

Orvosi biofizika

Damjanovich, Sándor
Fidy, Judit
Szöllősi, János

Orvosi biofizika

írta Damjanovich, Sándor, Fidy, Judit, és Szöllősi, János

Publication date 2007-08-30

Szerzői jog © 2007-08-30 Sándor, Damjanovich; Judit, Fidy; János, Szöllősi; Szerzők

Kivonat

A könyv segítséget nyújt a biofizika elemi szintű elsajátításához.

Tartalom

1. I. rész – Az „élő” anyag legfontosabb szerkezeti tulajdonságai és szerepük a biológiai funkciókban

1

1. I/1. Az atom szerkezete	1
1.1. I/1.1 A mai atomképhez vezető út főbb állomásai	1
1.1.1. I/1.1.1. Atom, elektron, atommag	1
1.1.2. I/1.1.2. Az energiakvantum közvetlen bizonyítéka	2
1.1.3. I/1.1.3. Az elektron mint hullám	6
1.2. I/1.2. Az elektron viselkedésének matematikai megfogalmazása	8
1.2.1. I/1.2.1. A szabad elektron terjedési törvénye	8
1.2.2. I/1.2.2. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció	11
1.2.3. I/1.2.3. A kötött állapotú elektron, atomi állapotok	13
1.3. I/1.3. A kvantummechanika eredményei a legegyszerűbb atom esetében	13
1.3.1. I/1.3.1. Diszkrét atomi energiaszintek, főkvantumszám	14
1.3.2. I/1.3.2. Külső elektromos tér hatása a kötött elektronra, alagútjelenség	17
1.3.3. I/1.3.3. A kovalens kémiai kötés	18
1.4. I/1.4. Az atomi elektronállapotok további kvantált tulajdonságai	19
1.4.1. I/1.4.1. Mellékvantumszám és mágneses kvantumszám	19
1.4.2. I/1.4.2. Az elektron spinje és a hozzá tartozó mágneses momentum	20
1.4.3. I/1.4.3. A periódusos rendszer felépítése: Pauli-elv, elektronpálya, elektronháj, Hund-szabály	22
1.5. I/1.5. Az atommag szerkezete	24
1.5.1. I/1.5.1. Az atommagot jellemző adatok áttekintése	24
1.5.2. I/1.5.2. Az atommagot összetartó kölcsönhatás, tömeghiány, kötési energia	25
1.5.3. I/1.5.3. Magmodellek, a nukleonok kvantált energiaállapotai	26
1.5.4. I/1.5.4. Az atommag stabilitása	28
2. I/2. Atomi kölcsönhatások	28
2.1. I/2.1. Kötéstípusok	29
2.1.1. I/2.1.1. A kovalens kötés	29
2.1.2. I/2.1.2. Elektrosztatikus kölcsönhatás részvételével kialakuló kötéstípusok	30
2.1.3. I/2.1.3. Van der Waals-kölcsönhatások	32
2.1.4. I/2.1.4. A H-kötés	35
2.1.5. I/2.1.5. A hidrofób kölcsönhatás	35
3. I/3. Sokatomos rendszerek, rend és rendezetlenség	36
3.1. I/3.1. Boltzmann-eloszlás	36
3.1.1. I/3.1.1. A részecskék állapotainak eloszlása	36
3.1.2. I/3.1.2. Milyen jelenségekben tapasztaljuk a Boltzmann-eloszlás érvényesülését? 39	
3.2. I/3.2. Gázok	42
3.2.1. I/3.2.1. Ideális gáz	42
3.2.2. I/3.2.2. A Boltzmann-eloszlás következményei ideális gázban: a Maxwell-féle sebességeloszlás	43
3.2.3. I/3.2.3. Reális gáz	44
3.3. I/3.3. Szilárd anyagok	45
3.3.1. I/3.3.1. A kristályos állapot	45
3.3.2. I/3.3.2. Energiasávok	47
3.3.3. I/3.3.3. A tiltott sáv szélessége által meghatározott tulajdonságok; szigetelők, félvezetők, vezetők	48
3.3.4. I/3.3.4. „Félvezető tulajdonság” létrehozása szennyezéssel	50
3.3.5. I/3.3.5. A kristályszerkezet hibái	51
3.4. I/3.4. Folyadékok, folyadékkristályok	52
3.4.1. I/3.4.1. A folyadék állapot	52
3.4.2. I/3.4.2. Folyadékkristályok: anizotrop folyadékok	53
4. I/4. Az élő anyag szerkezeti egységei	56
4.1. I/4.1. A víz	56
4.1.1. I/4.1.1. A vízmolekula szerkezete	57
4.1.2. I/4.1.2. A vízmolekulák H-hidas kötésrendszere	57

4.1.3. I/4.1.3. A víz szerepe az élő struktúrákban	60
4.2. I/4.2. Nukleinsavak	62
4.2.1. I/4.2.1. A nukleinsavak építőkövei és elsődleges szerkezete	62
4.2.2. I/4.2.2. A nukleinsavak másodlagos szerkezete	63
4.2.3. I/4.2.3. Az RNS másodlagos szerkezetének sajátosságai	66
4.2.4. I/4.2.4. A DNS harmadlagos szerkezete, szuperhelicitás	66
4.3. I/4.3. Fehérjék	68
4.3.1. I/4.3.1. A fehérjék elsődleges szerkezete, aminosavak	68
4.3.2. I/4.3.2. A fehérjék másodlagos szerkezete	70
4.3.3. I/4.3.3. A harmadlagos szerkezet és kialakulása	73
4.3.4. I/4.3.4. A térbeli szerkezet kialakításában szerepet játszó kölcsönhatások	73
4.3.5. I/4.3.5. Negyedleges szerkezet	74
4.4. I/4.4. Rend és rendezetlenség makromolekuláris rendszerekben	74
5. I/5. Szupramolekuláris szerveződés az élő anyagban	76
5.1. I/5.1. Biológiai membránok	77
5.1.1. I/5.1.1. A lipid kettős réteg	77
5.1.2. I/5.1.2. Membránfehérjék	79
5.2. I/5.2. Az örökítőanyag szerveződése a sejtmagban	83
5.3. I/5.3. A citoszkeleton	86
2. II. rész – Sugárzások és kölcsönhatásuk az „élő” anyaggal	89
1. II/1. A sugárzásokról általában	89
1.1. II/1.1. Radiometriai alapok	89
1.1.1. II/1.1.1. Kisugárzott teljesítmény, felületi teljesítmény, energiaáram-erősség, energiaáram-sűrűség vagy intenzitás	89
1.1.2. II/1.1.2. Egyszerű törvények; a szimmetria, a távolságok és a szögek szerepe 91	
1.1.3. II/1.1.3. A sugárzás intenzitásának gyengülése közegen való áthaladáskor	93
1.2. II/1.2. A sugárzások osztályozása	97
2. II/2. Nem ionizáló sugárzások	98
2.1. II/2.1. A fény	98
2.1.1. II/2.1.1. A Fermat-elv mint a geometriai optika összegzése	98
2.1.2. II/2.1.2. Optikai leképezés, a Fermat-elv alkalmazása görbült felületekre	102
2.1.3. II/2.1.3. A fizikai optika vagy hullámoptika alapjai	106
2.1.4. II/2.1.4. Fényinterferencia	109
2.1.5. II/2.1.5. Fényelhajlás, diffrakció	110
2.1.6. II/2.1.6. A diffrakciós módszerek alapjai	113
2.1.7. II/2.1.7. Optikai anizotropia, a fény polarizációja	115
2.1.8. II/2.1.8. A fény mint elektromágneses hullám és mint fényrészecske-, fotonsugárzás	117
2.2. II/2.2. A fény keletkezése	119
2.2.1. II/2.2.1. Hőmérsékleti sugárzás	119
2.2.2. II/2.2.2. A feketetest-sugárzás törvényei	121
2.2.3. II/2.2.3. A Planck-féle sugárzási törvény	123
2.2.4. II/2.2.4. Lumineszcencia	126
2.2.5. II/2.2.5. A fényerősítés gondolata	126
2.2.6. II/2.2.6. Fényforrások, fotometria	129
2.2.7. II/2.2.7. Lézerek	131
2.2.8. II/2.2.8. A lézersugárzás legfontosabb tulajdonságai, lézertípusok	133
2.3. II/2.3. A fény és anyag kölcsönhatása	135
2.3.1. II/2.3.1. Fényszóródás	135
2.3.2. II/2.3.2. Fényabszorpció	138
2.3.3. II/2.3.3. A fény biológiai hatásainak általános megközelítése	138
2.3.4. II/2.3.4. A fény hatása a szemre és a bőrre	142
2.4. II/2.4. Hang–ultrahang	144
2.4.1. II/2.4.1. Általános fizikai tulajdonságaik	144
2.4.2. II/2.4.2. A hang terjedése közegekben	146
2.4.3. II/2.4.3. Közegek határán lejátszódó jelenségek	150
3. II/3. Ionizáló sugárzások	152
3.1. II/3.1. A röntgensugárzás	152
3.1.1. II/3.1.1. Általános jellemzők	152

3.1.2. II/3.1.2. A fékezési röntgensugárzás jelensége és spektruma	154
3.1.3. II/3.1.3. A fékezési sugárzás során kisugárzott összteljesítmény	155
3.1.4. II/3.1.4. Karakterisztikus röntgensugárzás	156
3.1.5. II/3.1.5. A röntgensugárzás abszorpciója	158
3.1.6. II/3.1.6. A röntgensugárzás abszorpciójához vezető kölcsönhatások	158
3.2. II/3.2. Magsugárzások, radioaktív izotópok	162
3.2.1. II/3.2.1. A radioaktív bomlás módjai	163
3.2.2. II/3.2.2. A radioaktív bomlás törvénye	166
3.2.3. II/3.2.3. A magsugárzások kölcsönhatása atomi rendszerekkel	168
3.2.4. II/3.2.4. Radioaktív izotópok felhasználása	172
3.2.5. II/3.2.5. Az ionizáló sugárzások detektálása	176
3.2.6. II/3.2.6. Részecskegyorsítók az orvostudományban	177
4. II/4. Dozimetria	179
4.1. II/4.1. Dózisfogalmak	181
4.1.1. II/4.1.1. Fizikai dózisfogalmak	183
4.1.2. II/4.1.2. Biológiai dózisfogalmak	186
4.1.3. II/4.1.3. Származtatott dózisfogalmak	187
4.2. II/4.2. Dóзимérő eszközök	188
4.2.1. II/4.2.1. Gázionizáción alapuló eszközök	188
4.2.2. II/4.2.2. Filmdoziméterek	189
4.2.3. II/4.2.3. Termolumineszcens doziméterek	190
4.3. II/4.3. Sugárvédelem	190
4.3.1. II/4.3.1. A sugárvédelem szempontjai a nemzetközi ajánlásokban	190
4.3.2. II/4.3.2. A sugárzások forrásai	191
4.4. II/4.4. A sugárhatás dózisfüggése	193
4.5. II/4.5. A sugárhatás molekuláris elmélete	197
4.5.1. II/4.5.1. DNS-károsodás	197
4.5.2. II/4.5.2. Fehérjék károsodása	200
4.5.3. II/4.5.3. A szervezet szintjén jelentkező tünetek	201
4.6. II/4.6. A sugárhatást befolyásoló tényezők	201
4.6.1. II/4.6.1. A sugárzás minősége	201
4.6.2. II/4.6.2. Időfaktor	202
4.6.3. II/4.6.3. Anyagcsere és hőmérséklet	202
4.6.4. II/4.6.4. Az oxigén hatása	202
4.6.5. II/4.6.5. Sugárzás ellen védő anyagok	203
4.6.6. II/4.6.6. Biológiai tényezők	203
4.7. II/4.7. A nem ionizáló sugárzások és a vegyszerek hatásai	205
3. III. rész – Transzportjelenségek élő rendszerekben	208
1. III/1. Folyadékok és gázok áramlása	208
1.1. III/1.1. Alapfogalmak és alapegyenletek	208
1.1.1. III/1.1.1. Kontinuitási egyenlet	210
1.2. III/1.2. Ideális folyadékok áramlása	211
1.2.1. III/1.2.1. Bernoulli törvénye	211
1.3. III/1.3. Reális folyadékok lamináris áramlása	213
1.3.1. III/1.3.1. A Newton-féle súrlódási törvény	213
1.3.2. III/1.3.2. Áramlás csövekben	215
1.3.3. III/1.3.3. A Hagen–Poiseuille-törvény és alkalmazása a vérkeringésre ...	217
1.4. III/1.4. Turbulens áramlás	222
1.5. III/1.5. Gömb alakú test mozgása viszkózus közegben	223
2. III/2. A diffúzió	225
2.1. III/2.1. A molekulák mozgása és a diffúzió	225
2.1.1. III/2.1.1. A molekuláris mozgás jellemzői	226
2.1.2. III/2.1.2. A diffúzió jelensége, Fick I. törvénye	227
2.1.3. III/2.1.3. A diffúziós együttható további jellemzői	232
2.1.4. III/2.1.4. Fick II. törvénye	234
2.1.5. III/2.1.5. A bolyongási probléma és Fick II. törvényének kapcsolata	237
2.1.6. III/2.1.6. A diffúziós folyamatok időtől való függésének elemzése	241
2.1.7. III/2.1.7. A diffúzió által szabályozott kémiai reakciók	243
2.2. III/2.2. A diffúzió néhány különleges esete	244
2.2.1. III/2.2.1. Az ozmózis jelensége, Van't Hoff-törvénye	244

2.2.2. III/2.2.2. Az ozmózisnyomás gyakorlati jelentősége	247
2.2.3. III/2.2.3. Laterális diffúzió biológiai membránokban	248
3. III/3. A transzportfolyamatok termodinamikai vonatkozásai	250
3.1. III/3.1. A diffúzió jelensége, ha a rendszer nincs termikus egyensúlyban	251
3.1.1. III/3.1.1. Termodiffúzió, hővezetés	251
3.2. III/3.2. A termodinamikai rendszer jellemzésére szolgáló mennyiségek és a transzportfolyamatok kapcsolata	253
3.2.1. III/3.2.1. Extenzív és intenzív mennyiségek	253
3.2.2. III/3.2.2. A transzportfolyamatok egységes leírása	254
3.3. III/3.3. A termodinamika főtételei	257
3.3.1. III/3.3.1. A termodinamika első főtétele és általánosítása	257
3.3.2. III/3.3.2. A kémiai potenciál és az elektrokémiai potenciál	258
3.3.3. III/3.3.3. A termodinamika második főtétele és az entrópia	258
3.3.4. III/3.3.4. Az entrópia statisztikus bevezetése	260
3.3.5. III/3.3.5. Az új entrópia fogalom néhány következménye, a termodinamika harmadik főtétele	264
3.4. III/3.4. A termodinamikai potenciálfüggvények	266
3.4.1. III/3.4.1. Az entalpia	268
3.4.2. III/3.4.2. A szabad energia és a szabad entalpia	270
3.4.3. III/3.4.3. A termodinamikai potenciálok változása kiegyenlítődési folyamatokban	271
3.4.4. III/3.4.4. A leggyakrabban használt termodinamikai potenciálfüggvények és néhány további tulajdonságuk	272
3.4.5. III/3.4.5. Híg oldatok szabad entalpiája és a komponensek kémiai potenciálja (kapcsolat a koncentrációval)	274
3.5. III/3.5. Az élő szervezet energiaforgalma	275
4. III/4. Transzportfolyamatok a biológiai membránon keresztül, membránpotenciál	276
4.1. III/4.1. Transzportjelenségek a sejt nyugalmi állapotában	276
4.1.1. III/4.1.1. Töltéssel nem rendelkező részecskék passzív diffúziója	277
4.1.2. III/4.1.2. Ionok passzív diffúziója	279
4.1.3. III/4.1.3. Aktív transzport	282
4.1.4. III/4.1.4. Makromolekula- és részecsketranszport	284
4.2. III/4.2. A nyugalmi membránpotenciál	285
4.2.1. III/4.2.1. A nyugalmi membránpotenciál értelmezése a Goldman–Hodgkin–Katz- (GHK-) egyenlettel	285
4.2.2. III/4.2.2. A nyugalmi membránpotenciál és a Nernst-egyenlet kapcsolata	287
4.3. III/4.3. Membránpotenciál-változások az ingerküszöb alatt	291
4.3.1. III/4.3.1. Helyi (elektrotónusos) membránpotenciál-változások és elektromos modelljük	291
4.3.2. III/4.3.2. A membrán elektromos modelljéből származó eredmények	293
4.4. III/4.4. A membránpotenciál tulajdonságai ingerületi állapotban: az akciós potenciál	295
4.4.1. III/4.4.1. Az akciós potenciál jelalakja	295
4.4.2. III/4.4.2. Ionáramok az akciós potenciál alatt	296
4.4.3. III/4.4.3. Az akciós potenciál terjedése	297
4. IV. rész – Az érzékszervek biofizikája	301
1. IV/1. Az érzékelés folyamatának általános törvényszerűségei	301
1.1. IV/1.1. A folyamat alapvető elemei és jellemzői	301
1.1.1. IV/1.1.1. Érzékelősejtek, receptorok, érzékszervek	301
1.1.2. IV/1.1.2. A receptorok fajtái, szerepe	302
1.1.3. IV/1.1.3. A receptorok és az idegrost	305
1.1.4. IV/1.2.1. Abszolút és relatív küszöbinger	306
1.1.5. IV/1.2.2. A Weber-törvény	306
1.1.6. IV/1.2.3. A Weber–Fechner-törvény	307
1.1.7. IV/1.2.4. A Stevens-törvény	308
2. IV/2. A látás	310
2.1. IV/2.1. A szem vázlatos szerkezete	310
2.1.1. IV/2.1.1. A szem és a retina felépítése	311
2.1.2. IV/2.1.2. A fotoreceptor sejtek szerkezete	312
2.2. IV/2.2. A látás biofizikai alapjai	313
2.2.1. IV/2.2.1. Optikai leképezés a szemben	313

2.2.2. IV/2.2.2. A szem képképzésének hibái és azok korrigálása	316
2.2.3. IV/2.2.3. A szem feloldóképessége	317
2.2.4. IV/2.2.4. A látási ingerület kialakulása a retinában	320
2.2.5. IV/2.2.5. A fotoreceptorsejtek érzékenysége	321
2.2.6. IV/2.2.6. Fotokémiai folyamatok a receptorsejtekben	322
2.2.7. IV/2.2.7. Színlátás	325
3. IV/3. A hallás	327
3.1. IV/3.1. A hallható hangok néhány közös tulajdonsága	327
3.1.1. IV/3.1.1. A hang magassága	327
3.1.2. IV/3.1.2. A hang színezete	328
3.1.3. IV/3.1.3. Az irányhallás	329
3.1.4. IV/3.1.4. Hangok és hallás	329
3.1.5. IV/3.1.5. Intenzitásszint	330
3.2. IV/3.2. Az emberi fül felépítése és működése	332
3.2.1. IV/3.2.1. A külső fül	332
3.2.2. IV/3.2.2. A középfül	334
3.2.3. IV/3.2.3. A belső fül	337
3.2.4. IV/3.2.4. A Corti-szerv anatómiája	341
3.3. IV/3.3. A szőrsejtek szerepe a hallás folyamatában	342
3.3.1. IV/3.3.1. A külső szőrsejtek mint molekuláris motorok	345
3.3.2. IV/3.3.2. Adaptációs mechanizmusok	350
3.4. IV/3.4. Az akusztikus információ kódolása	350
3.4.1. IV/3.4.1. Hely teória	350
3.4.2. IV/3.4.2. A röplabdaelmélet	351
3.5. IV/3.5. Pszichoakusztika, hangosság	352
3.5.1. IV/3.5.1. A phonskála	352
3.5.2. IV/3.5.2. A sonskála	353
3.5.3. IV/3.5.3. A zajszint és mérése	355
5. V. rész – Biomechanika	357
1. V/1. A szubcelluláris és sejtes struktúrák biomechanikája	357
1.1. V/1.1. A citoskeletális rendszer biofizikája	357
1.1.1. V/1.1.1. A citoskeletális filamentumok rugalmassága	357
1.1.2. V/1.1.2. A citoskeletális filamentumok polimerizációja	359
1.1.3. V/1.1.3. A citoskeletális rendszer komponensei	360
1.1.4. V/1.1.4. Sejtmozgás, motilitás	363
1.2. V/1.2. A motorfehérjék biofizikája	363
1.2.1. V/1.2.1. Motorfehérjék csoportosítása	364
1.2.2. V/1.2.2. Motorfehérjék közös tulajdonságai	364
1.3. V/1.3. Az izomműködés biofizikája	366
1.3.1. V/1.3.1. Izomtípusok	366
1.3.2. V/1.3.2. A harántcsíktolt izom szerkezete	366
1.3.3. V/1.3.3. A harántcsíktolt izom működése	367
1.4. V/1.4. Az izom-összehúzódnak szabályozása	368
1.4.1. V/1.4.1. A tropomiozin-troponin alapú szabályozás	368
2. V/2. A mozgásszervek biomechanikája	370
2.1. V/2.1. A csontrendszer	370
2.1.1. V/2.1.1. A csontszövet mint anyag	370
2.1.2. V/2.1.2. A csont mint szerv	375
2.1.3. V/2.1.3. A csontváz mint szervrendszer	378
2.2. V/2.2. Az ízületek biomechanikája	382
2.2.1. V/2.2.1. Statika, reológia	382
2.2.2. V/2.2.2. Kinetika	383
2.2.3. V/2.2.3. Tribológia	384
6. VI. rész – A molekuláris és sejtdiagnosztika fizikai módszerei	387
1. VI/1. Szedimentációs és elektroforetikus módszerek	387
1.1. VI/1.1. Szedimentációs módszerek	387
1.1.1. VI/1.1.1. Szedimentációs sebességi módszer	387
1.1.2. VI/1.1.2. Szedimentációs egyensúlyi módszer	390
1.2. VI/1.2. Elektroforézis és izoelektromos fókuszálás	391
1.2.1. VI/1.2.1. Szabad elektroforézis	392

