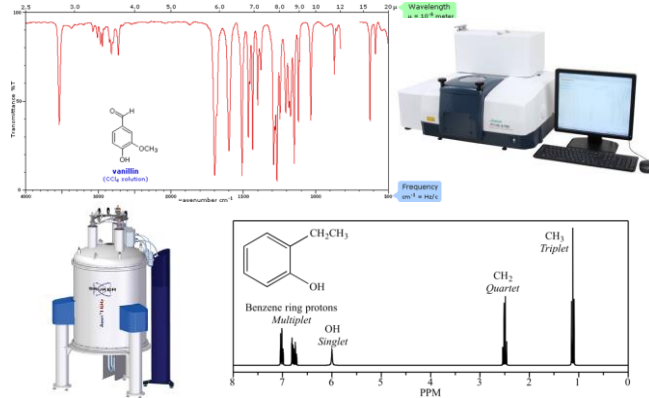


## Biofizika II.

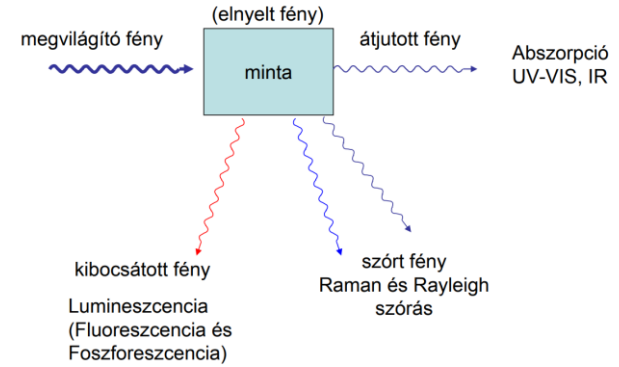
Optikai és rádióspektroszkópai módszerek

Orosz Ádám



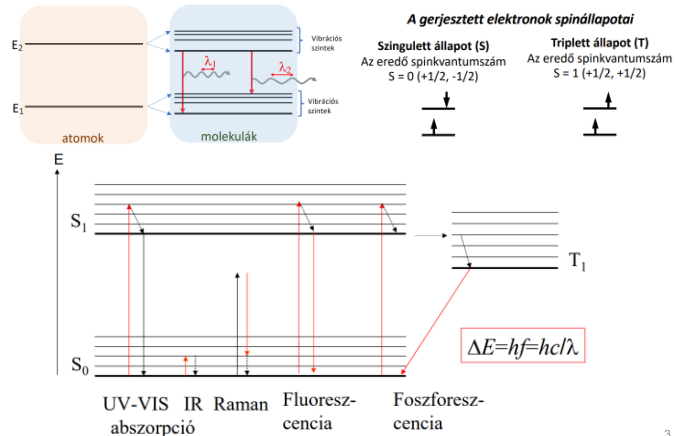
## Besugárzás elektromágneses sugárzással

Milyen jeleket mérhetünk?



