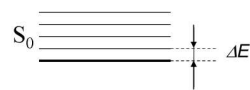
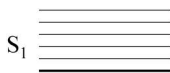
### Klasszikus fizikai modell



$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D}{m_{\text{red}}}}$$

rezonancia  $f$  frekvenciájú sugárzással

### Kvantumfizikai modell



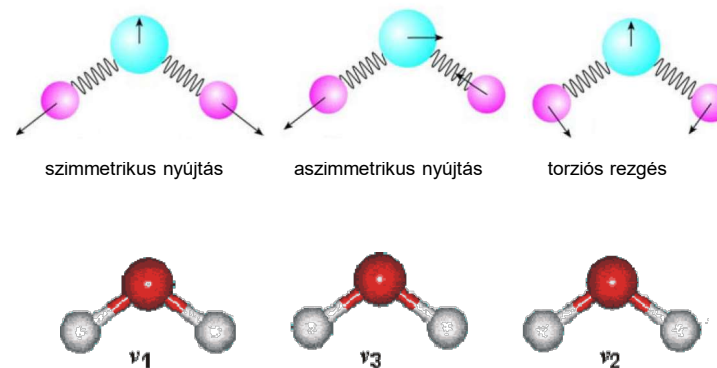
$$\Delta E = hf$$

azonosak!

7

## Normálrezgések

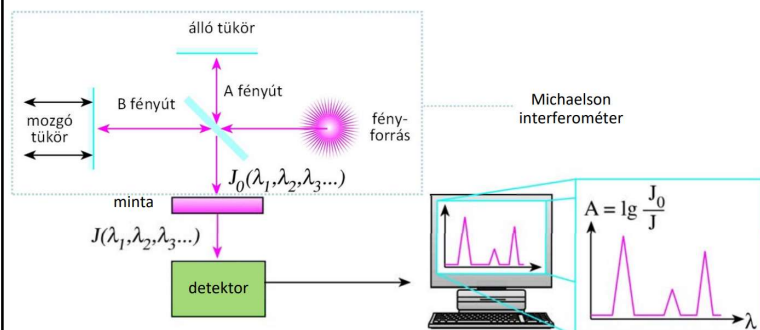
- Az egymástól független rezgések
- Minden atom **ugyanazzal a frekvenciával**, de **különböző amplitúdóval és irányban** rezeg.
- Példa: a víz három normálrezgése



8

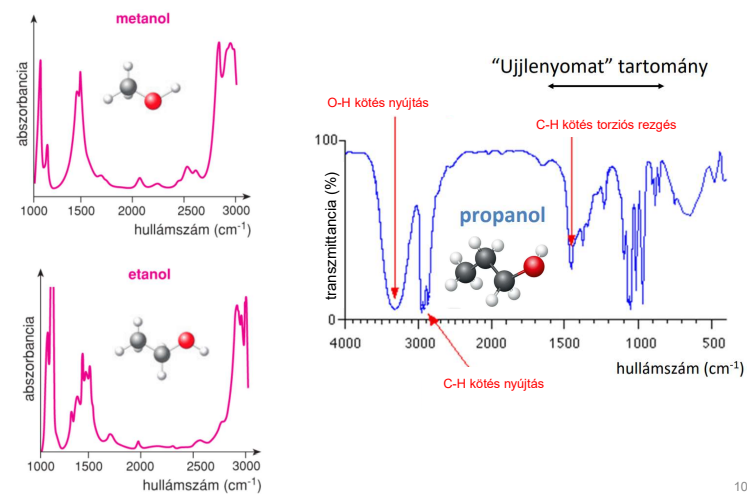
## Az IR-spektrum mérése

Fourier transzformációs infravörös (FTIR) spektroszkópia



9

## Molekulák azonosítása, szerkezetmeghatározás



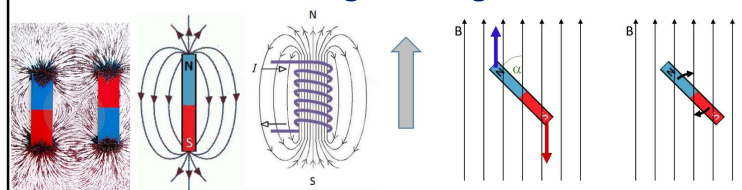
10

## Mágneses magrezonancia NMR spektroszkópia

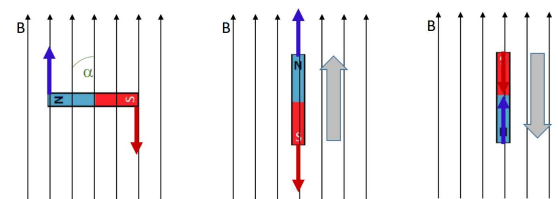


11

## Mágnesesség



Mágneses dipólus homogén mágneses térben



Potenciális energia:

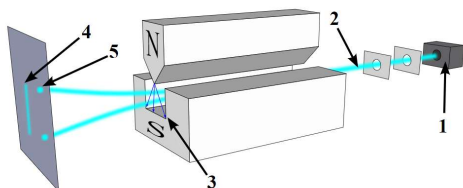
$-\mu B$

$+\mu B$

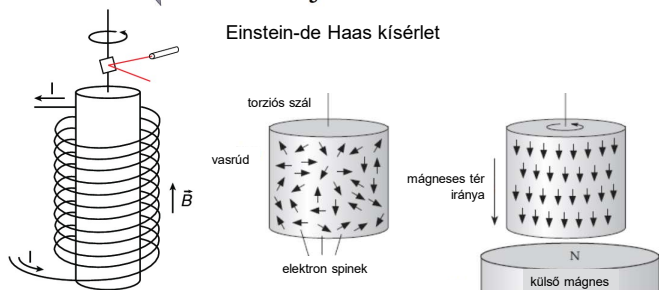
12

## Mágneses momentum és spin

Stern-Gerlach kísérlet



Einstein-de Haas kísérlet

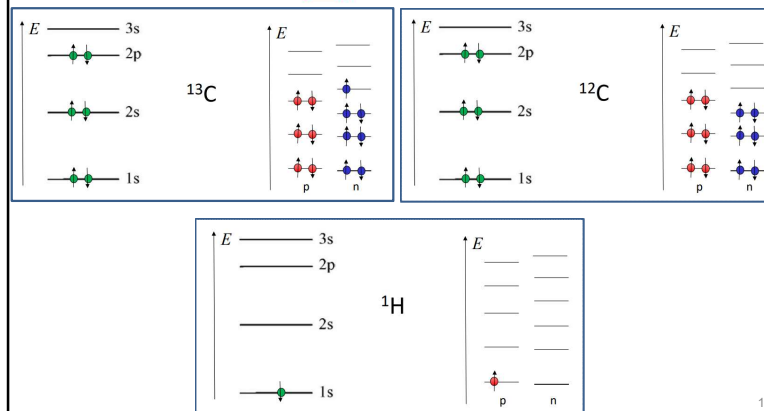


13

## NMR jelet adó magok

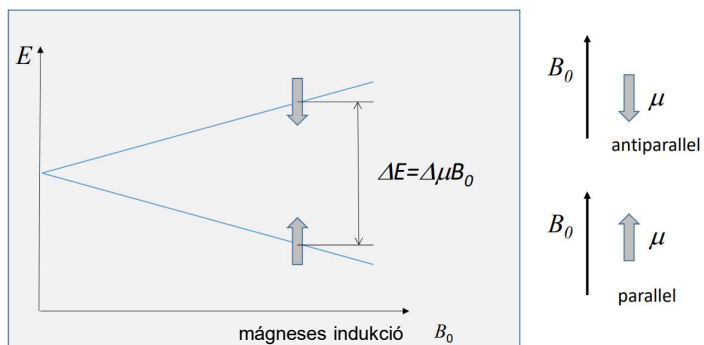
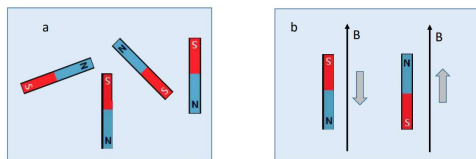
Páratlan számú protonot vagy neutron tartalmazó magok

$^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{N}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{17}\text{O}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{23}\text{Na}$ ,  $^{31}\text{P}$ ...



14

## Zeeman-effektus



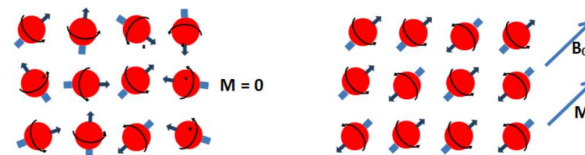
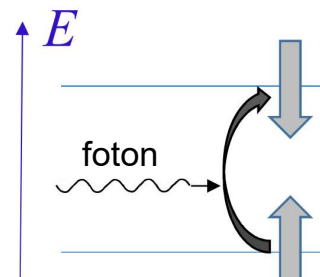
15