1.2.2. VI/1.2.2. Gélelektroforézis	394
1.2.3. VI/1.2.3. Izoelektromos fókuszálás	395
1.2.4. VI/1.2.4. Blottingtechnikák	395
2. VI/2. Mikroszkópos módszerek	396
2.1. VI/2.1. Az egyszerű nagyító (lupe)	397
2.2. VI/2.2. A fénymikroszkóp	401
2.2.1. VI/2.2.1. A fénymikroszkóp képkalkotása	402
2.2.2. VI/2.2.2. Felbontóképesség, Abbe-elv	404
2.3. VI/2.3. Speciális mikroszkópok	411
2.3.1. VI/2.3.1. Sztereomikroszkóp	411
2.3.2. VI/2.3.2. Ultramikroszkóp	412
2.3.3. VI/2.3.3. Fluoreszcenciamikroszkóp	412
2.3.4. VI/2.3.4. Polarizációs mikroszkóp	413
2.3.5. VI/2.3.5. Fáziskontraszt-mikroszkóp	415
3. VI/3. Optikai spektroszkópiái módszerek	418
3.1. VI/3.1. Abszorpciós spektroszkópia az UV- és a látható tartományban	419
3.1.1. VI/3.1.1. Fényelnyelés híg oldatokban	419
3.1.2. VI/3.1.2. Abszorpciós spektrofotométerek	421
3.1.3. VI/3.1.3. Abszorpciós sávok a spektrumban	422
3.2. VI/3.2. Infravörös spektroszkópia	426
3.2.1. VI/3.2.1. A molekularezgések	427
3.2.2. VI/3.2.2. Vegyületek, molekulák azonosítása, az IR-spektroszkópia analitikai alkalmazásai	429
3.3. VI/3.3. Lumineszcencia spektroszkópia	433
3.3.1. VI/3.3.1. A fényemisszió jelensége: fluoreszcencia és foszforeszcencia	433
3.3.2. VI/3.3.2. A lumineszcencia jellemzése	435
3.3.3. VI/3.3.3. A fluoreszcencia gyakorlati alkalmazásának területei	440
3.4. VI/3.4. Fényszóráson alapuló eljárások	443
4. VI/4. Áramlási citometria és sejtszeparálás	445
4.1. VI/4.1. Az áramlási citométerek működésének általános elvei	447
4.2. VI/4.2. A mérési eredmények feldolgozása, adattárolás	453
4.3. VI/4.3. Sejtszeparálás	456
4.4. VI/4.4. Az áramlási citometria néhány alkalmazása	457
4.4.1. VI/4.4.1. DNS-tartalom-mérés	457
4.4.2. VI/4.4.2. Immunofluoreszcencia	458
7. VII. rész – Elektromos jelek és módszerek az orvosi gyakorlatban	462
1. VII/1. Elektromos jelek feldolgozása	462
1.1. VII/1.1. Az orvosi gyakorlatban előforduló jelek osztályozása, feldolgozása	462
1.1.1. VII/1.1.1. A jelek osztályozása	462
1.1.2. VII/1.1.2. A zaj csökkentése átlagolással	463
1.1.3. VII/1.1.3. Jelek Fourier-felbontása	464
1.1.4. VII/1.1.4. Orvosi jelfeldolgozó lánc elvi felépítése	467
1.2. VII/1.2. Analóg elektromos alapáramkörök	468
1.2.1. VII/1.2.1. Feszültségosztó	468
1.2.2. VII/1.2.2. RC-körök egyenáramú áramkörben	469
1.2.3. VII/1.2.3. Váltakozóáramú szűrőkörök	474
1.2.4. VII/1.2.4. LC-kör (rezgőkör)	476
1.3. VII/1.3. Félvezető áramköri elemek	477
1.3.1. VII/1.3.1. Félvezető dióda	477
1.3.2. VII/1.3.2. Tranzisztorok	478
1.3.3. VII/1.3.3. FET (Field Effect Transistor)	479
1.3.4. VII/1.3.4. MOS (Metal Oxide Semiconductor)-FET és CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor)-FET	480
1.4. VII/1.4. Elektromos erősítő	480
1.4.1. VII/1.4.1. Az erősítő jellemző adatai	480
1.4.2. VII/1.4.2. Az erősítő karakterisztikája	483
1.4.3. VII/1.4.3. A visszacsatolás	484
1.5. VII/1.5. Jelátalakítás, jelszelektálás	487
1.5.1. VII/1.5.1. Analóg-digitális átalakítók	487
1.5.2. VII/1.5.2. Zajszűrés	494

1.5.3. VII/1.5.3. Impulzusjelek szelektálása	494
1.6. VII/1.6. Megjelenítők	496
1.6.1. VII/1.6.1. Katódsugárcső	496
1.6.2. VII/1.6.2. Folyadékkristályos képernyők (LCD) működése	497
1.7. VII/1.7. Terápiás célú elektromos készülékek felépítése és működésük alapjai ...	500
2. VII/2. Testfelszíni elektromos jelek feldolgozása	501
2.1. VII/2.1. Elektrokardiográfia	501
2.1.1. VII/2.1.1. Egy rost akciós potenciálja	501
2.1.2. VII/2.1.2. Bipoláris elvezetések	502
2.1.3. VII/2.1.3. Unipoláris elvezetések	504
2.1.4. VII/2.1.4. Az EKG-jel feldolgozása	506
2.1.5. VII/2.1.5. Vektorkardiográfia	506
2.2. VII/2.2. Elektroencefalográfia	507
2.3. VII/2.3. Elektromiográfia	508
2.4. VII/2.4. Elektoretinográfia	508
3. VII/3. Audiometria	510
3.1. VII/3.1. Hangaudiometria	510
3.2. VII/3.2. Objektív audiometria	515
8. VIII. rész – Képképző módszerek	520
1. VIII/1. A képi megjelenítés	521
2. VIII/2. Felületi térképek	521
2.1. VIII/2.1. Endoszkópia	521
2.1.1. VIII/2.1.1. Száloptika	521
2.1.2. VIII/2.1.2. Az endoszkópi kép keletkezése	522
2.1.3. VIII/2.1.3. Endoszkópiai eljárások	523
2.2. VIII/2.2. Termográfia	524
2.3. VIII/2.3. Elektromosfeszültség-térképek	525
3. VIII/3. Szummációs eljárások	526
3.1. VIII/3.1. Röntgensugárzás abszorpcióján alapuló módszerek	526
3.1.1. VIII/3.1.1. Röntgenátvilágítás	526
3.1.2. VIII/3.1.2. Elektronikus röntgenkép-erősítő	527
3.1.3. VIII/3.1.3. Digitális röntgenképképzés	528
3.1.4. VIII/3.1.4. Digitális szubtrakciós angiográfia (DSA), röviden: digitális angiográfia (DA)	528
3.2. VIII/3.2. Izotópos nyomjelzéstechnikák: szcintigráfia	530
4. VIII/4. Tomográfiai módszerek	535
4.1. VIII/4.1. Mágneses magrezonanciás képképzés, MRI – Direkt tomográfia 1.	535
4.1.1. VIII/4.1.1. Az MRI alapvető mérési elve	535
4.1.2. VIII/4.1.2. A szekvenciális pont módszer	536
4.1.3. VIII/4.1.3. A kétdimenziós Fourier-transzformációs (2DFT) módszer	538
4.1.4. VIII/4.1.4. Az axiális irányú mágneses tér által kiválasztott szelet voxeleinek elkülönítése	538
4.1.5. VIII/4.1.5. Az MRI speciális területei és technikái	542
4.2. VIII/4.2. Ultrahangos képképzés – Direkt tomográfia 2.	547
4.2.1. VIII/4.2.1. Piezoelektromos hatás, inverz piezoelektromos hatás	548
4.2.2. VIII/4.2.2. Az UH forrás felépítése	548
4.2.3. VIII/4.2.3. Az UH-nyaláb kialakulása és tulajdonságai	550
4.2.4. VIII/4.2.4. Impulzus-echo módszerek, UH-képek	552
4.2.5. VIII/4.2.5. A pásztázás megoldásai	559
4.2.6. VIII/4.2.6. UH-képek feloldóképessége	560
4.2.7. VIII/4.2.7. Háromdimenziós rekonstrukció	561
4.2.8. VIII/4.2.8. Doppler-módszerek	562
4.2.9. VIII/4.2.9. A Doppler-effektus gyakorlati felhasználása	564
4.3. VIII/4.3. Röntgenabszorpciós CT	572
4.4. VIII/4.4. Magsugárzáson alapuló technikák	580
4.4.1. VIII/4.4.1. Fotonemissziós számítógépes tomográfia, SPECT	580
4.4.2. VIII/4.4.2. Pozitronemissziós tomográfia, PET	581
9. IX. rész – Terápiás módszerek fizikai alapjai	589
1. IX/1. Lézerek terápiás alkalmazása	589
1.1. IX/1.1. A lézersugárzás kölcsönhatása szövetekkel	589

1.2. IX/1.2. Lézerek sebészeti alkalmazásai	591
1.2.1. IX/1.2.1. Koaguláció	591
1.2.2. IX/1.2.2. Vaporizáció, karbonizáció	591
1.2.3. IX/1.2.3. Atomizáció	593
1.2.4. IX/1.2.4. Ionizáció	594
2. IX/2. A fény terápiás alkalmazása – fototerápia, fotokemoterápia	594
2.1. IX/2.1. PUVA terápia	595
2.2. IX/2.2. Fotodinamikus terápia	595
2.3. IX/2.3. Kékfény-terápia	596
3. IX/3. Sugárterápia	597
3.1. IX/3.1. Az alkalmazandó sugárzás megválasztása	598
3.1.1. IX/3.1.1. α sugárzás	598
3.1.2. IX/3.1.2. β -sugárzás és elektronsugárzás	598
3.1.3. IX/3.1.3. γ - és röntgensugárzás, összefoglaló néven foton-sugárzás	599
3.1.4. IX/3.1.4. Protonsugárzás	601
3.2. IX/3.2. A sugárzás eljuttatása a besugározandó gócba	602
3.2.1. IX/3.2.1. A képképző eljárások és a besugárzás együttes alkalmazása ...	602
3.2.2. IX/3.2.2. Kollimátorok	603
3.2.3. IX/3.2.3. Forgó besugárzás	605
3.2.4. IX/3.2.4. Egy speciális sugárterápiás eszköz, a gamma-kés	605
3.2.5. IX/3.2.5. Az izotópkezelés kivitelezése	606
4. IX/4. Elektromos áram terápiás alkalmazásai	607
4.1. IX/4.1. Egyenáram alkalmazása	607
4.2. IX/4.2. Ingeráram-terápia	607
4.3. IX/4.3. Szívritmus-szabályozó	609
4.4. IX/4.4. Defibrillátor	611
5. IX/5. Hőterápiás eljárások	611
5.1. IX/5.1. Ultrahang-terápia	612
5.2. IX/5.2. Nagyfrekvenciás hőterápia	614
5.3. IX/5.3. Elektromos sebészet	618
10. X. rész – Az élettudományi kutatómunka fizikai módszerei	621
1. X/1. Optikai spektroszkópiai módszerek	621
1.1. X/1.1. Lumineszcencia-spektroszkópián alapuló eljárások	621
1.1.1. X/1.1.1. Förster típusú rezonancia-energiaátadás (energiatranszfer)	621
1.1.2. X/1.1.2. Fluoreszcencia-kioltás	625
1.1.3. X/1.1.3. A fluoreszcencia-polarizáció mérése és alkalmazásai	629
1.1.4. X/1.1.4. Időfüggő fluoreszcencia-paraméterek meghatározása	631
1.2. X/1.2. Infravörös spektroszkópia	637
1.2.1. X/1.2.1. Molekuláris biofizikai alkalmazás: fehérjekonformáció meghatározása	637
1.2.2. X/1.2.2. Közeli infravörös (NIR-) spektroszkópia	638
1.3. X/1.3. Fényszórásmérés	638
1.3.1. X/1.3.1. Statikus fényszórásmérés	638
1.3.2. X/1.3.2. Dinamikus fényszórásmérés	639
1.4. X/1.4. Cirkuláris dikroizmus (CD) – spektroszkópia	640
1.4.1. X/1.4.1. Optikai aktivitás	640
1.4.2. X/1.4.2. Cirkulárisan és elliptikusan poláros fény	640
1.4.3. X/1.4.3. A CD-spektroszkópia alkalmazása makromolekulák	
szerkezetvizsgálatában	641
2. X/2. Pásztázó mikroszkópos módszerek	642
2.1. X/2.1. A pásztázás elve	643
2.2. X/2.2. Az atomerő-mikroszkópia, AFM	644
3. X/3. Modern fénymikroszkópiai eljárások	646
3.1. X/3.1. Konfokális lézer-pásztázó-mikroszkópia, CLSM	646
3.2. X/3.2. A közeli mező optikai mikroszkópia, NSOM	653
3.3. X/3.3. „Tovatűnő” (evaneszcens) fluoreszcencia	655
3.4. X/3.4. Az optikai csipesz	656
4. X/4. Rádióspektroszkópiai módszerek: mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR) és	
elektronspin-rezonancia spektroszkópia (ESR)	659
4.1. X/4.1. Az NMR és az ESR fizikai alapjai	659

4.2. X/4.2. Az ESR-spektroszkópia néhány biológiai vonatkozása	666
5. X/5. Elektronmikroszkópia	669
5.1. X/5.1. Az elektronmikroszkóp felbontása	669
5.2. X/5.2. Az elektronmikroszkóp felépítése	669
5.3. X/5.3. Az elektronnyaláb kölcsönhatása a mintával, mérési lehetőségek	670
5.3.1. X/5.3.1. Transzmissziós elektronmikroszkópia: TEM	671
5.3.2. X/5.3.2. Páztázó (scanning) elektronmikroszkópia: SEM	671
6. X/6. Röntgen-diffrakció	672
7. X/7. Tömegspektrometria	678
11. A legfontosabb, könyv alakban megjelent irodalmi források	683

A táblázatok listája

1.1. I.1. ábrázat. Az elektrosztatikus kölcsönhatások jellemzői	32
1.2. I.2. táblázat. Néhány atom mérete	34
1.3. A két görbesereg között az a lényeges különbség, hogy a felső azt is szemlélteti, hogy a görbék alatti terület, azaz a részecskék száma (N) állandó	38
1.4. I.31. ábra. A szigetelők, félvezetők, vezetők sáv szerkezete. A betöltött sávokat, sávreszeket sötétebb, míg a betöltetlen világosabb téglalapok jelzik. Az üresen hagyott részek a tiltott sávok (Szobahőmérsékleten a 3 eV körülbelül 120 kT -nek, az 1 eV pedig 40 kT -nek felel meg.).	49
1.5. I.3. táblázat. Élőlények, emberi szövetek és szervek hozzávetőleges víztartalma súlyszázalékban	56
1.6. I.4. táblázat. Néhány folyadék néhány fizikai jellemzőjének összehasonlítása 0°C-on	56
1.7. I.5. táblázat. A periódusos rendszer részlete az O környezetében	58
1.8. I.6. táblázat. DNS-hélix konformációinak jellemző paraméterei	65
1.9. I.7. táblázat. A poli-nukleotid alegységeinek a kettős hélix szerkezetét befolyásoló konformációi	66
2.1. II.1. táblázat. Néhány fényáram és megvilágítás érték	130
2.2. II.2. táblázat. Néhány lézertípus és fontosabb jellemzőik	134
2.3.	137
2.4. II.3. táblázat. Az elektromágneses sugárzás „fénynek” nevezett tartományának felosztása	138
2.5. II.4. táblázat. Néhány anyag akusztikus tulajdonságára jellemző adatok	147
2.6. II.5. táblázat. Néhány határfelület ultrahangra vonatkozó reflexióképessége	151
2.7. II.6. táblázat. Néhány közeg effektív rendszáma és sűrűsége	160
2.8. II.7. táblázat. Két izotóp β -sugárzásának összehasonlítása	170
2.9. II.8. táblázat. Az orvosi gyakorlatban gyakran használt izotópok	175
2.10. I. táblázat. Szövetek levegőre vonatkoztatott tömeggyengítési együttható	185
2.11. 2. táblázat. Szén levegőre vonatkoztatott tömegfékező képessége elektronok esetén	185
2.12. II.9. táblázat. A sugárzási súlytényezők (w_R) értékei különböző sugárzások esetén	186
2.13. II.10. táblázat. Testszöveti súlytényezők (w_T)	187
2.14. II.11. táblázat. Sugárvédelmi dóziskorlátok	191
2.15. II.12. táblázat. Néhány természetes, a környezetben található forrásból származó sugárzás okozta sugárterhelés átlagos éves mértéke	192
2.16. II.13. táblázat. Néhány az orvosi tevékenységgel kapcsolatos sugárterhelés átlagos nagysága	192
2.17. II.14. táblázat. Különböző fajok félhalálos dózisa	203
2.18. II.15. táblázat. A legfontosabb szövettípusok sugárérzékenysége alapján felállított sorrendje	204
3.1. III.1. táblázat. Az egyes értípusok adatai (a nagyvérkörben): átmérő, hossz, ágak száma, az ágak összkétszámát és a bennük folyó vér átlagos áramlási sebessége	211
3.2. III.2. táblázat. Néhány anyag viszkozitása	214
3.3. III.3. táblázat. Néhány anyag diffúziós együtthatója 20 °C-on.	233
3.4. III.4. táblázat. A termodinamikai rendszer fő típusai	253
3.5.	254
3.6. III.5. táblázat. Az eddig megismert transzportfolyamatok jellemzői	255
3.7. III.6. táblázat. A leggyakrabban használt termodinamikai potenciál-függvények és legfontosabb jellemzőik	273
3.8. III.7. táblázat. Tipikus ionkoncentrációk néhány sejttípus esetében	286
3.9. III.8. táblázat. A nyugalmi potenciál mért ($U_{mért}$) és számított értékeinek összevetése két sejttípus esetében (mV-ban megadva): U_{GHK} a GHK-egyenlet alapján számított nyugalmi potenciál, $U_0(Na^+, K^+, Cl^-)$, indexszel) az egyensúlyi potenciál a III.7. táblázat adataival a Nernst-egyenlet alapján, 25 °C-on számolva	287
4.1. IV.1. táblázat. A receptorok osztályozása	303
4.2. IV.2. táblázat. Példák receptorokkal kapcsolatos fogalmakra és kapcsolataikra	304
4.3. IV.3. táblázat. A Weber-tört értékei különböző érzékelések esetén	307
4.4. IV.4. táblázat. A különböző modalitásoknak megfelelő hatványkitevő (n) értékek	308
4.5. IV.5. táblázat. Relatív intenzitások és intenzitás szintek	331
4.6. IV.6. táblázat. Különböző forrásból származó hangok hangosság szintje és hangossága	355
6.1. VI.1. táblázat. Néhány tipikus rezgési frekvenciaérték	430
6.2. VI.2. táblázat. Néhány sejttalkotó molekula fluoreszcencia paramétere	440
6.3. 1. táblázat. Néhány pH-érzékeny festék spektrális tulajdonsága	442
6.4. 2. táblázat. Néhány kalciumérzékeny festék spektrális tulajdonsága	442
6.5. VI.3. táblázat. Néhány fehérje jelölésére használt festék spektrális tulajdonsága	461

7.1.	493
8.1. VIII.1. táblázat. A sugáryengítési együttható függése az anyag rendszámától és tömegszámától	575
8.2. VIII.2. táblázat. Néhány szövet standard denzitásértéke Hounsfield-egységekben	579
8.3. VIII.3. táblázat. PET-vizsgálatokra használt néhány β^+ -sugárzó izotóp és fő tulajdonságaik ..	582
8.4. VIII.4. táblázat. Nem konvencionális β^+ -emittáló izotópok és néhány tulajdonságuk	583
8.5. VIII.5. táblázat. Néhány PET-vizsgálatokra használt jelzőmolekula és klinikai jelentősége ..	584
9.1. IX.1. táblázat. A CO ₂ és a Nd:YAG (Neodímiiummal szennyezett Yttrium-Aluminium-Gránát) lézerek összehasonlítása	593
9.2. IX.2. táblázat. A nagyfrekvenciás hőterápiában szokásos eljárások	614
10.1. X.1. táblázat Az ESI- és MALDI-módszert használó tömegspektrométerek lehetőségeinek összehasonlítása	679

1. fejezet - I. rész – Az „élő” anyag legfontosabb szerkezeti tulajdonságai és szerepük a biológiai funkciókban

Mielőtt valóban rátérnénk az „élő” anyag tanulmányozására, összefoglaljuk azokat a korábban nagyrészt már tanult szerkezeti alapismereteket, amelyek az „élő” és élettelen anyagokra egyaránt érvényesek. Ezeket az ismereteket az egyszerűbb szerkezetű anyagok vizsgálatán keresztül nyerték, de innen kell elindulnunk akkor is, ha a rendkívül bonyolult élővilágról akarunk képet alkotni. Annak igazolására, hogy ez az elképzelés nem újkeletű, elolvashatjuk például Grósz Emil szemészprofesszor (31 éven át a pesti szemklinika vezetője) 1902-ben megfogalmazott, az előbbiekkal egybecsengő írását (lásd I.1. idézet).