## Fényelnyelés és kibocsátás

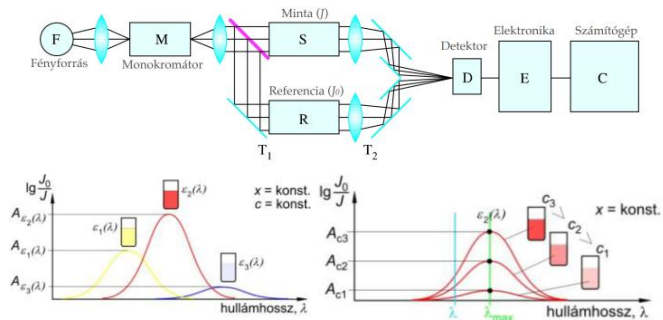
Jablonski-diagram



## Abszorpciós spektroszkópia

Minőségi és mennyiségi információ

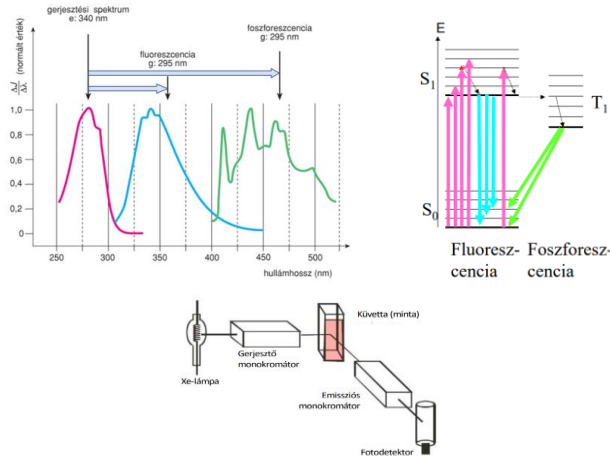
$$A = \lg \frac{J_0}{J} = \varepsilon(\lambda)cx \quad A(\lambda)$$



3

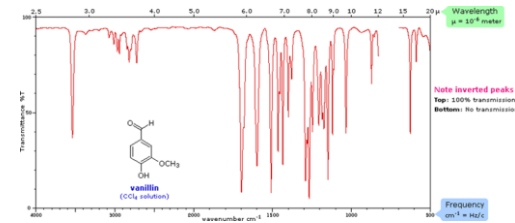
4

## Emissziós spektroszkópia



5

## Infravörös spektroszkópia

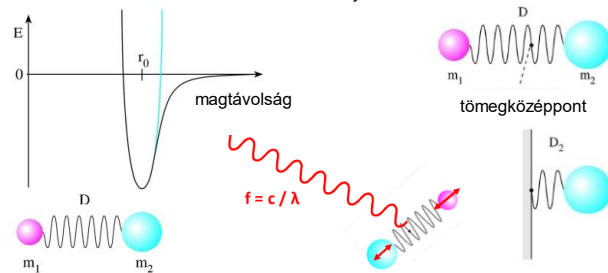


6

## Infravörös spektroszkópia

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

- Közeli infravörös (NIR):  $\lambda = 800 \text{ nm} - 2,5 \mu\text{m}$
- Középinfravörös (MIR):  $\lambda = 2,5 \mu\text{m} - 50 \mu\text{m}$
- Távoli infravörös (FIR):  $\lambda = 50 \mu\text{m} - 1000 \mu\text{m}$

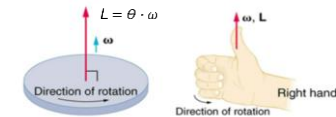


7

## Ismétlés: Newton törvényei forgó mozgás esetében

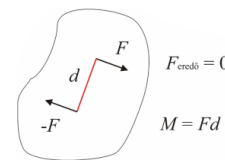
Hogyan jellemezhetjük egy **forgó test** mozgásállapotát?

**Impulzusmomentum (perdület) ( $L$ ):**  $L = \theta \cdot \omega$  ( $\text{kg} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ ) vektor



I.  $\theta \cdot \omega = \text{állandó}$  (perdület megmaradás; lásd: **forgó jégtáncos**)

II. Megváltoztatásához **forgatónyomaték** ( $M$ ) szükséges  $\frac{\Delta \theta \omega}{\Delta t} = M$



**Egyensúly** csak akkor, ha  $F_{\text{eredő}} = 0$  és  $M_{\text{eredő}} = 0$  egyszerre teljesül.

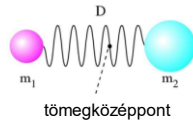
Ekkor:  $m \cdot v = \text{állandó}$  és  $\theta \cdot \omega = \text{állandó}$

8

## Hullámhossz és hullámszám

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

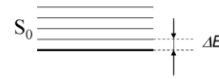
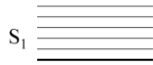
### Klasszikus fizikai modell