## Rezonancia

$$\Delta E = \Delta \mu B_0 = \gamma \hbar B_0$$

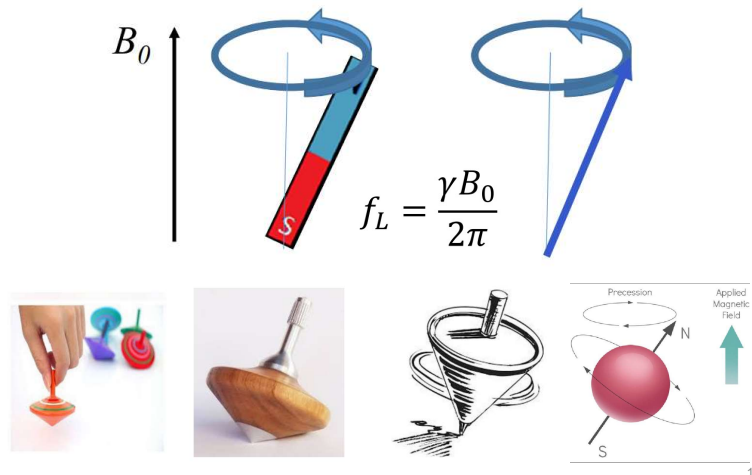
$$E_{\text{foton}} = hf = \Delta E$$

$$f = \frac{\gamma B_0}{2\pi}$$



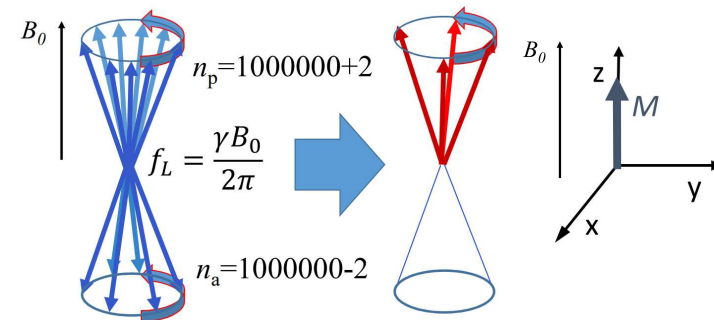
16

## Spin (és mágneses momentuma) külső mágneses térben - precesszió



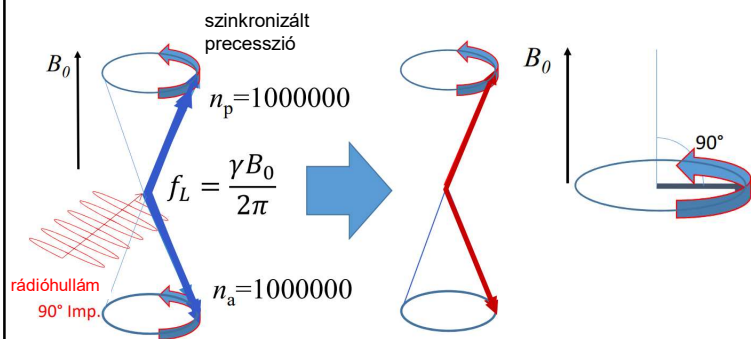
## Az NMR spektrum mérése

Folytonos hangolású (CW) és impulzus alapú Fourier transzformációs (FT) eljárás



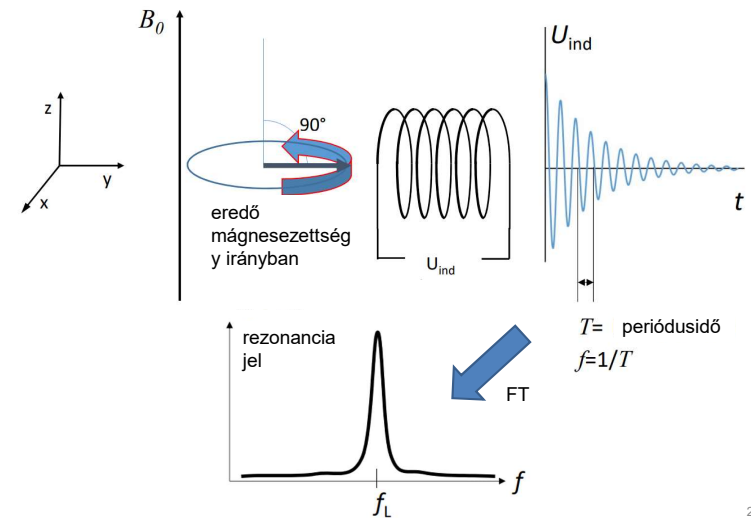
18

## Impulzus alapú módszer Gerjesztés rádiófrekvenciás impulzussal



19

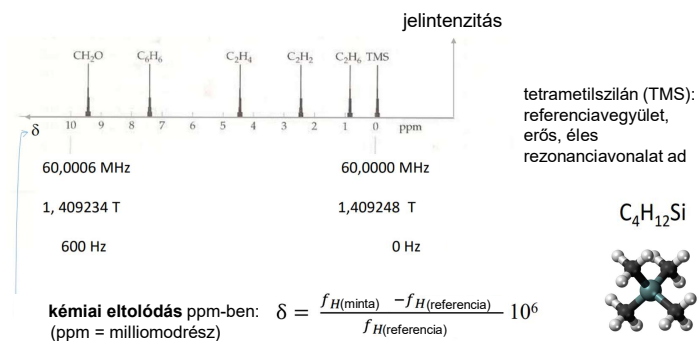
## Szabad indukciós lecsengés - Free induction decay (FID)



20

## Kémiai eltolódás

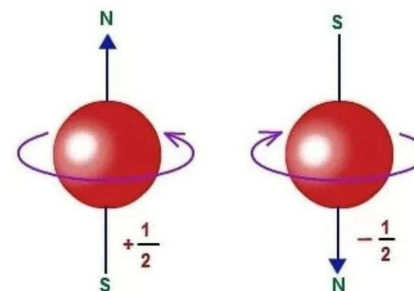
- A kémiai eltolódás a magokat körülvevő **elektronoktól függ**
- Árnyékoló** hatás – **lokális változás** a mágneses tér erősségében – a magra jellemző **rezonanciafrekvencia eltolódik**
- Információ a **molekuláris szerkezetről**



21

## Spin-mém

Electron spin explained: imagine a ball that's rotating, except it's not a ball and it's not rotating



22