I.1. idézet: „A fizika tanításának az orvos jelöltek tanulmányai sorában kettős feladata van: az egyik az, hogy a leendő orvost, kinek feladata lesz az emberi élet annyira bonyolódott tünetmentes körében magának tudományos véleményt alkotni, s e szerint cselekedni, **előkészítse erre a tudományos gondolkodásra az élettelen világnak sokkal egyszerűbb problémái körében**, hogy őt a megfigyelésre és a kísérletekre alapított okoskodás módjára tanítsa és egyrészt a tapasztalatból, másrészt az elméletből vont következtetés óvatos kritikájára szoktassa.”

Grósz Emil (1865–1941): Az orvosképzés új rendje (1902)

1. I/1. Az atom szerkezete

1.1. I/1.1 A mai atomképhez vezető út főbb állomásai

1.1.1. I/1.1.1. Atom, elektron, atommag

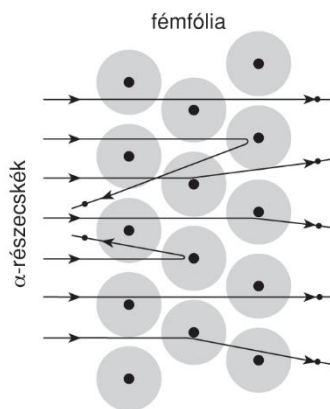
Az anyag felépítésével kapcsolatban az első fontos gondolat, nevezetesen hogy **az anyag atomos szerkezetű** először i. e. 400 körül merült fel és az elképzelés Démokritosz (i. e. kb. 460–370) görög filozófus nevéhez fűződik. Ezt követően több mint 2000 évig nem történt lényeges előrehaladás ezen a területen.



Démokritosz, Dalton

1803-ban John Dalton (1766–1844) angol fizikus és kémikus a kémiai reakciók súlyviszony-törvényei alapján megalkotta atomelméletét. Ennek lényege, hogy egy–egy elem azonos atomokból épül fel. Ezen túlmenően a különböző anyagok legkisebb egységei (mai kifejezéssel élve a szervesetlen molekulák) csak néhány atomból állnak. Csaknem száz évvel később, 1897-ben Joseph John Thomson (1856–1940) angol mérnök, matematikus és fizikus felfedezte az **elektront** (1906, Nobel-díj). Katódsugárcsővel végzett kísérleteiből arra következtetett, hogy a katódsugár olyan részecskékből áll, amely részecskék azonosak, bármilyen elemet is használunk katódként vagy töltőgázként. Így tehát **ez a részecske minden elem atomjának alkotórésze**. Nem sokkal ezután meghatározták az elektron töltését (e), majd tömegét (m_e) is, amelyről kiderült, hogy több mint három nagyságrenddel kisebb, mint a legkisebb atom, a hidrogénatom tömege. Thomson az atomot úgy képzelte el, hogy az az atom egész térfogatát kitöltő pozitív töltésű, egyenletes eloszlású, folyadékszerű részből és az ebbe beágyazott igen kis méretű, negatív töltésű elektronokból áll („mazsolás puding” modell).

Ezt a képet cáfolták meg Ernest Rutherford (1871–1937) (Új-Zélandon született, de főként Angliában tevékenykedő fizikus) és munkatársai 1909 és 1911 között végzett kísérletei. Az atom szerkezetének felderítése érdekében α -részecskéket, azaz elektronjaiktól megfosztott He-atomokat bocsátottak át vékony fémfólián. Azt találták, hogy míg az α -részecskék zöme csak kis eltérést szenvedett a hártán való áthaladáskor, addig egy igen kis hányaduk valóságosan visszapattant. Ebből arra következtettek, hogy az addig feltételezett egyenletes anyageloszlással szemben az atom tömegének legnagyobb része egy, az atom teljes térfogatához képest igen kis méretű, pozitív töltéssel ellátott magban van koncentrálnva, az atom túlnyomó része pedig „üres” (I.1. ábra). **Rutherford elképzelése szerint az atom parányi naprendszerhez hasonló:** középen helyezkedik el az **atommag**, körülötte az elektronok bolygók módjára keringenek.



I.1. ábra. Rutherford szórás kísérlete. Az atomokat bombázó α -részecskék csak ritkán kerülnek szembe atommaggal

Rutherford atommodelljével kapcsolatban felmerülő alapvető probléma az, hogy egy ilyen atom nem lehet stabil. A keringő elektronok ugyanis állandóan gyorsulnak (centripetális gyorsulásuk van), a gyorsuló töltések pedig – akár a rezgő töltések a rádióadók antennájában – sugároznak (elektromágneses sugárzást bocsátanak ki), ami energiavesztéssel jár. Ennek eredményeképpen a negatív elektronok igen rövid idő alatt a pozitív atommagba zuhannának.

1.1.2. I/1.1.2. Az energiakvantum közvetlen bizonyítéka

1914-ben James Franck (1882–1964) és Gustav Ludwig Hertz (1887–1975) német fizikusok kisnyomású higanygőzzel töltött speciális elektroncsövet szerkesztettek és ezzel vizsgálták az elektronok és a Hg-atomok ütközését (lásd a „*Franck–Hertz-kísérlet*”).

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



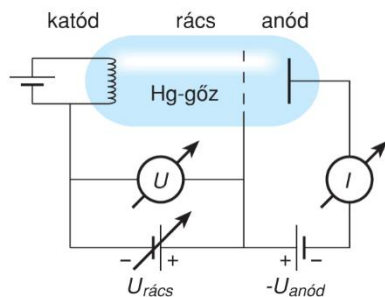
Franck és Hertz

Franck–Hertz-kísérlet

Az 1. ábrán látható kisnyomású Hg-gőzzel töltött elektroncsőben a katód és az anód között egy harmadik, lyukacsos dróthálóból készült elektróda is van, amelyet rácsnak nevezünk. A katódot egy feszültségforrás segítségével izzítjuk. A magas hőmérséklet hatására a katódban lévő elektronok közül sok akkora energiára tesz szert, hogy szabaddá válva kilép a katódból (ez az ún. termikus emisszió, lásd I/3.1.2.b).

A kilépő elektronokat a katód és a rács közé kapcsolt $U_{\text{rács}}$ pozitív rácsfeszültség felgyorsítja. A tehetetlenség miatt jelentős részük továbbrepülve túljut a lyukacsos rácson is. A rács és az anód közé kapcsolt $-U_{\text{anód}}$ kis negatív anódfeszültséggel ellentert hozunk létre, amelytől a rácson átrepülő elektronok lassulni kezdenek, tehát mozgási energiájukat fokozatosan elvesztik. Az anódot csak azok az elektronok érhetik el, amelyek E_k kinetikus energiája fedezi az ellentér legyőzéséhez szükséges $eU_{\text{anód}}$ munkát azaz amelyekre $E_k \geq eU_{\text{anód}}$ teljesül.

A kísérlet során növekvő $U_{\text{rács}}$ és állandó kis $-U_{\text{anód}}$ mellett mérték az I anódáramot. A 2. ábrán bemutatott eredmény szerint az U gyorsító feszültség növekedtével kezdetben az I áram is monoton nő. Azonban egy kritikus U^* feszültségértéknél az áram csökkenni kezd, majd egy lokális minimum elérése után I ismét növekszik. U^* egész számú többszöröseinél hasonló áramesések figyelhetők meg.



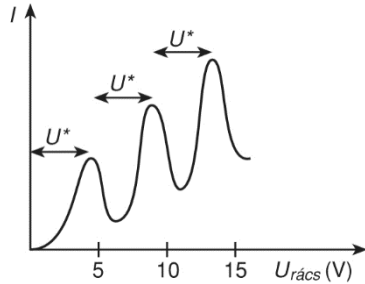
1. ábra

Ezt az érdekes jelenséget a következőképpen lehet megmagyarázni: egy $U_{\text{rács}}$ feszültséggel gyorsított elektron a pozitív rács felé tartva sokszor ütközhet Hg- atomokkal, de amíg ez a feszültség kisebb egy kritikus értéknél

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

($U_{\text{rács}} < U^*$), addig az ütközések rugalmasak és az elektron energiavesztés nélkül – úgy, mint egy labda a merev falról – lepattan a csaknem 400 ezerszer nagyobb tömegű Hg-atomokról. Így növekvő $U_{\text{rács}}$ mellett a kis fékező tér ($-U_{\text{anód}}$) ellenére is egyre több elektronnak sikerül eljutnia az anódra, tehát nő az I anódáram.

Amikor $U_{\text{rács}}$ eléri a kritikus értéket ($U_{\text{rács}} = U^*$), és a felgyorsított elektron már megfelelően nagy energiával (eU^*) rendelkezik, az ütközés rugalmatlanná válhat, melynek során az elektron átadja energiáját az egyik Hg-atomnak. Emiatt az energiájuktól megfosztott elektronok nem lesznek képesek az ellentéren ($-U_{\text{anód}}$) át az anódra jutni, tehát az anódáram csökkenni kezd.



2. ábra

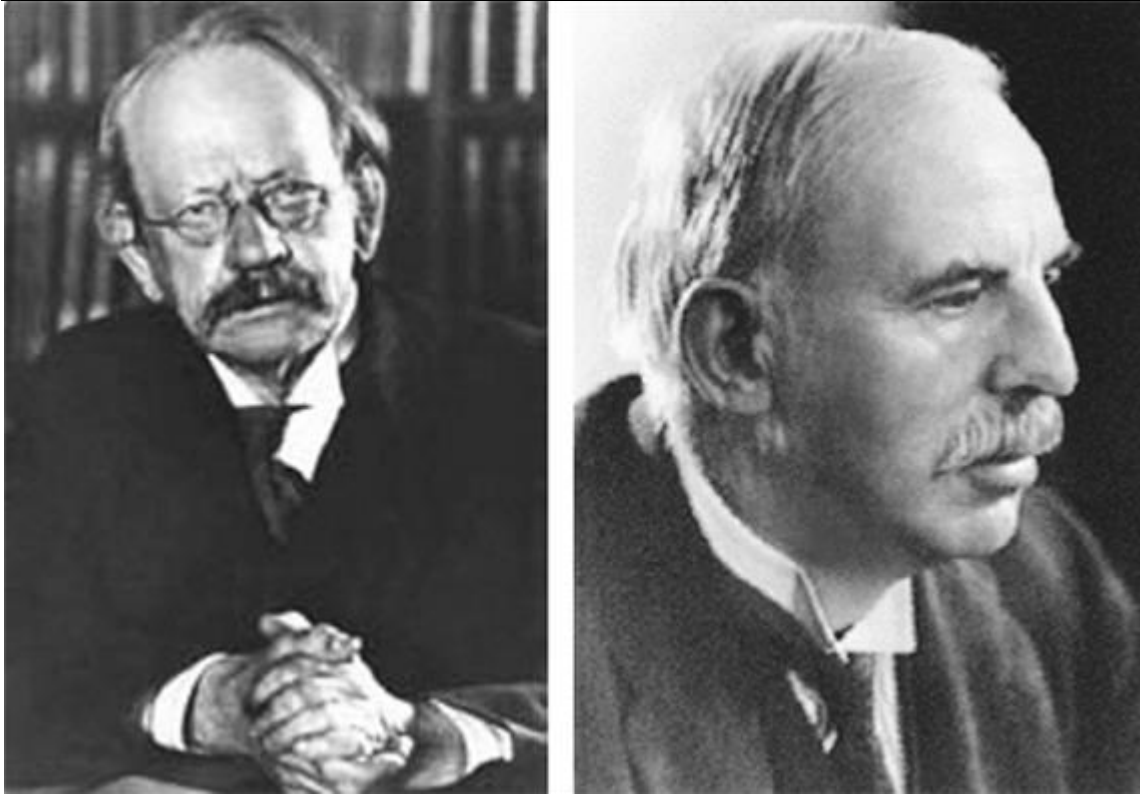
Ha az $U_{\text{rács}}$ rácsfeszültséget tovább növeljük, akkor az elektronok az átadható eU^* energiát már a rács előtt elnyerik, és ha ilyenkor ütköznek rugalmatlanul egy Hg-atommal, rögtön el is vesztik azt. Ezután azonban újra elkezdhetnek gyorsulni, hisz az ütközés a rács előtt történt és elegendő energia elnyerése esetén eljuthatnak az ellentéren ($-U_{\text{anód}}$) keresztül az anódra, az áram tehát ismét nőni fog. U^* egész számú többszöröseinél az elektronok a katód és a rács között egymás után többször is összegyűjthetik az átadáshoz szükséges energiát.

A „magányos” Hg-atom nem képes – az elektronok által szállított – akármekkora energia felvételére, **energiája** tehát folytonosan nem, hanem **csak meghatározott adagokban, kvantumokban változhat**. Ebből eredt később a kvantummechanika elnevezés. (Azt, hogy az „atom energiája” pontosan mit takar, nem lehetett tudni, de az atomnak mint egésznek a mozgási energiájától ebben az esetben eltekintünk).

Korábban már több megfigyelt jelenség utalt arra (ilyen volt például az atomok vonalas színe is), hogy bizonyos esetekben az energia kvantált, azaz csak meghatározott adagokban változhat. Közvetlen bizonyítékot azonban csak a Franck–Hertz-kísérlet szolgáltatott erre a hipotézisre (1925, Nobel-díj).

Bár az élesen elkülönülő **atomi állapotok ténye** szintén **ellentmond Rutherford atommodelljének**, egy évvel a fenti kísérlet elvégzése előtt, 1913-ban, Niels Bohr (1885–1962) dán fizikus sikeres kísérletet tett arra, hogy az atom diszkrét energiaállapotait kombinálja Rutherford elképzelésével. Munkája eredményeként sikerült magyarázatot adnia a hidrogénatom vonalas színeképe (1922, Nobel-díj). (Bohr munkássága mai szemmel nézve zsákutcának bizonyult, de kortársaira gyakorolt hatása miatt mégis nagy jelentőségű, így megemlítésétől nem tekinthetünk el.)

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



J.J. Thomson és E. Rutherford

Bohr feltette, hogy az atom elektronjai csak bizonyos kiválasztott pályákon keringhetnek az atommag körül. Ezeket meg is számozhatjuk (1, 2, ..., j, ...). Az ilyen pályán keringő elektron nem sugároz, tehát energiája állandó ($E_1, E_2, \dots, E_j, \dots$) (ez továbbra is ellentmond a korábbi ismereteknek). További feltevése szerint az atom csak akkor sugároz (tehát elektromágneses sugárzást, például fényt csak akkor bocsát ki), ha az elektron az egyik pályáról egy másikra átugrik (ami szintén nem lehetséges, ha egyszer az elektron nem tartózkodhat a két megengedett pálya között).

Ha mégis elfogadjuk ezeket az alapfeltevéseket, továbbá azt, hogy az átmenet során kisugárzott fény frekvenciáját (f -t) a

$$hf = E_m - E_i$$

(I.1)

összefüggés egyértelműen megszabja (ahol $E_m > E_i$ a két pályához tartozó energia, h pedig a Planck-állandó), akkor a tapasztalattal megegyező eredményekhez jutunk.



Bohr és De Broglie

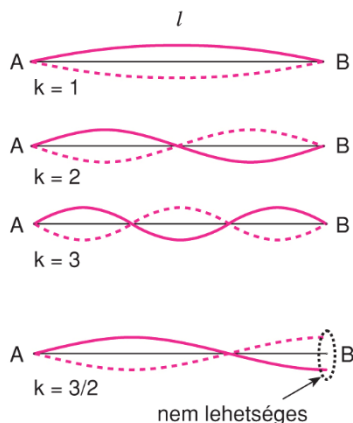
1.1.3. /1.1.3. Az elektron mint hullám

A kvantumos viselkedés - azaz valaminek a nem folytonos változása - valójában régóta ismert. Az anyag atomos felépítése mellett példaként megemlíthetjük azt, hogy egy kifeszített húron is csak olyan állóhullámok alakulhatnak ki, amelyeknél a húr hossza (l) a hullámhossz felének ($l/2$) egész számú többszöröse (I.2. ábra), azaz

$$l = k \frac{\lambda_k}{2}, \quad (k = 1, 2, \dots),$$

(I.2)

hiszen a húr két vége rögzített és emiatt mindig nyugalomban van. Így az (I.2) egyenlőség egyfajta „kvantumfeltételként” is felfogható. A múltba visszatekintve megfigyelhetjük, hogy **a folytonos és diszkrét változások** különböző rendszerek esetén **jól megfértek egymás mellett**, a kettősség megléte ilyen formában nem jelentett problémát.



Louis Victor de Broglie (1892–1978) francia fizikus 1923-ban éppen a húr példáján felbuzdulva állt elő azzal az ötlettel, hogy az elektron diszkrét atomi állapotait hullámjelenségként írja le (1929, Nobel-díj). Gondolatait a

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

fénnyel kapcsolatban már korábban megszerzett ismeretekre alapozta, nevezetesen arra, hogy a fénnyel hullám és a fénnyel részecske (foton) elképzelés, egymás mellett létező, többoldalú megközelítésre ad lehetőséget (lásd II/2.1.8.) Az elektronnak az impulzusa (p) (tömege (m_e) és sebessége (v) ismeretében) meghatározható: $p = m_e v$. De Broglie a p impulzusú elektronhoz az alábbi módon rendelt hullámhosszat:

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

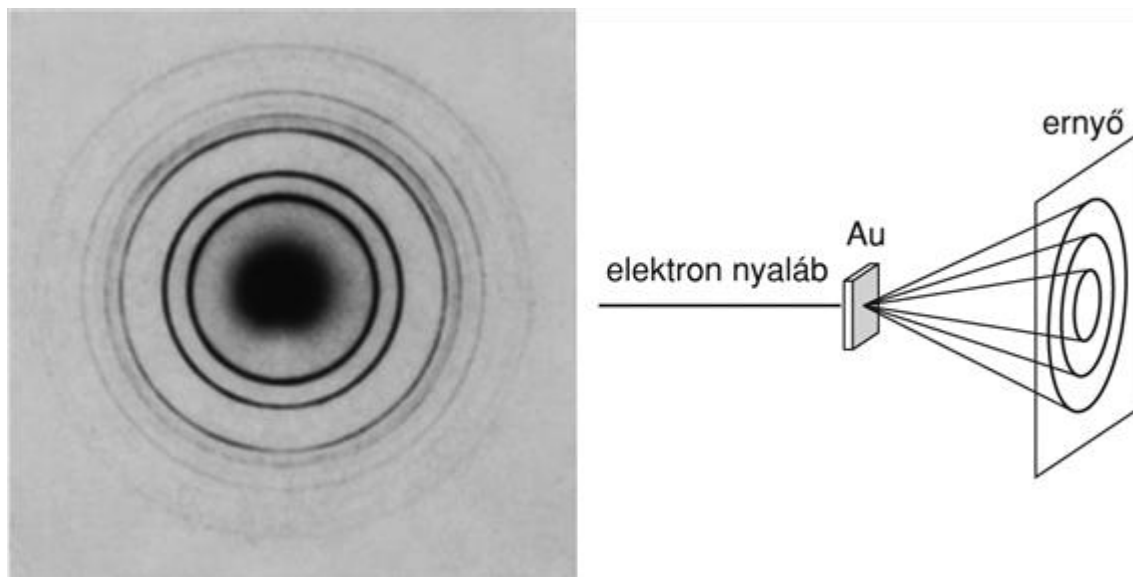
I.2. ábra. A kifeszített húron kialakuló állóhullámok. Néhány lehetséges rezgési állapot szemléltetése, $k = 1, 2, 3$.