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

rezonancia  $f$  frekvenciájú sugárzással

### Kvantumfizikai modell



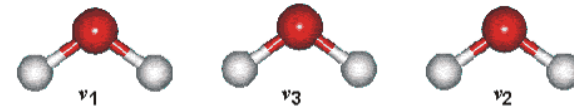
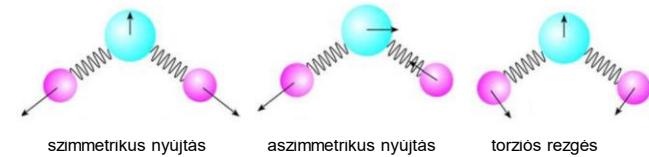
$$\Delta E = hf$$

azonosak!

9

## Normálrezgések

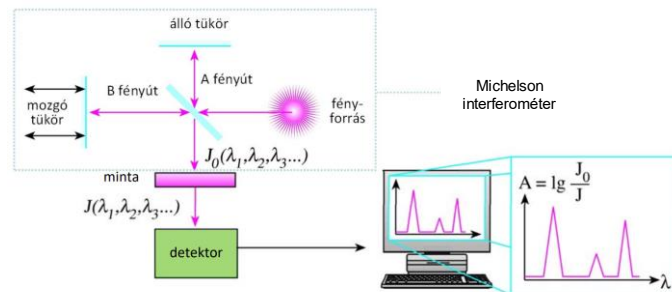
- Az egymástól független rezgések
- Minden atom **ugyanazzal a frekvenciával**, de **különböző amplitúdóval és irányban** rezeg.
- Példa: a víz három normálrezgése



10

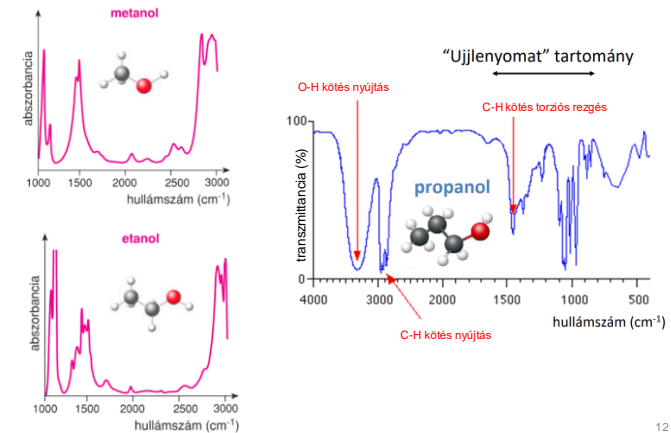
## Az IR-spektrum mérése

Fourier transzformációs infravörös (FTIR) spektroszkópia



11

## Molekulák azonosítása, szerkezetmeghatározás



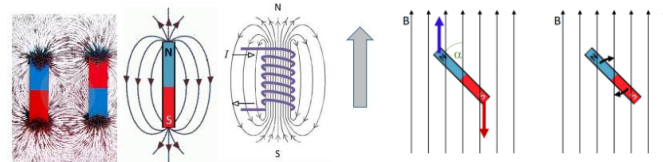
12

## Mágneses magrezonancia NMR spektroszkópia

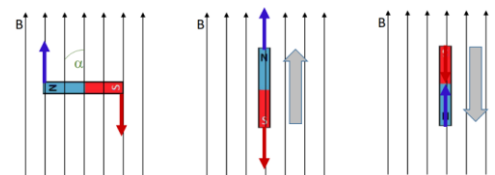


13

## Mágnesség



Mágneses dipólus homogén mágneses térben



Potenciális energia:

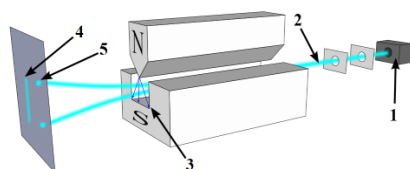
$-\mu B$

$+\mu B$

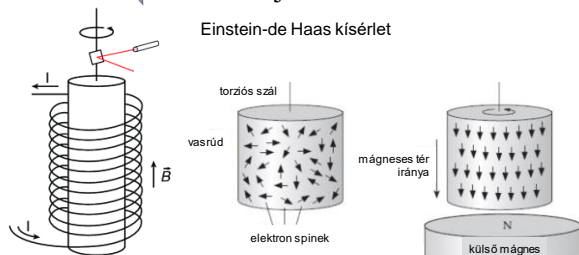
14

## Mágneses momentum és spin

Stern-Gerlach kísérlet



Einstein-de Haas kísérlet

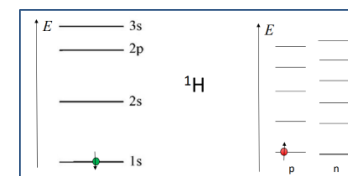
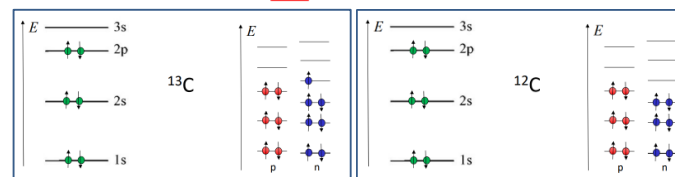


15

## NMR jelet adó magok

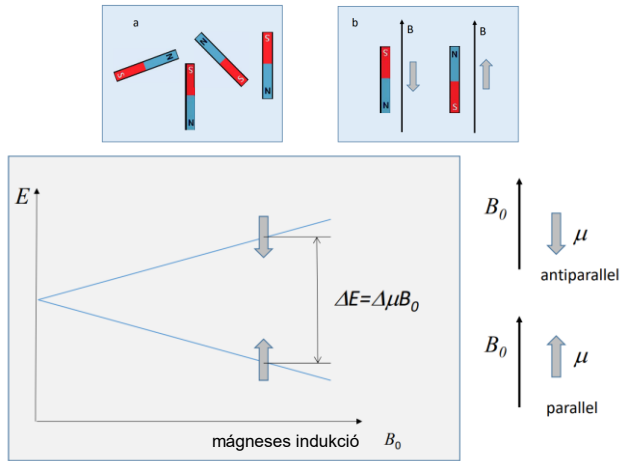
Páratlan számú protonot vagy neutronot tartalmazó magok

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



16

## Zee-man-effektus



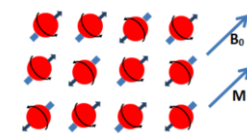
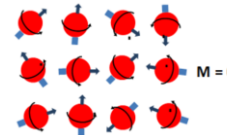
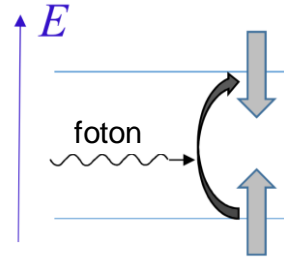
17

## Rezonancia

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

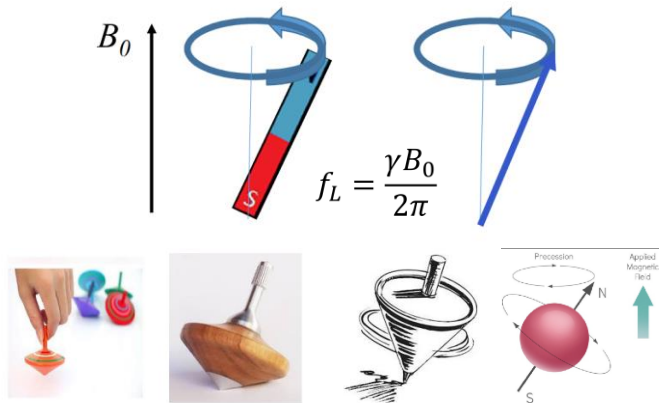
$$E_{\text{foton}} = hf = \Delta E$$

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



18

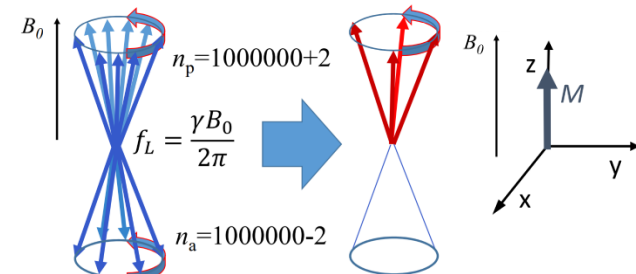
## Spin (és mágneses momentuma) külső mágneses térben - precesszió