(I.3)

ahol λ az elektronhoz tartozó ún. **anyag hullám** hullámhossza, h pedig a Planck-állandó.

Ugyanezen a nyomvonalon haladt tovább Ervin Schrödinger (1887–1961) osztrák fizikus, aki 1926-ban felírta a **feltételezett elektronhullám terjedési törvényét** is (Schrödinger-egyenlet, hullámegyenlet). Az általa használt $\psi(x,t)$ hullámfüggvény megadja az elektronhullám helytől és időtől függő „amplitúdóját”. Schrödinger nem törődött azzal, hogy ennek van-e fizikai értelme, az elektront kiterjedt, folytonos töltéshelvének képzelte, amely a tér minden pontjában egyértelmű, ψ^2 -tel arányos töltéssűrűséggel bír. Egyenletének speciális megoldásaiból az derült ki, hogy az atommag körül elektron-állóhullámok alakulhatnak ki, és az ezekhez tartozó kiszámított energiák, ill. energiakülönbségek jól egyeznek a megfigyelt értékekkel (1933, Nobel-díj).

A De Broglie által, illetve a Schrödinger-egyenletben is feltételezett elektronhullám valódi létezése 1927-ben vált bizonyossá. Először Clinton Joseph Davisson (1881–1958) és Lester Halbert Germer (1896–1968) amerikai fizikusok, majd egy évvel később Georg Paget Thomson (1892–1975) angol fizikus nagy sebességű **elektronokkal** vékony fémhártyán, illetve kristályokon **idézett elő interferenciát**, ami egyértelmű bizonyítéka a hullámtulajdonságnak (I.3. ábra) (lásd még II/2.1.4.). Az elektron hullámtermészetének kimutatásáért Davisson és G.P. Thomson 1937-ben közösen kaptak Nobel-díjat. Tudománytörténeti érdekességként szokták emlegetni, hogy G.P. Thomson annak a J.J. Thomsonnak a fia, aki 40 évvel korábban az elektront mint részecskét felfedezte.



I.3. ábra. Nagy sebességű elektronok aranyfólián történő elhajlása. (Kísérleti elrendezés és elhajlási kép.)

Említettük, hogy korábban önmagában az a tény, hogy vannak folytonos és diszkrét változások, nem jelentett semmilyen nehézséget az egyes jelenségek megértésében. Most azonban ugyanarról az objektumról, nevezetesen az elektronnól szól a két ellentétes állítás: egyrészt oszthatatlan és kis kiterjedésű, mikroszkopikus részecske, másrészt az egymástól makroszkopikus távolságban lévő részletekről is „tudomást szerző” hullám. Úgy tűnik, ez a „kép” az eddigi fogalomvilágunkkal összeegyeztethetetlen, ezért kevésbé valószínű, hogy hagyományos értelemben bárki is el tudná képzelni (lásd I.2. idézet).

Interferenciajelenséget nemcsak elektronokkal, hanem mindenfajta más részecskékkel, például neutronokkal, de egész atomokkal is létrehozta. Így azt mondhatjuk, hogy ez a **kettősség (dualitás) az anyag általános jellegzetessége.**



I.2. idézet: „A kentaur lónak ember, embernek ló. Csak a kentaurra hasonlít igazán. De végül is meg tudjuk mondani, hogy milyen.

Az elektron golyónak hullám, hullámnak golyó. Csak az elektronhoz hasonlít igazán. De az elektronnól, úgy tűnik, lehetetlen megmondani, hogy milyen.

Nem az a baj, hogy az elektron nem hasonlít semmilyen korábban megismert dologhoz, hanem az, hogy a létezése logikai képtelenségnek tűnik.”

Károlyházi Frigyes: Igaz varázslat (Gondolat, 1976)

1.2. I/1.2. Az elektron viselkedésének matematikai megfogalmazása

Az előzőekben azt érzékeltettük, hogy az elektronnal kapcsolatos jelenségeket meglehetősen nehéz elképzelni. Az alábbiakban röviden áttekintjük, hogy ezt a különös viselkedést hogyan lehet mégis leírni.

1.2.1. I/1.2.1. A szabad elektron terjedési törvénye

Szabad az elektron például akkor, amikor egy elektroncső katódjából kilép. Induljunk ki abból, hogy Newton első törvénye szerint **erőmentes esetben** minden test megőrzi mozgásállapotát, ami azt jelenti, hogy a test sebessége nem változik. Az egyszerűség kedvéért tételezzük fel azt, hogy vizsgálataink során a mozgás koordináta-rendszerünk x tengelye mentén történik, és erők nem hatnak a testre. Ha ilyenkor ismerjük a test helyzetét (x) és sebességét (v) (állapotát illetve mozgásállapotát) egy $t = 0$ időpillanatban, akkor bármilyen t^* idővel későbbi időpillanatban is meg tudjuk azt mondani. A klasszikus mechanikában a test helyzetét például a tömegközéppontjának koordinátájával adhatjuk meg (I.4a. ábra). Így a kezdeti állapotra, mozgásállapotra vonatkozó (x_0, v_0) adatpárból t^* idő múlva az (x_{t^*}, v_{t^*}) adatpárt nyerjük, ahol

$$x_{t^*} = x_0 + vt^*, \quad \text{és} \quad v_{t^*} = v_0 = v.$$

Davisson és Germer

(I.4)

Az összefüggés alapján a klasszikus mechanikában tehát minden időpillanatban meghatározható, hogy hol van a test (x_i) és mekkora a sebessége (v_i).

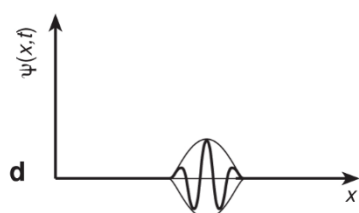
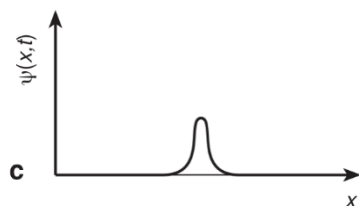
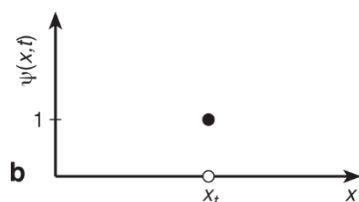
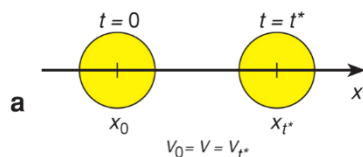
Gondoljunk végig most egy másik megközelítést. Ebben **az elektron állapotát** egy adott időpillanatban a klasszikus (x, v) adatpár helyett **egy olyan $\psi(x,t)$ függvénnyel adjuk meg**, amelyben kifejezésre jut mind a helyre, mind a sebességre vonatkozó információ. Próbálkozhatnánk egy olyan egyszerű függvénnyel, amelyik mindenhol zérus, kivéve az x_i helyet, ahol mondjuk $\psi(x_i,t) = 1$ (I.4b. ábra). Ez azonban matematikailag nehezen kezelhető, és a sebességről nem árul el semmit. Legyen ezért $\psi(x,t)$ olyan, hogy ne csak egyetlen pontban különbözzön zérustól, hanem fokozatosan mindkét oldalon simuljon bele az x tengelybe (I.4c. ábra). Eszerint **az elektron ott „van”, ahol $\psi(x,t)$, sebességét**, pontosabban a $p = mv$ impulzusát (ahol m az elektron tömege) **pedig $\psi(x,t)$ függvény „alakja” adja meg.**

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

Az I.4c. ábrán $\psi(x,t)$ olyan, mint egy hullámhegy, ha ezt tovább általánosítjuk, akkor az I.4d. ábrán látható **hullámcsoporthoz** is nevezhető függvényhez juthatunk, amelyre már értelmezhető a hullámhossz fogalma. Így $\psi(x,t)$ az impulzust (p), illetve a sebességet ($v = p/m$), a De Broglie-féle anyaghullámnál szerzett ismeretünkkel (I/1.1.3.(I.3)) összhangban a hullámhossz segítségével adja meg, azaz

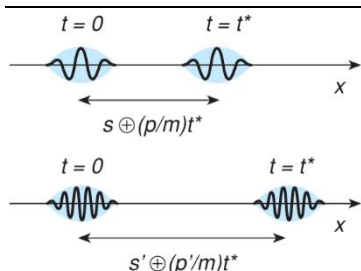
$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \text{ahol } h \text{ a Planck-állandó} \quad (\text{I.5})$$

Az I.4d. ábrán megadott $\psi(\mathbf{x},t)$ már alkalmas arra, hogy az elektron helyét és impulzusát klasszikus szemléletünkhöz képest ugyan furcsa módon, de magában foglalja. Mivel $\psi(x,t)$ **az elektron állapotát jellemzi, ezért állapotfüggvénynek nevezzük.**



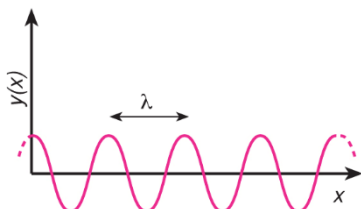
I.4. ábra. Egy lehetséges gondolatsor a klasszikus mechanikai „mozgásállapottól” a kvantummechanikai állapotfüggvényig. a) Mozgásállapot a klasszikus mechanikában. b) A hely megadása „mesterkél” függvénnyel. c) A hely „megadása” függvénnyel. d) A hely és a sebesség együttes „megadása”, az elektron állapotfüggvénye, $\psi(x,t)$. (A burkoló görbe természetesen nem része ψ -nek).

Az idő múlásával $\psi(x,t)$ -nek az a része, ahol zérustól különbözik - tehát ami a helyet adja meg - arrébb kell hogy kerüljön, hiszen, ha egy m tömegű testnek p impulzusa van, akkor helyét $v = p/m$ sebességgel változtatja (I.5. ábra). Az „elmozdulás” $s \approx vt$.



I.5. ábra. Az elektron lassúbb, illetve gyorsabb „terjedése”. (I.5) szerint kisebb λ -hoz nagyobb impulzus és így nagyobb sebesség is tartozik

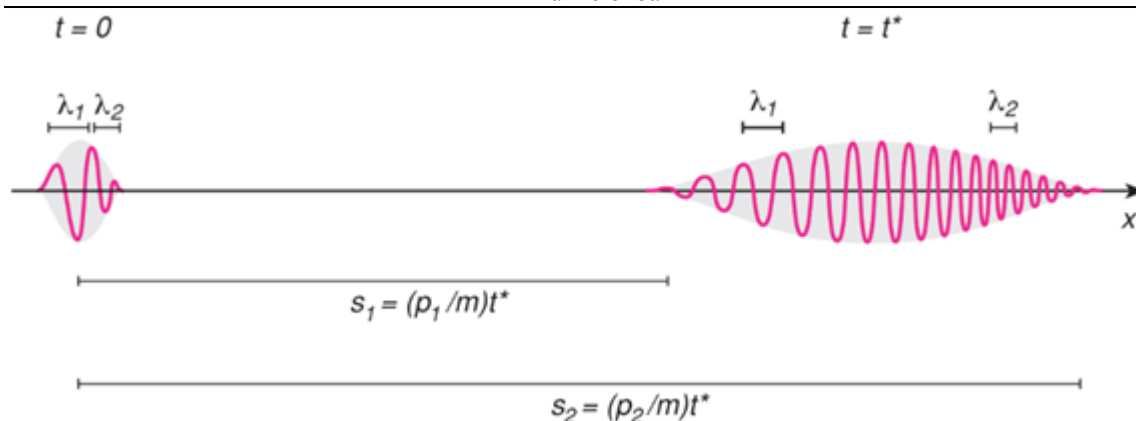
Nagyjából ez lenne akkor az elektron terjedési törvénye is az erőmentes esetben? Nem, mert egy lényeges dolgot nem vettünk figyelembe: nevezetesen azt, hogy miként a hely nem határozható meg egyetlen számértékkel (hiszen $\psi(x,t) \neq 0$ nemcsak egyetlen pontban teljesül), ugyanúgy az impulzus sem. Egyértelmű hullámhossz ugyanis csak periodikus függvény esetén adható meg, ami azt jelenti, hogy periódusonként ismétlődően a függvényérték ugyanakkora ($y(x) = y(x + \lambda)$ minden x -re) (I.6. ábra).



I.6. ábra. Csak az „igazi” periodikus függvény esetében adható meg egyértelmű hullámhossz



$\psi(x,t)$ valójában nem periodikus függvény, ezért egyértelmű hullámhosszal nem jellemezhető. Ilyenkor megadhatunk egy körülbelüli „legnagyobb”, illetve „legkisebb” hullámhosszat (l_1, l_2), amely hullámhosszak által határolt intervallumon belül (többé-kevésbé egyforma „joggal”) bármelyik λ értékkel jellemezhető a hullámcsoport. Így az (I.5) összefüggés alapján megadhatjuk a „legkisebb”, illetve „legnagyobb” impulzust (p_1, p_2), valamint az ezekhez tartozó sebességeket ($v_1 = p_1/m, v_2 = p_2/m$) is. Ha a hullámcsoport sebessége egyformán jellemezhető a körülbelül v_1 -től v_2 -ig terjedő értékek bármelyikével, akkor az is eldönthetetlen, hogy t^* idő alatt a hullámcsoport „elmozdulása” s_1, s_2 vagy valamilyen közbülső érték. Az ellentmondás csak úgy oldható fel, ha azt mondjuk, hogy az „elmozdulás” nem lehet s_1 , sem s_2 , sem egy közbülső érték, hanem mindegyik, amiből az következik, hogy $\psi(x,t)$ **a terjedés közben szétterül** (I.7. ábra). Mivel a sebesség és emiatt a körülbelüli hullámhossz is ($\lambda = h/(mv)$) változatlan, ezért $\psi(x,t)$ kiszélesedése csak úgy mehet végbe, hogy a görbén új hullámhegyek és hullámvölgyek jelennek meg. Ez az új terjedési törvény. Nagyjából így terjed az elektron, például a katódsugárcsőben az anód és az ernyő közötti térben.



1.2.2. I/1.2.2. A Heisenberg-féle határozatlansági reláció

Láthatjuk, hogy $\psi(x,t)$ önmagában teljesen határozott, egyértelmű függvény, de az általa hordozott információ egy része – például, ami az „elektron” helyére és impulzusára vonatkozik – határozatlan.

A hely körülbelüli határozatlansága (Dx) $\psi(x,t)$ grafikonjából közvetlenül leolvasható. Dx az állapotfüggvény térbeli kiterjedése, az a tartomány, ahol $\psi(x,t)$ már észrevehetően eltér az x tengelytől (az I.5. és I.7. ábrákon a kék, ill. szürke terület hossza az x tengely mentén).



I.7. ábra. Az „elektron” terjedési törvénye: $\psi(x,t)$ a terjedése közben szétterül. Erőmentes esetben a hullámcsoport sebessége és emiatt a körülbelüli hullámhossza is változatlan: az „előresiető” fele inkább a λ_2 , a „lemaradó” fele pedig inkább a λ_1 hullámhosszal jellemezhető

Az impulzus körülbelüli határozatlanságának (Dp) becsléséhez az (I.5) összefüggés alapján $1/\lambda$ határozatlanságát kellene megbecsülnünk (lásd „Néhány gondolat $1/\lambda$ határozatlanságának becslésével kapcsolatban”).

Az $1/\lambda$ határozatlanságát az szabja meg, hogy milyen hosszú hullámvonulatot (L) veszünk figyelembe a becsléskor. A $\psi(x,t)$ állapotfüggvényről azonban tudjuk, hogy a térbeli kiterjedése Dx , ami ugyan lehet

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

makroszkopikus nagyságú, de mindig véges érték. Így azt L soha meg nem haladhatja, tehát $L \leq Dx$. Emiatt $1/\lambda$ hibája sem lehet tetszőlegesen kicsi. Ezt figyelembe véve:

$$\Delta \frac{1}{\lambda} \approx \frac{1}{L} \geq \frac{1}{\Delta x}$$

Schrödinger és Heisenberg
(I.6)

Ha a Planck-állandóval (h -val) megszorozzuk az egyenlőtlenség mindkét oldalát, majd az (I.5) összefüggés ($p = h/\lambda$), figyelembevételével átrendezzük, akkor azt kapjuk:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq h.$$

(I.7)

Ez az összefüggés a Heisenberg-féle határozatlansági reláció egyik megfogalmazása (Werner Heisenberg 1901–1976, német fizikus; 1932 Nobel-díj): a hely és impulzus határozatlanságának szorzata tetszőleges mértékben nagyobb lehet, mint a Planck-állandó, de kisebb sohasem. Ez azt jelenti, hogy **minél pontosabban meghatározott az elektron helye (x), annál kevésbé meghatározott az impulzusa (p) és fordítva.**

Az (I.7) összefüggés sok más gondolkísérlettel és egzaktabb módon is megalapozható, továbbá általánosítható minden olyan változó párra, amely *hely-impulzus* (? *hely-tömeg-sebesség*) dimenziójú. Így például az SI mértékegységeket alapul véve csupán dimenzióanalízis elvégzése után:

$$\left[(\text{m})(\text{kg})\left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right) \right] = \left[(\text{m})\left(\frac{\text{kgm}}{\text{s}^2}\right)(\text{s}) \right] = [(\text{m})(\text{N})(\text{s})] = [(J)(\text{s})]$$

(I.8)

az *energia-idő* esetére is megadható a határozatlansági reláció:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h.$$

(I.9)

A (I.7) és (I.9) összefüggéseket a későbbiek során még többször is alkalmazzuk, ez utóbbit például a spektrumvonalak szélességének meghatározásánál (lásd II/2.2.7. rész).

Néhány gondolat $1/\lambda$ határozatlanságának becslésével kapcsolatban

Először azt gondoljuk meg, hogy hogyan mérünk szívfrekvenciát („pulzusszámot”), azaz a szív ciklus periódusidejének reciprokát ($f = 1/T$, ami általában törtszám). A legegyszerűbben úgy, hogy megszámláljuk a t (például egypercnyi) idő alatti szívdobbanások számát, n -t (0-ról kezdve). Mivel „tört dobbanások” nincsenek, ezért az n/t hányados mindig kisebb, mint a valódi érték, tehát a keresett frekvenciának egy alsó becslését adja. Ha viszont eggyel tovább számlálunk, akkor az $(n+1)/t$ hányados mindig nagyobb, mint a valódi érték, tehát azt felülről becsüli. Az igazi szívfrekvencia valahol a kettő között lehet, ezért a mérésünk körülbelüli hibája (bizonytalansága, határozatlansága):

$$\Delta t = \Delta \frac{1}{T} \approx \frac{n+1}{t} - \frac{n}{t} = \frac{1}{t}$$

Láthatjuk, hogy ha t -t egyre nagyobbra választjuk, a hiba csökkenni fog.

A hullámokra vonatkozó gondolkísérlet ugyanilyen eredményre vezet. Az egységnyi időre eső hullámok számát a periódusidő reciproka ($1/T = f$), azaz a frekvencia adja meg. Ennek mintájára, az egységnyi távolságra eső hullámok számát pedig a hullámhossz reciproka ($1/\lambda$), azaz a hullámszám adja meg. Így az előző gondolatmenetet felhasználva, ha L hosszúságú távolságra n -szer fér rá a λ , akkor n/L egy alsó, $(n+1)/L$ pedig egy felső becslést ad a hullámszámra. Az igazi érték ismét a kettő között lehet, ezért a körülbelüli hiba:

$$\Delta \frac{1}{\lambda} \approx \frac{n+1}{L} - \frac{n}{L} = \frac{1}{L}.$$

Itt is igaz, hogy L növekedtével $1/\lambda$ hibája csökken. Végtelen hosszú hullámvonulat esetén L is a végtelenségig nőhet, aminek következményeképpen $1/\lambda$, hiba nélküli, egyértelműen meghatározott értékű lehet.

Gondolatkísérlet

Képzeld el azt, hogy a Balaton partján a hullámzás frekvenciáját akarjuk meghatározni, ezért megszámláljuk azokat a hullámokat, amelyek egy perc alatt a partra érkezők. (Elvileg itt tört hullámokat is megkülönböztethetnénk, de mondjuk, hogy a hullám tényleges megérkezését a parthoz való csapódás zajával azonosítjuk.) Mivel órát nem vittünk magunkkal, ezért a viharjelző villogóját használjuk időmérésre (31 villanás jelent 1 percet). Mondjuk ez alatt az idő alatt 25 hullám érte el a partot, de a 31. villanás után közvetlenül, partot ért a 26. is. (Az előbb említettek szerint csak egész hullámokat tudunk jól megkülönböztetni, tört hullámokat nem.) Azt mondhatjuk tehát, hogy a hullámzás frekvenciája 25/perc és 26/perc között lehet, ezért a mérésünk körülbelüli hibája $Df \approx 1/\text{perc}$.

1.2.3. /1.2.3. A kötött állapotú elektron, atomi állapotok

Az eddigiekben csak a szabad elektron mozgását vizsgáltuk, azt is csak erőmentes esetben. Kérdés, hogy hogyan lehet leírni azokat az eseteket, amikor valamilyen erőhatást is figyelembe veszünk.

Tapasztalatból tudjuk, hogy a katódsugárcsőben, televízió-képcsőben a katódból kilépő, felgyorsított (szabad) elektronokat elektromos, illetve mágneses erőtér alkalmazásával el lehet téríteni eredeti mozgási irányuktól. Általánosságban azt mondhatjuk, hogy a bekapcsolt tér hatására az elektron a hatóerő irányában gyorsulni kezd. Ez az új fogalmaink között azt jelenti, hogy **az elektron állapotfüggvényét az erőtér a saját irányába tereli**. Mindemellett az impulzus határozatlanságából következően a terjedési törvény szétterülésre vonatkozó része is érvényben marad.

Az atombeli elektronállapotok esetében az elektronnak nincs elég energiája ahhoz, hogy a mag környezetét elhagyhassa. Ilyenkor az elektron **kötött állapotban** van.

Egyelőre csak a **hidrogénatommal** foglalkozunk, és további egyszerűsítő feltételeket is alkalmazunk. A valódi, bonyolult háromdimenziós mozgás tanulmányozása helyett most is csak az x tengely mentén vizsgálódunk. A protont klasszikus tömegpontként kezeljük, tehát az elektronnal ellentétben egyértelmű helye ($x = 0$), és klasszikus (Coulomb) erőtere van. Ez a közelítés az előzőek alapján meglepő, de megengedhető, hiszen a proton tömege körülbelül kétezerszer nagyobb az elektron tömegénél, ezért helyének határozatlansága is körülbelül ennyiszor kisebb. (A sokszor kritizált Rutherford modellből tehát annyit megőriztünk, hogy a kisméretű atommag szerepe az, hogy pozitív töltésével maga körül tartja a könnyű elektront.)

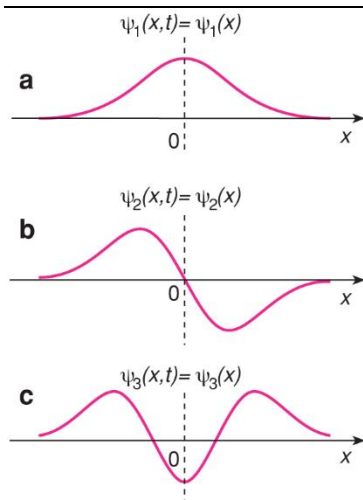
Az elektron állapotát ilyenkor az jellemzi, hogy a mag erőterének az állapotfüggvényt a mag felé terelő, összehúzó hatása és az állapotfüggvény szétterülése valamilyen dinamikus egyensúlyt tart fenn. A túl keskeny $\psi(x,t)$ esetében a szétterülés, a túl széles $\psi(x,t)$ esetében pedig az erőtér összeterező hatása dominálna. Ennek eredményeképpen időben állandó, **stacionárius** – tehát az **időtől** már **független**, az atommag helyzetére nézve szimmetrikusan elhelyezkedő, leginkább az I.2. ábrán látható, a kifeszített húron kialakuló állóhullámokra emlékeztető – függvényalakok, $\psi(\mathbf{x})$ -ek jöhetnek létre (I.8. ábra). Ily módon kibontakozhat előttünk a diszkrét, egymástól élesen elkülönülő, egyenként jól meghatározott atomi elektronállapotok világa.

1.3. /1.3. A kvantummechanika eredményei a legegyszerűbb atom esetében

Az I.8. ábrán látható görbék közül sok olyan érdekes információ olvasható ki, amely lehetőséget nyújt az elméleti leírás és a kísérleti eredmények összevetésére. A következőkben ezt a legegyszerűbb atomra, a H-atomra fogjuk megtenni. Bemutatjuk, hogy így választ kaphatunk például az alábbi kérdésekre:

Mekkora a hidrogénatom?

Mekkora lehet a kötött állapotú elektron energiája?



1.3.1. I/1.3.1. Diszkrét atomi energiaszintek, főkvantumszám

A H-atomban levő kötött állapotú elektron leírásához vizsgálódásunkat kezdjük a legegyszerűbb állapotfüggvénnyel, $\psi_1(x)$ -szel (I.8a ábra).

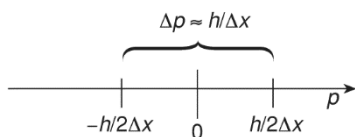
Ha az állapotfüggvény térbeli elhelyezkedését egyetlen adattal kellene jellemeznünk, akkor azt a proton helykoordinátájával adhatnánk meg ($x = 0$). Az adott állapotra vonatkozóan azonban sokkal fontosabb a hely határozatlansága, vagyis az állapotfüggvény körülbelüli szélessége, ami az atom kiterjedését, méretét jellemzi. Jelöljük ezt az egyelőre még ismeretlen adatot Δx -szel.

Ahhoz, hogy Δx nagyságát megbecsüljük, szükségünk van a mozgási és a helyzeti energia körülbelüli értékére ($E^{*kin.}$, $E^{*pot.}$). Számításunkhoz majd **azt a gondolatot használjuk fel, hogy az összenergia ($E^{*kin.} + E^{*pot.}$) várhatóan az „igazi” Δx közelében lesz minimális.** Feltételezhető ugyanis, hogy ekkora Δx mellett a $\psi_1(x)$ számára a további szétterülés, illetve az összehúzódás is spontán energianövekedéssel járna (lásd „Az összenergia becslése”).

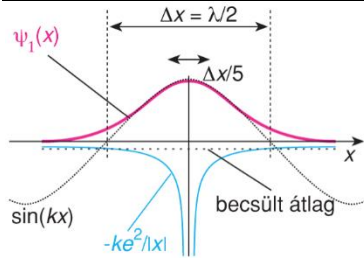
Az összenergia becslése

A **körülbelüli mozgási energia** ($E^{*kin.}$) becsléséhez az impulzusról szerzett ismereteinket használhatjuk fel, hiszen a mozgási energia általánosan felírható az impulzus segítségével $E_{kin.} = (1/2)mv^2 = p^2/2m$.

Ha az **impulzust** kellene egyetlen adattal jellemeznünk, első gondolatra ez a 0 lenne, hiszen az állapotfüggvény mozdulatlan. Ugyanakkor összhangban kell lennünk a korábbi (I.5) összefüggéssel ($p = h/\lambda$), ahol a λ -t hozhatjuk kapcsolatba a fent bevezetett Δx -el. Δx ugyanis a $\psi_1(x)$ -re illeszkedő körülbelüli félhullám hosszának felel meg. Így $\lambda \approx 2\Delta x$, tehát $p \approx h/2\Delta x$. Az ellentmondás úgy oldható fel, ha figyelembe vesszük, hogy az impulzus határozatlansága, $\Delta p \approx h/\Delta x$ most azt jelenti, hogy maga az impulzus egyenértékűen jellemezhető a $h/2\Delta x$ és a $-h/2\Delta x$ közé eső bármelyik értékkel, és ezek átlaga valóban 0-t ad eredményül (lásd 1. ábra). Láthatjuk tehát, hogy a $\psi_1(x)$ **állapotfüggvény időben állandó, mégis tartalmaz a mozgásra vonatkozó információt.**



A kötött állapotnak ezt a különös tulajdonságát a mozgási energian keresztül talán még jobban érzékelhetjük. Tudjuk, hogy a mozgási energia sohasem lehet negatív, ezért a $p = mv$ és a $p = -mv$ impulzushoz egyaránt $E_{kin.} = p^2/2m$ rendelhető. Így, ha az impulzus a $h/2\Delta x$ és a $-h/2\Delta x$ értékek között határozatlan, akkor ennek az a következménye, hogy a mozgási energia viszont a 0 és a $(h/2\Delta x)^2/2m = (1/2m)(h/2\Delta x)^2$ közötti értékek közül bármelyikkel egyformán jellemezhető. A **mozgási energia körülbelüli értéke** tehát a két szélső érték számtani közepe, azaz $E^{*kin.} = (h/2\Delta x)^2/4m = (1/4m)(h/2\Delta x)^2$.



A **helyzeti energiaátlagának** becslésekor több szempontot is figyelembe kell vennünk. A proton klasszikus, Coulomb erőterében a helyzeti energia a protontól mért távolság (x) függvényében $E_{pot.} = -ke^2/|x|$ alakban írható föl, ahol k a Coulomb-törvényből ismert arányossági tényező, e pedig az elemi töltés. **Ez a mennyiség a protontól távol csak kevéssé változik**, a proton közvetlen közelében viszont rohamosan csökken (2. ábra). (Dx -et az állapotfüggvényre legjobban illeszkedő szinuszfüggvény ($\sin(kx)$) segítségével adhatjuk meg. A helyzeti energia átlagát pedig a helyzeti energia függvénynek a $Dx/2$ helyen felvett értékével ($E_{pot.}(Dx/2)$) közelíthetjük.) Ez az a pont, ahol nem hagyhatjuk figyelmen kívül azt a tényt, hogy a valódi tér háromdimenziós. Ha a klasszikus képnek megfelelően az atomot $Dx/2$ sugarú gömbnek képzeljük, akkor azt kell megvizsgálnunk, hogy átlagosan milyen messze vannak a gömb belsejének pontjai a középponttól. A gömb sugarának például 1/5-én belül, ahol már jelentősen változna a helyzeti energia, a gömb térfogatának csupán kevesebb mint 1%-a található. Látható tehát, hogy **a csökkenő x -ek rohamosan csökkenő súllyal esnek latba** a helyzeti energia átlagának kiszámításánál.

Mindezek miatt a helyzeti energia átlagát abszolút értékben kissé alábecsülve $E_{pot.}^* = -ke^2/(Dx/2)$ -nek vehetjük (lásd 2. ábra), és így az **összenergia**:

$$E = E_{kin}^* + E_{pot}^* = \frac{1}{4m} \left(\frac{h}{2\Delta x} \right)^2 - \frac{2ke^2}{\Delta x}.$$

A minimum megkeresése előtt tekintsünk vissza és nézzük meg, hogyan módosul a kifejezés, ha nemcsak a $y_1(x)$ -hez tartozó energiát, hanem a többi állapothoz ($y_2(x)$, $y_3(x)$, ..., $y_n(x)$) tartozókat is meg szeretnénk kapni. Az eltérés abban nyilvánul meg, hogy a különböző sorszámú állapotfüggvények esetén λ és Dx viszonya is különböző és emiatt az impulzus is változik:

$$y_1(x) \text{ esetében } Dx_1 \approx (1/2); p_1 \approx h/2Dx_1$$

$$y_2(x) \text{ esetében } Dx_2 \approx 2(1/2); p_2 \approx 2h/2Dx_2$$

$$y_3(x) \text{ esetében } Dx_3 \approx 3(1/2); p_3 \approx 3h/2Dx_3$$

...

$$y_n(x) \text{ esetében pedig } Dx_n \approx n(1/2). p_n \approx nh/2Dx_n$$

I.1. Emlékeztető: A másodfokú függvény minimum helyének és minimum értékének meghatározása teljes négyzetté alakítással.

A (I.11) összefüggés az $x = 1/Dx_n$ helyettesítéssel, illetve az összetett konstansok egyszerűbb jelölésével

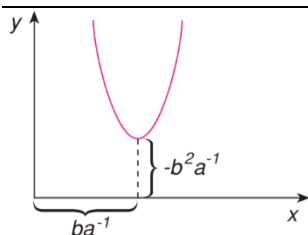
$$a = \frac{n^2 h^2}{16m} \quad b = ke^2$$

a következő alakban írható fel:

$$\gamma = ax^2 - 2bx = a(x^2 - 2ba^{-1}x), \text{ ezt teljes négyzetté alakítva:}$$

$$\gamma = a(x - ba^{-1})^2 + (-b^2 a^{-1}),$$

2. ábra. A helyzeti energia átlagának becslése



A becslés alapján tehát az n -edik állapotban az összenergia:

$$E_n = \frac{1}{4m} \left(\frac{nh}{2\Delta x_n} \right)^2 - \frac{2ke^2}{\Delta x_n}.$$

(I.10)

A kijelölt műveletek elvégzése után:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{16m} \frac{1}{\Delta x_n^2} - 2ke^2 \frac{1}{\Delta x_n} \quad (\text{I.11})$$

Ebből a formulából a minimum helye, valamint a minimum értéke egyszerűen kiolvasható (lásd I.1. Emlékeztető):

$$\Delta x_n = \frac{n^2 h^2}{ke^2 16m} \quad (\text{I.12})$$

$$E_n = -k^2 e^4 \frac{16m}{n^2 h^2} \quad (\text{I.13})$$

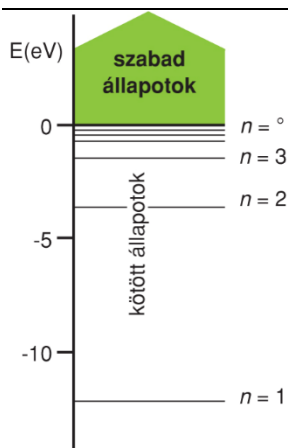
Bár a numerikus szorzóban van némi pontatlanság (16 helyett $2p^2 \approx 19,74$ lenne a helyes érték, amit csak egy sokkal bonyolultabb számolás eredményeképpen kaptunk volna meg), becslésünk alapján választ kaptunk a feltett kérdéseinkre:

A hidrogénatom „nagysága” ($\Delta x_1 \approx$ atomátmérő) tehát:

$$\Delta x_1 = \frac{h^2}{ke^2 16m} = 1,3 \cdot 10^{-10} \text{ m},$$

ami jó egyezést mutat a kísérleti adatokból meghatározott, táblázatokban található 1 \AA körüli atomátmérővel.

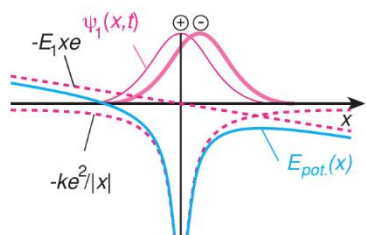
Az (I.13) összefüggésben, illetve az I.9. ábrán pedig előttünk állnak azok a diszkrét energiaértékek, amelyek a hidrogén vonalas színekében megfigyelhetők, és amelyek olyan sok fejtörést okoztak a fizikusoknak a XX. század elején. A kifejezésben n az egyetlen független változó, ismertebb nevén a **főkvantumszám** = **1** esetén, azaz **alapállapotban** a legkisebb az energia, $E_1 = -1,77 \cdot 10^{-18} \text{ J}$, ami körülbelül $-11,1 \text{ eV}$ (a pontos érték $-13,6 \text{ eV}$ lenne). Ennyi energia szükséges az elektron teljes eltávolításához (az atommagtól a végtelenbe), tehát ekkora a hidrogénatom ionizációs energiája. **$n = 2, 3, \dots$** értékei jelölik a **gerjesztettállapotokat**. n növekedésével a szomszédos állapotok között egyre kisebb az energia különbség: (I.13) alapján $E_n = E_1/n^2$ (I.9. ábra).



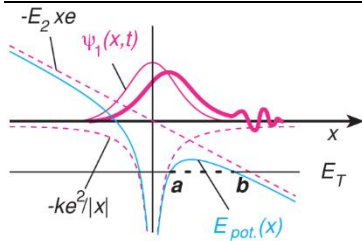
I.9. ábra. A hidrogénatom elektronjának lehetséges energiái. Kötött állapotban csak diszkrétén, szabad állapotban folytonosan változhat az energia.

1.3.2. I/1.3.2. Külső elektromos tér hatása a kötött elektronra, alagútjelenség

Először vizsgáljuk meg azt az esetet, amikor az alapállapotú hidrogén atom **gyenge** elektromos erőterbe kerül. Az egyszerűség kedvéért maradjunk az egydimenziós esetnél, és a külső erőter legyen homogén. Ilyenkor a $V_K(x)$ potenciál a helynek lineáris függvénye (például $V_K(x) = -\mathbf{E}x$, ahol \mathbf{E} az elektromos térerősség). A **külső tér hatására** a proton körüli eredeti „potenciálgödör” ($-ke^2/|x|$) egy kissé deformálódik ($E_{pot.}(x) = V_K(x)e^{-ke^2/|x|}$; I.10. ábra). **Az elektron állapotfüggvénye** ($\psi_1(x,t)$, ami egy rövid időre ismét időtől függővé válik) **követi $E_{pot.}(x)$ kis deformációját**, és emiatt az alkalmazott potenciál esetén az ábrán jobbra húzódik. **Az atom polarizálódik**, klasszikus értelemben parányi dipólussá válik. A külső tér megszűnése esetén a deformáció eltűnik és visszaáll az eredeti állapot (lásd „A szuperpozíció elve”).

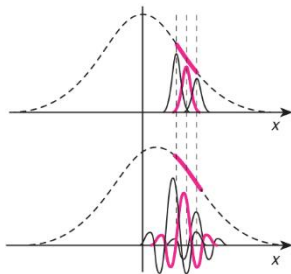


Ha a külső teret jelentősen megnöveljük ($E_2 \gg E_1$), az állapot egyensúlya megbomlik, hiszen az állapotfüggvény a magtól jobbra a visszatérítő potenciálon túl nyúlik, ezért a szuperpozíció elvének alkalmazásakor a magtól távolabb eső elemi függvényeket a külső tér még távolabb tereli. Emiatt az állapotfüggvény jobb oldali részét az erőter folyamatosan „elszívja”, végül az elektron szabaddá válik, az atom ionizálódik (I.11. ábra). Az ábrán az $E_{pot.}(x)$ görbe mellett az elektron összenergiáját (E_T) is feltüntettük. Megfigyelhető, hogy a magtól jobbra **van egy olyan (a,b) tartomány az x tengely mentén, ahol az összenergia kisebb, mint a potenciális energia ($E_T < E_{pot.}(x)$)**, azaz ha az elektron klasszikus tömegpont lenne, akkor a mozgási energiájának itt negatívnak kellene lennie, ami képtelenség. Ez tehát ismét egy olyan jelenség, ami a klasszikus fizika alapján teljesen érthetetlen. Az I.11. ábrán az összenergiát (E_T) jelző vonal „alagútként” fúrja át a föléje emelkedő potenciálhegyet ($E_{pot.}(x)$), innen származik a jelenség elnevezése. Ezzel magyarázható például a fémek ún. hidegemissziója, amikor elektromos tér hatására elektronok hagyják el a fémek felületét akár szobahőmérsékleten is, de alagútjelenséget molekuláris eredetű elektromos tér is létrehozhat. Így válik érthetővé sok kémiai reakció, amelyekben bizonyos átmeneti képződmények létrejöttéhez még a reagáló molekulák mozgási energiájával együtt sincs elegendő energia.



A szuperpozíció elve

Az új állapot megjelenésekor, illetve eltűnésekor a klasszikus hullámtanból ismert Huygens-elv érvényesül. Az eredeti $y_i(x,t)$ állapotfüggvényt (hullámfüggvényt) elemi függvényekre bontva, az erőtér terelő hatását is figyelembe véve a szétterülő elemi függvények összege (szuperpozíciója) adja meg az új állapotfüggvényt. (A vastag vonalak jelentik az eredeti és új állapotfüggvény egy-egy egymásnak megfelelő szakaszát. Végeredményképpen kis deformáció esetén az új állapotfüggvény az eredetihez képest eltolódik, de egyébként nem nagyon változik.)