19

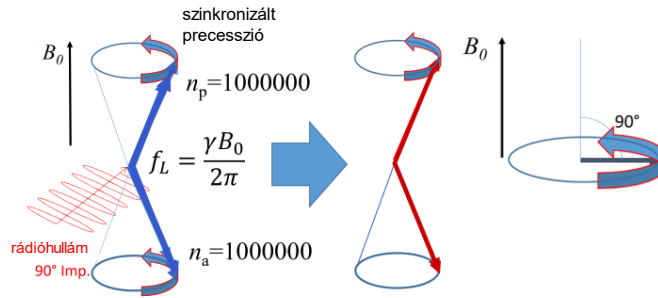
## Az NMR spektrum mérése

Folytonos hangolászú (CW) és impulzus alapú Fourier transzfomációs (FT) eljárás



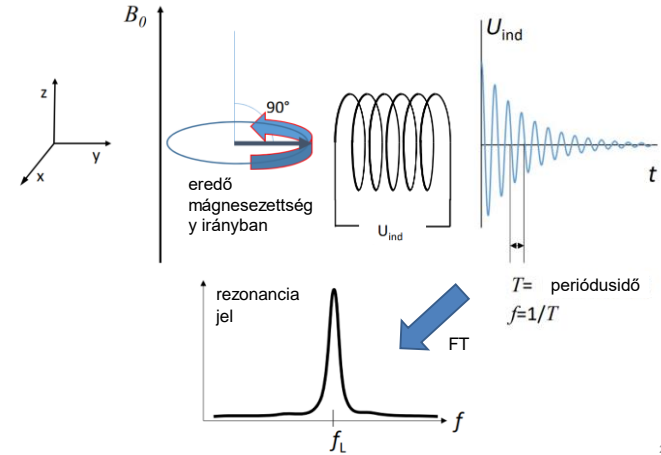
20

## Impulzus alapú módszer Gerjesztés rádiófrekvenciás impulzussal



21

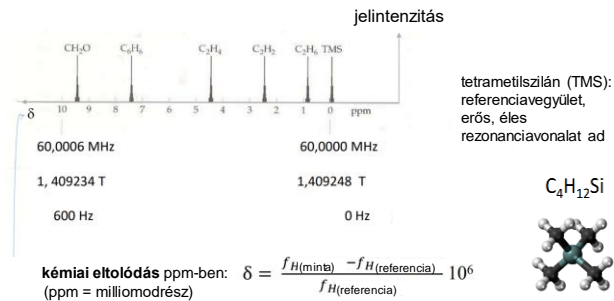
## Szabad indukciós lecsengés - Free induction decay (FID)



22

## Kémiai eltolódás

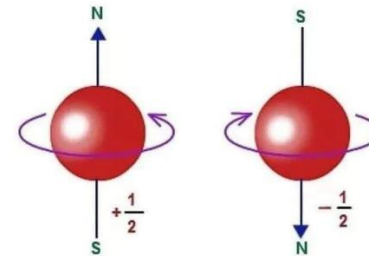
- A kémiai eltolódás a magokat körülvevő **elektronoktól függ**
- Árnyékoló hatás – lokális változás** a mágneses tér erősségében – a magra jellemző **rezonanciafrekvencia eltolódik**
- Információ a **molekuláris szerkezetről**



23

## „Semmi sincsen egészen úgy...”

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



24