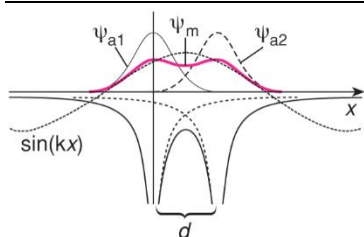
1.3.3. I/1.3.3. A kovalens kémiai kötés

A kovalens kötés lényegét egy példán keresztül mutatjuk be [lásd „A kémiai kötés értelmezése a legegyszerűbb molekulában (H_2^+)”].

Ez a példa általános érvennyel érzékelteti a kovalens kémiai kötés kialakulását. **A kötést tehát a két maghoz egyformán tartozó, lecsökkent mozgási energiájú elektronállapot valósítja meg.**

A kémiai kötés értelmezése a legegyszerűbb molekulában (H_2^+)

Képzeld el azt az esetet, **amikor egy alapállapotú hidrogénatom közelében feltűnik egy proton.** Az előzőekhez hasonlóan az eredeti állapot (y_{a1}) egyensúlya ilyenkor is megbomlik, és az állapotfüggvény elkezd „átszivárogni” a másik proton „potenciálgödre” fölé. (Azonban ez az állapot (y_{a2}) sem vezetne egyensúlyra ezért nem is valósul meg.) A szimmetria miatt az **új egyensúlyi állapot** nem a másik proton körül, hanem valahol a kettő között szétterülve **fog kialakulni** (y_m). Hasonlítsuk össze az eredeti (y_{a1}) és az új (y_m) elektronállapot energiáját! A mozgási energia körülbelüli értékét most is az állapotfüggvényhez legjobban simuló szinuszfüggvény hullámhosszának segítségével adjuk meg. Az új állapot (y_m) esetében a hullámhossz megnő, tehát a mozgási energia lecsökken. A helyzeti energia pedig a két proton közötti térrészben, ahol mindkét proton hatása érvényesül, szükségképpen kisebb. **Így az új állapotban (y_m) az energia határozottan kisebb, mint az eredetiben (y_{a1}).** Hogy mennyivel, az a két proton távolságától (d) függ. Ha d túl kicsi lenne, akkor az azonos töltésű protonok taszítóhatását az elektron már nem tudná kompenzálni, és emiatt az egész rendszer energiája biztosan nőne. Ha d túl nagy lenne, akkor a kétmaximumú állapotfüggvény jobban elkülönülő (inkább az atomi állapotfüggvényekre emlékeztető) két része már egy rövidebb hullámhosszú szinuszfüggvényhez simulna (tehát a mozgási energia nagyobb lenne), és a két proton közötti együttes helyzeti energia sem csökkenne jelentős mértékben. A minimális energiájú állapot olyan protontávolságnál alakul ki, ahol d körülbelül az eredeti atomátmérvével egyezik meg.



1.4. I/1.4. Az atomi elektronállapotok további kvantált tulajdonságai

1.4.1. I/1.4.1. Mellékkvantumszám és mágneses kvantumszám

Látható, hogy az I.8. ábrán bemutatott egydimenziós atomi állapotfüggvények ($y_n(x)$) és az (I.13) összefüggésben szereplő energiák (E_n) között kölcsönösen egyértelmű kapcsolat áll fenn. Emiatt **egy dimenzióban az n főkvantumszám** nemcsak az energiát, hanem egyúttal **az állapotot is egyértelműen jellemzi**. Ez a helyzet azonban már **két dimenzióban** megváltozik, amit az I.12. ábrán meg is figyelhetünk. $n = 1$ esetén a szimmetria miatt (90° -os elforgatás esetén ugyanazt a függvényt kapjuk) továbbra is csak egyetlen állapot valósulhat meg, de $n = 2$ esetén már kettő, így **csupán a főkvantumszám már nem alkalmas az állapotok egyértelmű jellemzésére. Három dimenzióban ehhez három kvantumszámra van szükség.** A két új kvantumszám az impulzusmomentummal (perdülettel) lesz kapcsolatban, hiszen a mechanikában a már eddig is szereplő energián és impulzuson kívül ez a harmadik megmaradó mennyiség, azaz érvényes rá egy megmaradási törvény. Mivel az impulzusmomentum (L) vektormennyiség, az egyik kvantumszám a hosszára, a másik pedig az irányára vonatkozik. Kötött állapotban az impulzusmomentum is kvantált (I.13. ábra):

$$|\vec{L}| = L = \frac{h}{2\pi} \sqrt{l(l+1)} \quad (l = 0, 1, 2, \dots, n-1),$$

(I.14)

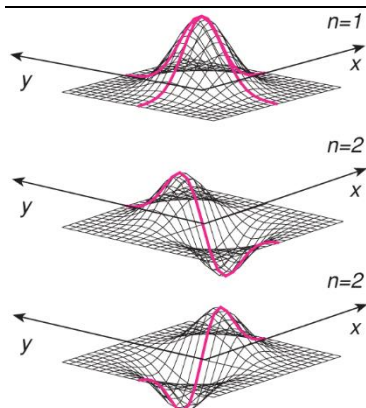
$$L \cos \Theta = L_z = \frac{h}{2\pi} m_l \quad (m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l)$$

A kovalens kémiai kötés kialakulása. y_{a1} , y_{a2} a lehetséges atomi állapotok állapotfüggvénye, y_m a kötést megvalósító (molekuláris) állapotfüggvény. (Az ábrán a y_m -re legjobban illeszkedő szinuszfüggvényt is feltüntettük.)

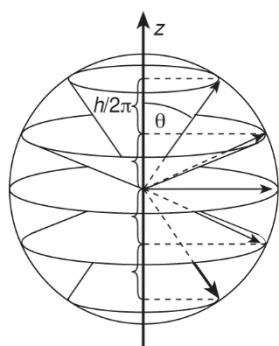
(I.15)

A fenti összefüggésben l a **mellékkvantumszám**, m_l a **mágneses kvantumszám**. Ez utóbbi elnevezése onnan származik, hogy az impulzusmomentumhoz (a mágneses dipólus nagyságát és irányát jellemző) ún. mágneses momentum is társul, ami miatt **mágneses térben** az azonos n , de különböző m_l értékű állapotokhoz **különböző energia** tartozik. (lásd X/4. rész).

Érdemes megjegyezni, hogy L másik két komponense (L_x , L_y) határozatlan, tehát az impulzusmomentum az I.13. ábrán látható kúpfelületeket söpri végig.



I.12. ábra. Kétdimenziós állapotfüggvények. Az n főkvantumszám egyedül már nem alkalmas az állapotok megkülönböztetésére.



I.13. ábra. Az impulzusmomentum nemcsak nagyság, hanem irány szerint is kvantált. Az ábra L lehetséges irányait mutatja $l = 2$ esetén, a gömb sugara $|L|$ -kel egyenlő.

1.4.2. I/1.4.2 Az elektron spinje és a hozzá tartozó mágneses momentum

Az atomokban lévő elektronok impulzusmomentumának irány szerinti kvantáltságát 1922-ben két német fizikus, Otto Stern (1888-1969) és Walther Gerlach (1889-1979) kísérletileg is bizonyította (lásd „*A Stern–Gerlach-kísérlet*”). Ugyanezt a kísérletet hidrogénatomokkal elvégezve meglepő eredményt kapunk. **Alapállapotban a hidrogénatom elektronjának nulla az impulzusmomentuma** (hiszen a mellékvantumszám $l = 0$ és így (I.14) alapján $L=0$). **Ezért azt várjuk, hogy a mágneses momentuma is zérus,** tehát az ilyen nyaláb az **inhomogén mágneses térben nem térül el. Ezzel szemben** a tapasztalat azt mutatja, hogy **a nyaláb két részre hasad.** Ez az eredmény csak úgy magyarázható, ha feltesszük, hogy az elektronnak az eddig ismert impulzusmomentumával (L -lel) együtt járó mágneses momentumán kívül van egy másik ún. saját mágneses momentuma, ami irányítottsága szerint kétféle lehet.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



Stern és Gerlach

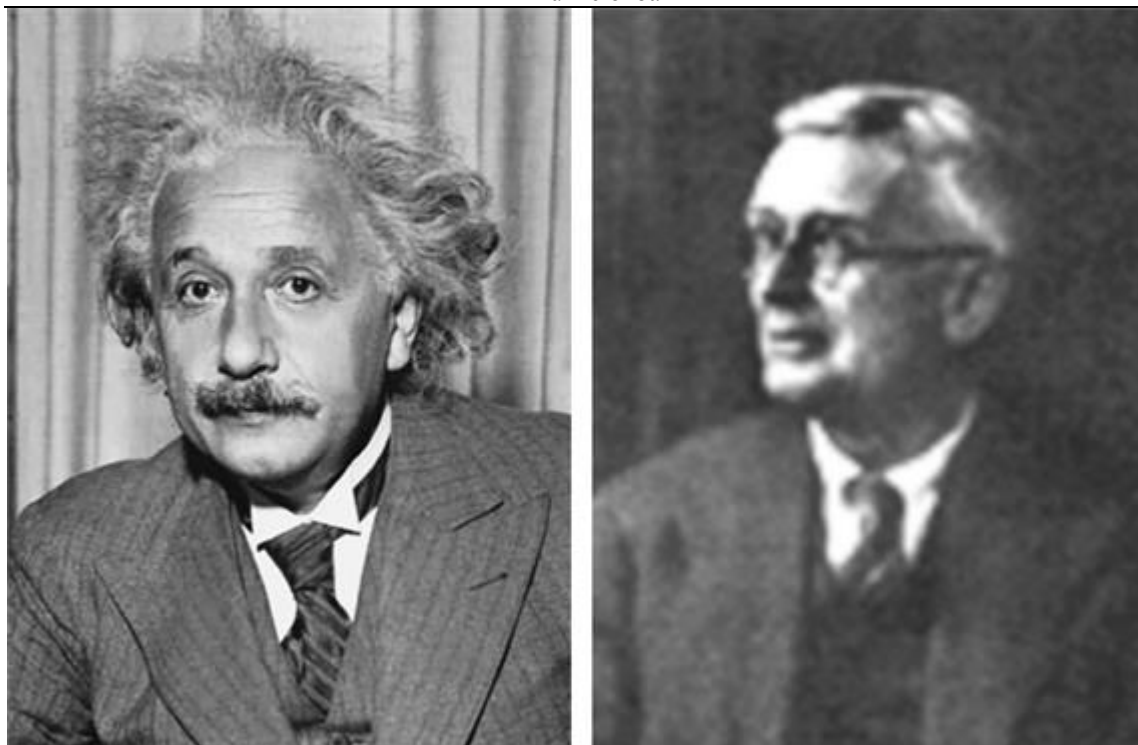
Azt, hogy ehhez a saját mágneses momentumhoz is társul ún. saját impulzusmomentum Einstein javaslatára Johannes Wander de Haas (1878–1960) holland fizikus bizonyította be kísérletileg (lásd „*Einstein–De Haas-kísérlet*”). Ezt a saját impulzusmomentumot nevezzük spinnek (S). Az (I.14), (I.15) kvantálási feltételeknek megfelelő egyenletek itt is megoldhatók azzal a különbséggel, hogy a spinkvantumszám (s) csak $1/2$ lehet:

$$|\vec{S}| = S = \frac{h}{2\pi} \sqrt{s(s+1)} \quad (s = 1/2),$$

(I.16)

$$S \cos \Theta = S_z = \frac{h}{2\pi} m_s \quad (m_s = \pm s) \quad (I.17)$$

Mivel s értéke adott (elektronok esetében $1/2$), **spinkvantumszámon** inkább m_s -t szokták érteni.



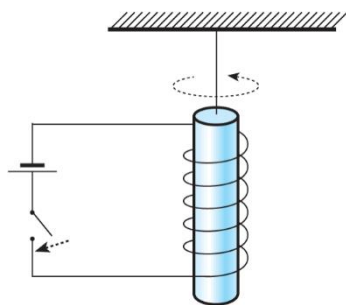
A Stern–Gerlach-kísérlet

A **Stern–Gerlach-kísérlet** azon alapul, hogy míg homogén mágneses térben a mágneses dipólusokra csak forgatónyomaték hat, tehát az eredő erő zérus, addig inhomogén térben az eredő erő zérustól különböző. Emiatt az **inhomogén mágneses téren áthaladó atomok mágneses momentumuktól függően különböző mértékben térülnek el**. Amennyiben az impulzusmomentum és a vele együtt járó mágneses momentum iránya nem lenne kvantált, úgy az eltérített atomok folytonos eloszlásban csapódnának a felfogó ernyőre. A kísérlet során használt ezüstatomokból álló nyaláb folytonos szétterülés helyett két részre hasadt, de más atomnyalábok esetén is csak néhány diszkrét nyomot lehetett látni az ernyőn, ami bizonyította a kvantáltságot.

Einstein–de Haas-kísérlet

Egy tekercs belsejében vékony torziós szálon kis vasrudacska függ. Az áram hirtelen bekapcsolásakor a vasrúd felmágneseződik, ami azt jelenti, hogy az atomi mágneses momentumok egy irányba állnak be. Ezzel egy időben a vasrúd elfordul. A jelenség azzal magyarázható, hogy a mágneses momentumokkal együtt az atomi impulzusmomentumok is egy irányba rendeződnek, vektori összegük növekszik, viszont a rendszer eredő impulzusmomentuma nem változhat meg, mivel külső forgatónyomaték nem hat a rendszerre.

A kísérlet kvantitatív kiértékelése során az is bizonyítható, hogy a változást a spinek okozzák.



Einstein és de Haas

1.4.3. I/1.4.3. A periódusos rendszer felépítése: Pauli-elv, elektronpálya, elektronhéj, Hund-szabály

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

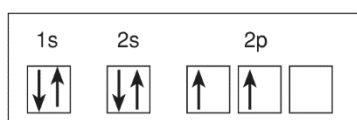
A kötött atomi elektronállapot egyértelmű jellemzéséhez tehát négy kvantumszám megadása szükséges: n , l , m_l , m_s . 1925-ben Wolfgang Pauli (1900– 1958) osztrák fizikus fogalmazta meg azt a felismerést, hogy egy több elektront tartalmazó rendszerben minden egyes elektron más-más kvantumállapotban van. Másképpen fogalmazva minden kvantumállapot csak egy elektronnal lehet betöltve. Ennek megfelelően egy atomon belül nem létezhet két olyan kötött elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma megegyezik (**Pauli-elv**; 1945, Nobel-díj). Az előbbieket figyelembevételével a Bohr-elméletből ránk maradt klasszikus kifejezések is világos értelmet nyerhetnek. A máig használatban lévő **elektronpálya** elnevezés az n , l és m_l kvantumszámokkal megadható állapotokat jelenti, amelyen a Pauli-elv értelmében maximálisan két elektron „tartózkodhat” a kétféle lehetséges spinállapotnak megfelelően.

A Pauli-elv alapján a magasabb rendszámú atomok felépítését a hidrogénatom mintájára képzelhetjük el. Az újabb elektronok „elhelyezkedése” tehát olyan, mintha az egyetlen elektron számára lehetséges gerjesztett állapotokat töltenénk be. A magtöltés által meghatározott számú elektron olyan állapotokat igyekszik felvenni, amelyhez a lehető legkisebb összenergia tartozik. Így az elektronpályák betöltése az (I.13) összefüggés alapján a legkisebb főkvantumszámú pályától indulva, pályánként maximálisan két-két elektront feltételezve valósulhat meg. Az azonos főkvantumszámú pályák alkotnak egy **elektronhéjat**, ezen belül az azonos mellékvantumszámú pályák alkotnak egy **alhéjat**. Az azonos alhéjhoz tartozó elektronokat **ekvivalens elektronoknak** nevezzük. Bármelyik ekvivalens elektronnak a semleges atomból való eltávolításához ugyanakkora energiát kell befektetni. Az atom **konfigurációját** azzal rögzítjük, hogy megadjuk a (részlegesen vagy teljesen) betöltött alhéjakat és az ekvivalens elektronok számát.



Pauli és Hund

Nagyobb rendszámú atomok esetén a Pauli-elv mellett egy másik rendező elv is érvényre jut a pályák betöltöttségének kialakulásakor, amit Friedrich Hermann Hund (1896–1997) német fizikus figyelt meg először 1925-ben (**Hund-szabály**). Adott elektronkonfiguráció mellett az az állapot rendelkezik a legalacsonyabb energiával, amelyikhez a legnagyobb eredő spinérték tartozik. Erre mutat példát az I.14. ábra, ami azt szemlélteti, hogy a szénatom alapállapotában hogyan alakul a pályák betöltöttsége az $1s^2 2s^2 2p^2$ elektronkonfiguráció mellett.



I.14. ábra. A szénatom elektronkonfigurációjának egyszerű szemléltetése. Az elektronpályákat a négyzetek szemléltetik. Az n főkvantumszám mellett az l mellékvantumszám a szokásos betűjelekkel szerepel (az $l = 0$? s , illetve az $l = 1$? p konvenció szerint). Az ml lehetséges értékei $(-1, 0, 1)$ által megkülönböztetett p pályák közül csak kettő van (egyszeresen) betöltve. Az elektronok spinállapotát nyilak jelölik

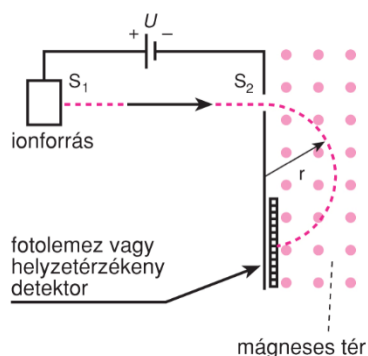
Az elemek kémiai tulajdonságait általában az atom legnagyobb főkvantumszámú héjának s , illetve p állapotú elektronjai, az ún. **vegyértékelektronok** (valenciaelektronok) szabják meg. Ezek az alhéjak összesen 8 elektront tartalmazhatnak. Azok az elemek, amelyek atomjaiban ezek az alhéjak éppen telítve vannak kémiailag különösen stabilak (nemesgázok). Itt érdemes még megemlíteni azt, hogy a belső héjakon lévő negatív elektronok részlegesen hatástalanítják, leárnyékolják a pozitív atommag vonzó hatását, ami szintén befolyásolja a minimális összenergiát és így a lehetséges állapotok betöltésének sorrendjét.

1.5. I/1.5. Az atommag szerkezete

Míg az atomhéj (az atommag körüli elektronok) fizikáját a kvantummechanika szinte teljes mértékben tisztázta, a magfizikáról ezt mind a mai napig nem mondhatjuk el. A magfizika még abban a stádiumban van, amikor a jelenségekkel foglalkozik, anélkül hogy ezeket átfogó elmélettel meg tudná magyarázni.

1.5.1. I/1.5.1. Az atommagot jellemző adatok áttekintése

Rutherford az I/1.1.1.-ben ismertetett szórás kísérlet mérési eredményeiből azt számolta ki, hogy az atommag mérete nem lehet nagyobb 10^{-14} m-nél. A későbbi mérések alapján kiderült, hogy a mag még ennél is kisebb, csupán néhány százszor 10^{-15} m, azaz 100000-szer kisebb, mint a néhány angstromnyi (10^{-10} m) atom. Az atommagok tömegét kísérleti módszerek segítségével igen pontosan meg lehet határozni. Az ilyen méréseket tömegspektrométerekkel végzik, a berendezés elvi vázlata az I.15. ábrán látható. A magtömegeket relatív egységekben szokás kifejezni. Az egység (ATE: atomi tömeg egység) a szénatom (pontosabban a ^{12}C izotóp, lásd később) tömegének 1/12-ed része. Nagy pontosságú mérésekkel megállapították, hogy az atomi tömeg egység $\text{ATE} = 1,6605 \cdot 10^{-27}$ kg-nak felel meg.



I.15. ábra. A tömegspektrométer. Az ionforrásban például elektronbom-bázással előállítják a vizsgálat tárgyát képező elem ionjait. Az S_1 résen át az ionok egy gyorsító elektromos térbe jutnak, ahol U gyorsítófeszültség hatására nagy mozgási energiára tesznek szert. A felgyorsított ionok nyalábjá az S_2 résen át belép egy olyan mágneses térbe, amelynek indukcióvonalai a sebességre (és a rajz síkjára) merőlegesek. A mágneses térben a Lorentz-erő az ionokat körpályára kényszeríti ($F_{\text{centripetális}} = mv^2/r$): v -t 3.1-ből kifejezve és beírva a körpálya sugarából (az ionok fotolemezre való becsapódási helyéből), a mágneses indukció (B), a részecske töltése (q) és a gyorsító feszültség (U) adatainak ismeretében az iontömeg kiszámítható. Ha ebből a tömegből az ion elektronjainak tömegét levonjuk, a mag tömegének értékét kapjuk

Minden atommag kétféle, közel azonos tömegű alkotórészből áll: pozitív töltésű **protonokból** és semleges **neutronokból**. A protonokat és a neutronokat közösen **nukleonoknak** nevezzük. A proton töltése ugyanakkora, mint az elektroné, de ellentétes előjelű ($1,6 \cdot 10^{-19}$ C). A magban lévő protonok száma az adott atom rendszáma (Z). (A kívülről semleges atomban a rendszámmal megegyező számú elektron található.) Az atom tömegszámát (A) a neutronok (N) és a protonok (Z) együttes száma adja meg: $A = Z + N$.

A proton tömege $m_p = 1,6726 \cdot 10^{-27}$ kg, a neutroné kicsit nagyobb $m_n = 1,6749 \cdot 10^{-27}$ kg, közelítőleg mindkettő 1 ATE.

A proton tömege az elektron tömegének csaknem 2000-szerese, ezért az atomtömeg és a magtömeg közel azonos. Természetesnek tűnik, hogy a magtömeg (M_M) és az atomi tömeg (M_A) között az alábbi összefüggés áll fenn:

$$M_M = M_A - Zm_e$$

(I.18)

ahol $m_e = 5,486 \cdot 10^{-4} \text{ ATE} = 9,31 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ az elektron tömege.

Az azonos összetételű atommagok gyűjtőneve **nuklid**. Adott nuklidokból álló anyag minden atommagjának ugyanakkora a rendszáma és a tömegszáma. Az azonos rendszámú, de különböző tömegszámú atomokat az adott elem **izotópjainak** nevezzük. (Izotóp tehát az azonos protonszámú, de eltérő neutronszámú atom.) Az azonos tömegű, de eltérő rendszámú magokat **izobár atommagoknak**, az azonos neutronszámmal rendelkező atommagokat pedig **izotón atommagoknak** nevezzük.

1.5.2. I/1.5.2. Az atommagot összetartó kölcsönhatás, tömeghiány, kötési energia

Az elektrosztatika törvényei szerint azonos töltések taszítják egymást, ezért a magban található protonok közötti elektrosztatikus kölcsönhatások eredményeképpen a mag nem is létezhetne. A tömegvonzás ugyan töltéstől független, de az elemi részecskék között ható tömegvonzási erők túl gyengék ahhoz, hogy a Coulomb-erők taszítóhatását kompenzálják. A nukleonok között tehát egy harmadik típusú erőnek (természetesen vonzóerőnek) kell léteznie, amely a mag alkotórészeit egységes struktúrává fogja össze. Ezt az erőt **magerőnek**, a kölcsönhatást **erős kölcsönhatásnak** nevezzük.

E különös kölcsönhatás vizsgálata közben azt lehetett tapasztalni, hogy a Z számú protonból és az $N = A - Z$ számú neutronból álló mag tömege ($M(A, Z)$) kisebb, mint a nukleonok szabad állapotukban mért tömegének összege. A fennmaradó tömegkülönbséget (ΔM) tömeghiánynak vagy **tömegdefektusnak** nevezzük:

$$\Delta M = [Zm_p + (A - Z)m_n] - M(A, Z).$$

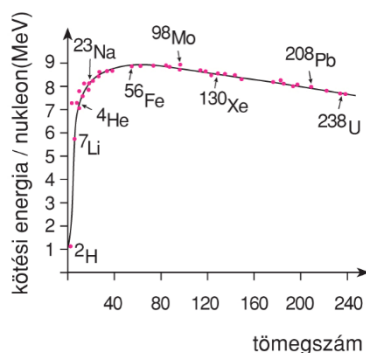
(I.19)

A tömeghiány jelenségét az Einstein-féle tömeg-energia reláció ($E = mc^2$) alapján magyarázhatjuk meg. Ez az összefüggés azt a felismerést fejezi ki, hogy az anyagoknak m tömegükben megnyilvánuló „jelenléte” a természetben mc^2 nagyságú energia jelenlétének felel meg, azzal egyenértékű. (Ez a fontos gondolat később más témáknál is előkerül: vö. II/3.2.3., VIII/4.4.2.).

A magerők mint vonzóerők miatt a nukleonok potenciális energiája az atommagba való belépéssel nagymértékben csökken. Ez magyarázza azt, hogy az atommag energiája jóval kisebb, mint az azt alkotó szabad (egymástól nagy távolságokra elhelyezkedő) nukleonok energiáinak összege. Ennek a két energiának a ΔE különbségét a **mag kötési energiájának** nevezzük. Egy magot alkotóelemeire (nukleonokra) bontani csak a kötési energiának megfelelő energia befektetésével lehetne, (ezt fejezi ki az a kép, hogy a kötött állapotú nukleonok energiája negatív). A tömeghiány éppen ezzel az energiakülönbséggel egyenértékű: $\Delta E = \Delta Mc^2$. Ez az energia a mag keletkezésekor nagy energiájú foton vagy más részecske révén távozik.

Tapasztalati tény az is, hogy növekvő tömegszám esetén a magok kötési energiája is növekszik. Az atommagokban a kötés erősségét jobban jellemezhetjük az **egy nukleonra jutó kötési energiával** ($\Delta E/A$, fajlagos kötési energiával). Az I.16. ábrából kitűnik, hogy az egy nukleonra jutó kötési energia egy-két kivételtől eltekintve meglehetősen szűk határok között változik. Ez azt jelenti, hogy minden egyes nukleon a többitől függetlenül, közelítőleg azonos energiával (6,5–8,5 MeV-tal) kötődik. Ebből viszont a nukleonok között ható erőkre az a következtetés vonható le, hogy ezek az erők igen kis hatótávolságúak, és számottevő hatásuk csak a közvetlenül szomszédos nukleonokra van.

Az I.16. ábra alapján az is érthető, hogy a nehéz magoknak ($A \sim 200$) két könnyebb fragmentumra való hasadása és a könnyű magok ($A \sim 1-5$) egyesülése, fúziója energetikailag egyaránt kedvező. (A nagyobb kötési energia a kötött állapotú nukleonokra nézve mélyebb energiát jelent, ami összhangban van a kötött rendszereknél általánosan megfigyelhető energiaminimumra való törekvés elvével.) Az atomreaktorokban energiatermelés céljára a maghasadás folyamatát alkalmazzák, mert ezt tudják kontrollált körülmények között megvalósítani.



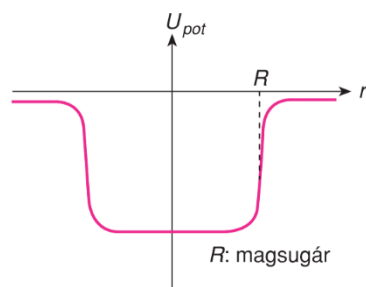
I.16. ábra. Egy nukleonra jutó kötési energia ($\Delta E/A$) a tömegszám (A) függvényében. A fajlagos kötési energiák növekednek, akármelyik irányból is közeledünk az $A = 55\text{--}60$ tömegszámú magok felé

A magerők feltételezés szerint töltéstől függetlenek, és bármely nukleonpár esetén azonos nagyságúak. Nagyságuk a magon belül feltétlenül meghaladja a Coulomb-erők nagyságát, ellenkező esetben a protonok között ható taszítóerők a magokat instabillá tennék. A Coulomb-erők túlzott jelenléte még így is instabilitáshoz vezetne. Erre utal az a tény, hogy a nehéz magokban nemcsak abszolút számban, hanem a protonokhoz viszonyítva relatíve is több neutron található.

1.5.3. I/1.5.3. Magmodellek, a nukleonok kvantált energiaállapotai

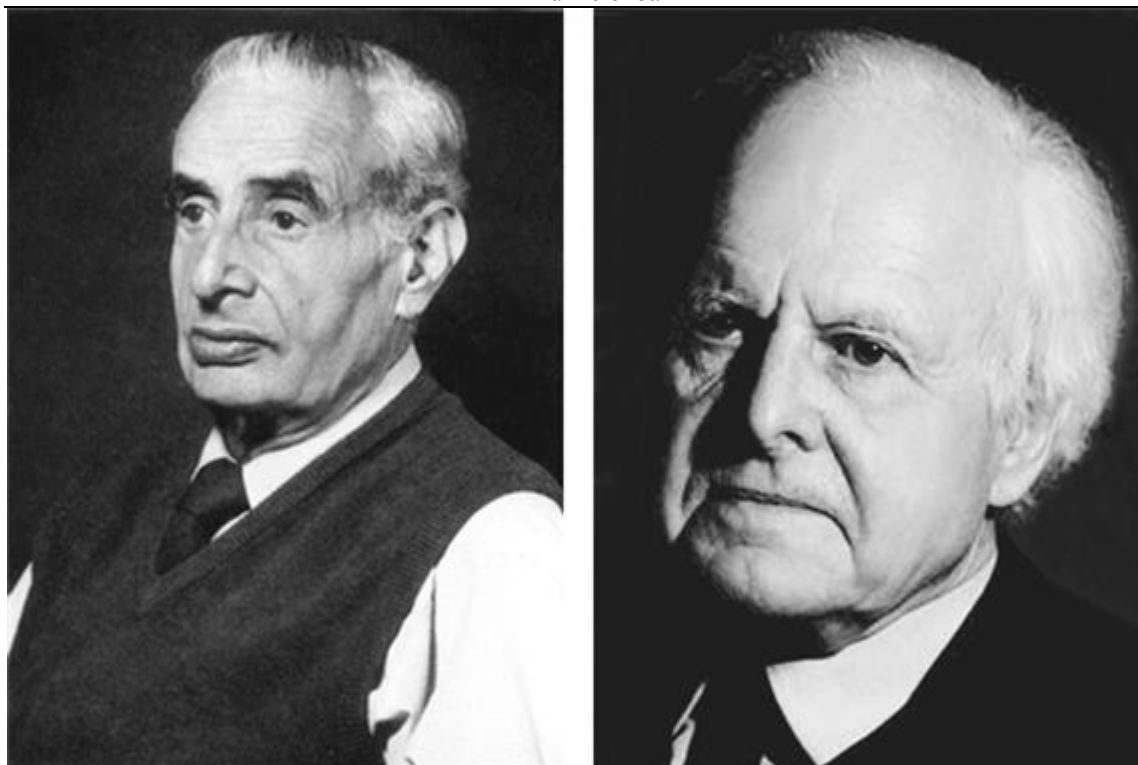
Mint ahogy azt a bevezetőben már említettük, az atommagokkal kapcsolatos jelenségek leírására még nem sikerült átfogó elméletet kidolgozni. A fontosabb modellek közül a két legismertebb a **hégmodell** és a **folyadékcepp-modell**. Az előbbi a mikroszkopikus, az utóbbi a makroszkopikus analógiákon alapul.

A kötött nukleonok energiaállapota az atomi elektronállapotokhoz hasonlóan kvantált. Walter Maurice Elsasser (1904–1991) német–amerikai fizikus 1934-ben alkotta meg az első „független részecske modellt”. Eszerint az atommag belsejében az összes nukleontól származó közös potenciáltér alakul ki (I.17. ábra), amelyben azután minden egyes nukleon a többitől függetlenül, önálló mozgást végez. A nukleonra felírt Schrödinger-egyenlet ilyen feltételek mellett megoldható. A megoldásokat az atomhéjhoz hasonlóan kvantumszámokkal lehet jellemezni (energia, impulzuszómomentum, mágneses momentum, spin). (A spinkvantumszám a nukleonok esetében is csak $1/2$ lehet.) Mivel a Pauli-elv is érvényben marad, a **nukleonok héjakba rendeződnek**. Így alakult ki a hégmodell, amit később többen is továbbfejlesztettek. Minden héj meghatározott számú protonnal, illetve neutronnal telítődik, majd új héj kiépülése kezdődik meg. A zárt héjjal rendelkező magok stabilitása igen nagy (hasonlóan a nemesgázok atomhéjbéli stabilitásához).



I.17. ábra. Az atommag potenciáltere. A potenciál a magsugárnak megfelelő távolságnál igen meredeken emelkedik (Meredek falú potenciálgödör.)

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



Elsasser és Weizsäcker

A héjmodell sikerei mellett számos kísérleti tény magyarázatára alkalmatlannak bizonyult. A magok kötési energiájával, tömegével és stabilitásával kapcsolatos jelenségek nagy része a folyadékcseppmodell segítségével vált értelmezhetővé. Ennek a modellnek a bevezetését az **atommagok és a folyadékcseppek** közötti számos hasonló vonás tette lehetővé. Mindkettő jó közelítéssel gömb alakú, mindkettő sűrűsége a mérettől független, alkotórészeik gyakorlatilag csak a közvetlen szomszédokkal vannak kölcsönhatásban. A fenti és további feltételezett analógiákra támaszkodva a modell segítségével Carl Friedrich von Weizsäcker (1912–) német fizikusnak olyan matematikai formulát sikerült felállítania, amely a magok kötési energiáját, valamint a bomlással, illetve a hasadással szembeni stabilitását a tapasztalattal elég jó egyezésben írja le.

Bár az atommag nagyságát nem lehet pontosan definiálni, a feltételezések alapján ($r^3 \sim A$) az alábbi összefüggéssel kielégítő pontossággal közelíthetjük az atommag sugarát:

$$r = r_0 \sqrt[3]{A}$$

(I.20)

ahol $r_0 = 2 \cdot 10^{-15} \text{m}$ (a magtól független állandó). Az atommagok mérete, a vízcsepphez hasonlóan, a tömeg harmadik gyökével arányosan növekszik. Az atommag sűrűsége nagyon nagy (10^{17} kg/m^3 nagyságrendű), ugyanis a tömeg igen kicsiny térfogatba koncentrálódik. Összehasonlításképpen ekkora sűrűség esetén a Föld több mint 6000 km-es sugara nem érné el a 200 m-t sem.

A folyadékcseppmodell kifejezéseit használva a kötési energiát több tényező határozza meg. Ezek közül a legfontosabbak:

térfogati energia (magerők hatása), amely az újabb nukleonok megjelenésével, tehát a térfogattal arányosan növekszik (pozitív hatás),

felületi energia, ami azzal kapcsolatos, hogy a mag felületén elhelyezkedő nukleonok nincsenek minden irányból körülveve más nukleonokkal, így kevésbé vesznek részt a kötésben (negatív hatás), ez a hatás a felülettel arányosan növekszik,

Coulomb-energia, ami a protonok taszításából származik (negatív hatás).

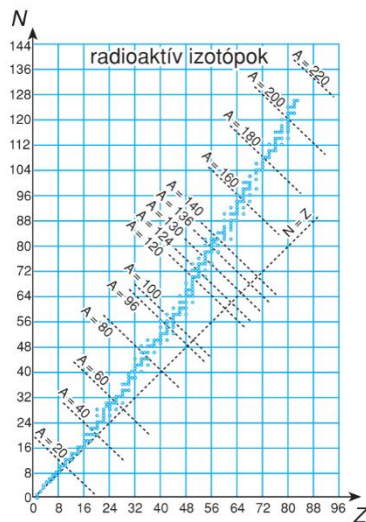
I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

Kis tömegszámoknál relatíve nagy a felületi energia a térfogati energiához képest, de a tömegszám, illetve a magsugár növekedésével (lásd az [I.20] összefüggést) ez egyre csökken, mivel a felület/térfogat arány ($r^2/r^3 = 1/r$) is egyre kisebb lesz. Így a fajlagos kötési energia egy darabig növekedni fog. A nehéz magoknál azonban számottevővé válik a Coulomb-energia is, ami a fajlagos kötési energia enyhe csökkenéséhez vezet (I.16. ábra).

A fenti gondolatok alapján értelmezhető az atommagokban lévő neutronszám-protonszám (N,Z) viszony alakulása is, amit az I.18. ábra szemléltet. A neutronok relatív száma (N/Z) azért növekszik a tömegszámmal, mert a neutron az erős kölcsönhatásban ugyanúgy részt vesz, mint a proton, de semlegessége miatt nem járul hozzá az elektromos taszításhoz, tehát nem növeli a Coulomb-energiát.

1.5.4. I/1.5.4. Az atommag stabilitása

Számos elemnek több természetes izotópja van, amelyek közül nem mind stabil. Ha egy atommagban a tömegszám túl nagy, vagy a neutron/proton arány nem megfelelő, akkor az atommag instabil, és radioaktív sugárzás kibocsátása mellett előbb-utóbb elbomlik. Ezeket az atomféléseket hívjuk radioaktív izotópoknak. Mitől is lesz egy adott nuklid radioaktív? Alacsonyabb rendszámú elemeknél általános szabály az, hogy azok a nuklidok a legstabilabbak, amelyekben a protonok és a neutronok száma megegyezik. Mint azt az I.18 ábrán megfigyelhettük, a tömegszám növekedésével az N/Z arány is általában növekszik. Az $A > 230$ tömegszám felett az elemek nem stabilak, valamennyi izotóp radioaktív. A nehezebb nuklidok esetén az N/Z arány megközelíti az 1,5-et. Általános szabály, hogy a bomlási folyamatok olyan irányban játszódnak le, hogy az N/Z arány csökkenjen, bár a bomlási folyamatok egyes lépései során ez az arány növekedhet is. Az atommag héjmodelljéből stabilitási szabályokat lehet felállítani, amelyek segítségével nagy biztonsággal tudjuk megjósolni a bomlási folyamatok irányát (lásd I.1. megjegyzés és II/3.2.1. rész). Végül megjegyezzük azt is, hogy csak egy olyan stabil nuklid létezik, amelyben a protonok száma nagyobb, mint a neutronok száma: ${}^3_2\text{He}$. (tömegszám 3, rendszám 2)



I.1. megjegyzés

Stabilitási szabályok:

- Több páros rendszámú stabil atommag van, mint páratlan rendszámú.
- Több páros neutronszámmal rendelkező stabil atommag van, mint páratlan neutronszámú.
- Több páros tömegszámú stabil atommag van, mint páratlan tömegszámú.

Általában a páros tömegszámú stabil atommagok páros rendszámmal rendelkeznek, de van néhány kivétel, mint ${}^3_1\text{H}$, ${}^6_3\text{Li}$, ${}^{10}_5\text{B}$ és ${}^{14}_7\text{N}$ ($Z = 1, 3, 5, 7$).

2. I/2. Atomi kölcsönhatások

A nemesgázok kivételével az elemek atomjai molekulákat alkotnak, amelyekben az atomokat kémiai kötések tartják össze. A molekulán belül minden atomnak többé-kevésbé meghatározott stabil pozíciója van. Ezt az biztosítja, hogy a rendszer potenciális energiája ($E_{pot.}$) bizonyos egyensúlyi távolságok esetén minimumot mutat, és egyaránt növekszik, ha a szomszédos atomok távolsága (r_{ij}) az egyensúlyi távolságtól (r_{0ij}) bármely irányban eltér. Az I.19. ábra ezt mutatja be a legegyszerűbb kétatomos molekulára. Az egyensúlyi távolság a **kötéstávolság** (r_0), az ehhez tartozó (negatív) energiaérték a **kötési energia** (E_k). Ekkora (pozitív) energia szükséges a kötés felszakításához. Az ábrán azt is feltüntettük, hogy az ilyen potenciális energia függvényt egy vonzó és egy taszító kölcsönhatás együttese eredményezi. Nagyobb távolságokban a vonzó, kisebb távolságokban a taszító kölcsönhatás a domináns. Ezt például a következő általános formulával fejezhetjük ki:

$$E_{pot} = E_{vonzó} + E_{taszító} = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m} \quad (I.21)$$

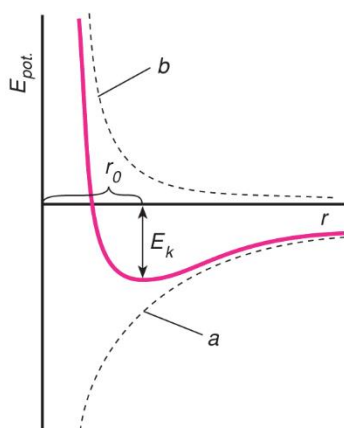
ahol A és B a kétféle kölcsönhatásra jellemző állandó és $n < m$. A hatványkitevők különbözősége vezet az energiaminimum kialakulásához.

2.1. I/2.1. Kötéstípusok

A **kötéstípusok osztályozása** nem egyértelmű feladat, egyrészt azért, mert az egyes kötéstípusok tulajdonságainak mélyebb megértése még napjainkra sem zárult le, másrészt többféle megközelítés is lehetséges a kötések leteremtő kölcsönhatások csoportosítására nézve. Szokás például megkülönböztetni atomokat összekapcsoló, **intramolekuláris** és molekulák vagy atomcsoportok között létrejövő **intermolekuláris** kölcsönhatásokat. A „kötéserősség” (E_k) alapján szokás megkülönböztetni **erős** és **gyenge**, illetve **elsődleges** és **másodlagos** kötések. Ezeknek a fogalmaknak a többsége azonban nem rendelkezik egyértelmű definícióval, amint az az alábbiakból is kitűnik.

2.1.1. I/2.1.1. A kovalens kötés

Erre a kötéstípusra az I/1.3.3. pontban a H_2^+ molekula elektronállapotának tárgyalásánál már példát adtunk. Az ott bemutatott állapotfüggvény (y_m) a molekula mindkét protonja körül, illetve azok között is relatíve nagy értékeket vesz föl, azaz a két alkotó atommag mindegyikére kiterjedő közös elektronállapot jön létre. Az állapot leírásánál azt is elmondtuk, hogy a molekulára jellemző egyensúlyi atomtávolság kialakulása az I.19. ábrának megfelelő mechanizmus alapján képzelhető el. A H_2^+ példáján tanultak általában jellemzőek a kovalens kötéstípusra: **a molekulában összekapcsolódó atomokat közös elektronpályák elektronjai „tartják össze”**. A többatomos molekulák térszerkezetét (az egyes kötések r_{0ij} egyensúlyi kötéhosszát, a kötések egymáshoz viszonyított irányát, a kötésszögeket) az egymással közös molekulapályát kialakító atomi elektronállapotok térbeli szimmetriája határozza meg. Az atomok molekulává kapcsolódásakor a leglazábban kötött, a magtól legtávolabb levő elektronok (vegyértékelektronok, lásd I/1.4.3.) hatnak egymásra legerősebben, és ezekből alakulnak ki a molekulapályák (vö. kötőelektronok).



A fenti elképzelésnek tisztán csak azok a molekulák felelnek meg, ahol a pozitív és negatív töltések „súlypontja” egybeesik (ezért használatos az apoláris vagy homöopoláris kötés elnevezés is). Ha ez nem teljesül, akkor a közös elektronpályák kialakításán kívül **elektrosztatikus kölcsönhatás is** szerepet játszik a kötés létrejöttében. Kevés a tiszta kovalens kötéstípussal jellemezhető atomi kapcsolat, de például a H_2 , Cl_2 , O_2 molekulák felépülése ilyennek tekinthető.

Kovalens kötéssel kapcsolódik össze például a Cl és a H a sósavban is, de a HCl molekula elektromos dipólusként viselkedik, ugyanis a kötés létrejötté során a H elektronja a Cl-hoz közelebb kerül, és így a pozitív és a negatív töltések „súlypontja” egymáshoz képest eltolódik. A **kovalens kötésű vegyületek többségét** elektromos dipólusmomentummal (p ; lásd I.2. megjegyzés) rendelkező **poláris molekulák alkotják**. Az ilyen molekulákban kialakuló kötések ezért poláris vagy heteropoláris kötéseknek is nevezik (lásd I/2.1.2).

Szintén közös elektronpályák kialakításával kapcsolódnak egybe a fémek atomjai, azonban ez a **fémes kötés** nincs értelmezve kétatomos relációban. A fémek sokatomos rendszerek, amelyekben a kristályos rendben elhelyezkedő fémionokat a közös pályát kialakító, az egész rendszerre kiterjedő delokalizált vegyértékelektronok „felhője” tartja össze (lásd I/3.3.1.).

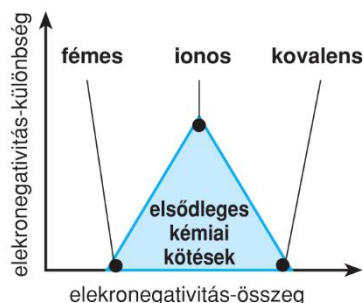
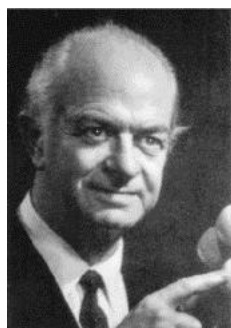
A kovalens kötések családját több eV nagyságú kötési energia jellemzi, ami erős kötetést jelent ($1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$), a molekulák atomokból való felépülésénél meghatározó. Mivel a kötés elsődlegesen nem elektrosztatikus kölcsönhatáson alapul, ezért az sem befolyásolja jelentősen, ha környezetében poláris komponensek vannak jelen.

I.2. megjegyzés

A dipólusmomentum nagysága (p) itt azt méri, hogy a semleges molekulában mekkora (pozitív, ill. negatív) töltés (Q) milyen messze (d) távolodott el egymástól, azaz $p = Qd$

2.1.2. I/2.1.2. Elektrosztatikus kölcsönhatás részvételével kialakuló kötéstípusok

A kovalens kötésű molekulák többségének poláris jellege annak a következménye, hogy a különböző fajta atomok a molekulapályán lévő elektronokat eltérő mértékben vonzzák maguk felé. E vonzás mennyiségi jellemzésére vezette be Linus Carl Pauling (1901-1994, Nobel-díj 1954) amerikai fizikus az **elektronegativitás** fogalmát. Ez a mennyiség jó közelítéssel a semleges atomból előállított pozitív, illetve negatív ion létrehozásához szükséges energiák (ionizációs energia illetve elektronaffinitás) abszolút értékének összegével arányos. A klasszikus kötéstípusokat az elektronegativitás alapján is osztályozhatjuk (I.20. ábra).



Az elektrosztatikus kölcsönhatás klasszikus esete az **ionos kötés**, amely döntő mértékben a ponttöltések (ionok) közötti Coulomb-erőkből származik. Ez a kötéstípus úgy is tekinthető, mint a **heteropoláris kötések határesetete**. Meg kell azonban jegyezni, hogy a kvantummechanikai számítások azt mutatják, hogy a töltéseltolódás még a LiF, NaCl típusú molekulák esetén sem éri el azt a mértéket, amelyet az ionos kötés klasszikus modellje feltételez (egy teljes elektrontöltés átadását). Ionos kötés **olyan atomok között jöhet létre, amelyeknek nagyon különböző az elektronegativitásuk**. (A LiF esetében ez $4 - 1 = 3$, a NaCl esetében $3 - 0,9 = 2,1$). A fémes kötéssel ellentétben kétatomos relációban is értelmezve van, de az ionokból felépülő

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

vegyületek csak elvétve kapcsolódnak párosával. Általában a sokatomos, kristályos rendszerek összetartó kötéstípusa (ionkristály), de szerepet játszhat molekuláris komplexek felépülésében is (lásd „A NaCl molekula ionos kötése”).

A NaCl molekula ionos kötése

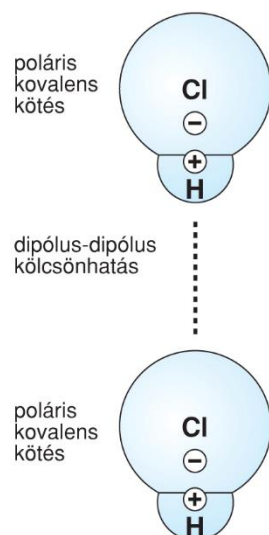
A Na elektronkonfigurációja $1s^22s^22p^63s$, amelyben a 3s elektron kiszakítása eredményezné azt, hogy az elektronkonfigurációja teljesen betöltött ($n=2$) állapothoz vezessen. A partner Cl atomból éppen 1 elektron hiányzik az $n = 2$ nível teljes betöltéséhez ($1s^22s^22p^5$). A Na 3s elektronjának ionizációja 5,1 eV energiát igényel, míg a Cl atom egy elektronfelvétele 3,7 eV nagyságú energia felszabadulásához vezet. A semleges Na-ból és Cl-ból, atompáronként, tehát 1,4 eV nagyságú energia befektetésével készíthetünk Na^+ és Cl^- ionokat. Az ionok kölcsönhatásakor kialakuló potenciális energiafüggvény az $r_0 = 0,24$, $E_k = 4,2$ eV értékekre vezet. Mivel az ionok kötési energiája nagyobb, mint az ionizációk keltéséhez szükséges energiabefektetés, energetikailag kedvezőbb az ionos kötésű NaCl „molekula” állapot, mint a semleges Na és Cl atomok keveréke.

Igen fontos megjegyezni azt, hogy a kötésre jellemző potenciális energiában ($E_{pot.}$) a vonzó tag a Coulomb-kölcsönhatás miatt a töltések közötti távolság reciprokával arányos ($n = 1$ az (I.21) összefüggésben). Emiatt a vonzás erőssége a távolság növekedtével viszonylag lassan csökken (sokkal lassabban, mint n nagyobb értékeinél), tehát a **kölcsönhatás hosszú hatótávolságú**. Az elektrosztatikus kölcsönhatást más elektromosan töltött komponensek jelenléte megváltoztathatja, ezért az ilyen kötésekkel összetartott molekulák (megfelelő közegben) könnyen disszociálnak (például NaCl vízben). Az ionos kötés kötési energiája néhány eV, ennek alapján az **erős** kötések közé soroljuk.

Az elektrosztatikus kölcsönhatások között tartjuk számon azokat az eseteket is, amikor a kölcsönhatás nem ponttöltések, hanem atomcsoportok, molekulák, makromolekulák egyes részei között állandóan fennálló **dipólus jellegű töltéeloszlás** miatt jön létre (I.21. ábra). A dipólusjelleg esetén fellépő lehetséges vonzó kölcsönhatások energiáját ($E_{vonzó} = -A/r^n$ lásd (I.21)) a **p** dipólusmomentum és a környező partnerek által keltett **E** elektromos tér télerősségének ismeretében az alábbi általános képlet alapján határozhatjuk meg:

$$E_{vonzó} = p E.$$

I.20. ábra. Az elektronegativitás és a kötéstípus kapcsolata. A tiszta kovalens, fémés és ionos kémiai kötés három ideális határesetnek tekinthető. A különböző vegyületekben általában e típusok közötti átmenetek valósulnak meg (I.22)



I.21. ábra. Intramolekuláris és intermolekuláris elektrosztatikus kölcsönhatás együttes jelenléte

(Az (I.21) összefüggésben és az I.19. ábrán is feltüntetett taszító kölcsönhatási tagot ($E_{taszító}$) az azonos kvantumállapotok átfedését tiltó Pauli-elv értelmében a partnerek elektronfelhőinek taszítása szolgáltatja). Az (I.22) képletben **E** konkrét függvényalakja fejezi ki a dipólussal kölcsönható partnerek (ion, dipólus, indukált dipólus) természetét. Klasszikus elektrosztatikai ismeretek alapján a rögzített helyzetű és orientációjú

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

partnerekre viszonylag egyszerűen felírhatók a konkrét összefüggések. Ezeket megfelelő átlagolások elvégzésével kiegészíthetjük úgy, hogy a kölcsönhatásban a partnerek hőmozgását is tekintetbe vegyük. Ily módon az összefüggések sora és a kölcsönhatási energiák széles skálája nyerhető (I.1. táblázat). (A táblázatban a diszperziós kölcsönhatás is fel van tüntetve, amit részletesen a következő részben tárgyalunk).

Az elektrosztatikus kölcsönhatások tehát összességükben mind intra-, mind intermolekuláris értelemben jelentőséggel bírnak az anyag szerkezetének kialakításában.

1.1. táblázat - I.1.áblázat. Az elektrosztatikus kölcsönhatások jellemzői

Kölcsönhatás	A potenciális távolságfüggése	energia	Átlagos kölcsönhatási energia (eV)
Ion-ion	$1/r$		2-3
Ion-dipólus	$1/r^2$		0,1-0,2
Dipólus-dipólus (rögzített partnerek)	$1/r^3$		0,02
Dipólus-dipólus (hőmozgás mellett)	$1/r^6$		0,003
(Diszperziós)	$1/r^6$		0,02

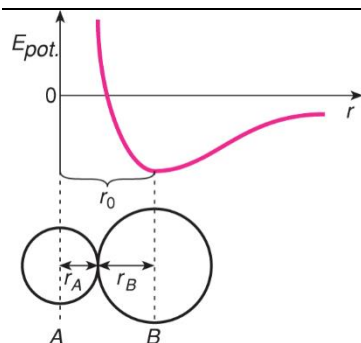
2.1.3. /2.1.3. Van der Waals-kölcsönhatások

Két semleges molekula között akkor is lehet kölcsönhatás, ha egyikük sem poláris, azaz egyiküknek sincs permanens dipólusmomentuma. Ebben a részben csak az ilyen kölcsönhatásokkal foglalkozunk, és csak ezeket nevezzük Van der Waals kölcsönhatásoknak (Jan Diderik van der Waals holland fizikus (1837-1923, Nobel-díj 1910)) (lásd „*A van der Waals (vagy diszperziós) kölcsönhatás kialakulása*”). (Itt kell megjegyeznünk azt is, hogy sok esetben a “van der Waals kölcsönhatások” kifejezést tágabb értelemben használják. Egyes szerzők nemcsak az apoláris molekulák (molekula részek) között ható effektust, hanem az összes (permanens) dipólus jellegű kölcsönhatást is ebbe a családba sorolják. Ezeket az effektusokat mi az elektrosztatikus kölcsönhatások között tárgyaltuk az előző részben.)

A legegyszerűbb kvalitatív kép alapján a van der Waals kölcsönhatás egy apoláris molekulában vagy atomcsoportban időlegesen kialakuló dipólus és az általa egy másik apoláris molekulában indukált dipólus közötti vonzó erőből származik. Ezt az erőt más néven diszperziós vagy (Fritz London (1900-1954) német-amerikai fizikus után) London-féle erőnek is nevezik.

Ez a vonzó kölcsönhatás egy taszítóerővel párosul, ami kizárja, hogy a vonzóerő következtében a partnerek túl közel (az elektronpályák átfedését eredményező közelségbe) kerüljenek egymáshoz. Az elméleti leírás a két erőhatás együtteséből származó potenciált szintén az I.19. ábrának megfelelő módon adja meg.

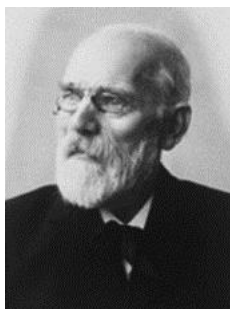
Az energiaminimumnak megfelelő távolság (r_0) az ún. **Van der Waals sugarak** összege, amit egyfajta atomi méretként szoktak használni (I.22. ábra). (Ha az egymással elsődleges kémiai kötést nem létesítő atomokat merev gömbökkel modellezzük és két szomszédos gömb éppen érinti egymást, akkor az atomok közötti távolság az atomok Van der Waals-sugarainak összegével egyenlő.)



I.22. ábra. A és B atom van der Waals sugarainak szemléltetése

(A Van der Waals-sugár definíciójához hasonlóan az egymással elsődleges kötést létesítő atomok kötéstávolsága a kovalens, illetve az ionsugarak összegével egyenlő.) Néhány atom Van der Waals-sugarát a kovalens és az ionsugárral együtt, az I.2. táblázatban mutatjuk be. A definíció alapján érezhető, hogy ez az adat nem jellemző egyértelműen az egyes atomokra, hiszen függ a konkrét atomi kapcsolattól is. Ezért a különböző kézikönyvek táblázati adataiban kis eltérések tapasztalhatók.

A Van der Waals- (diszperziós) kölcsönhatás gyenge (lásd I.1. táblázat) intermolekuláris kapcsolatot jelent, ezért az élővilág szerkezeti egységeinek (makromolekuláris konformációk, molekuláris komplexek) felépítésében, illetve a biokémiai reakciók szerkezeti feltételeinek biztosításában általános és nagyon fontos szerepet tölt be.



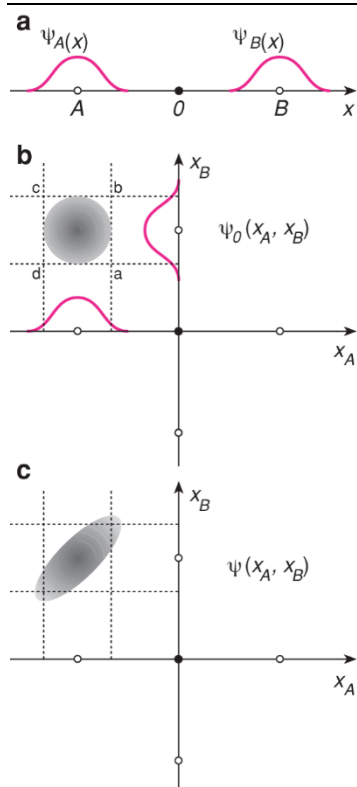
Van der Waals



A Van der Waals- (vagy diszperziós) kölcsönhatás kialakulása

Azt már láthattuk, hogy két közeli hidrogénatom hogyan kapcsolódik hidrogénmolekulává (lásd I.1.3.3., I.2.1.). Most a diszperziós kölcsönhatás jobb megértése érdekében arra keressük a választ, hogy hogyan jöhet létre vonzó kölcsönhatás két viszonylag távoli hidrogénatom között. Az a ábrán két alapállapotú hidrogénatom (A és B) egyszerűsített (az I.8a ábra alapján konstruált) állapotfüggvényét tüntettük fel ($\psi_A(x), \psi_B(x)$). A két proton az origótól balra (A), illetve jobbra (B) helyezkedik el. Az x tengely megkettőzésével és 90° -os elforgatásával (az x_A, x_B síkon) ugyanezt mutatja be a b ábra is azzal a különbséggel, hogy a szürke „folt” a két-elektronrendszer együttes (kollektív) mozgásállapotát ($y_0(x_A, x_B)$ -t) is szemlélteti. Mivel első közelítésben a két atom független (nincs közöttük kölcsönhatás) ezért a két ábrázolásmód egymással egyenértékű, $\psi_A(x)$ és $\psi_B(x)$ együtt ugyanazt fejezi ki, mint $y_0(x_A, x_B)$.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



Fritz London

Az elektronoknak az idegen atom részecskéivel való kölcsönhatását azonban általában nem hanyagolhatjuk el. Könnyen belátható, hogy a b ábrán, az x_A, x_B síkon például az „a” pont olyan klasszikusan elképzelt elektronelrendezésnek felel meg, amelyben mindkét elektron saját protonjának origó felőli oldalán helyezkedik el. Egyező töltések fordulnak egymással szembe, tehát a rendszer helyzeti energiája nagyobb, mint amekkora az „idegen” kölcsönhatások nélkül lenne. Hasonló a helyzet a „c” pontban, ahol az eltávolodott elektronok miatt a két proton áll egymással szemben. A kölcsönhatásmentes esethez képest viszont energiacsökkenés valósul meg a „b” és „d” pontban, hiszen ott a két atom ellentétes töltéseket fordít egymás felé. A c ábra egy olyan új kollektív állapotot mutat be ($\psi(x_A, x_B)$), amely előnyben részesíti a csökkent energiájú helyeket a megnövekedett energiájú helyekkel szemben. Így a teljes (mindkét atomot magába foglaló) rendszer energiája kisebb, mint amennyi a kölcsönhatás nélkül lenne. Csökkenő protontávolsággal ez a hatás erősödik, ezért a két proton igyekszik közelebb kerülni egymáshoz.

1.2. táblázat - I.2. táblázat. Néhány atom mérete

Elem	Rendszám	Van der Waals sugár (nm)	Kovalens sugár (nm)	Ionsugár (nm)	Ion
H	1	0,120	0,037	-	H ⁺
C	6	0,170	0,077	0,029	C ⁺
N	7	0,155	0,075	0,025	N ⁺
O	8	0,152	0,073	0,140	O ²⁻
F	9	0,147	0,071	0,117	F ⁻

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

P	15	0,180	0,106	0,058	P ³⁺
S	16	0,180	0,102	0,184	S ²⁻

2.1.4. I/2.1.4. A H-kötés

A H-hídnak is nevezett kötésben **a H atom két nagy elektronegativitású atom** (donor és akceptor, illetve pillératomok) **között létesít kapcsolatot**. A kötés erősségét az átlagos 0,2 eV értékkel szokás jellemezni, ami körülbelül egy nagyságrenddel kisebb, mint a kovalens kötések és körülbelül egy nagyságrenddel nagyobb, mint a dipólus jellegű kölcsönhatások energiája. H-kötés elsősorban a F-, O-, N-atomok között létesül. A két pillératom távolsága és a kötési energia pontos értéke a pillératomok fajtájától függ. A távolság a 0,23 és 0,35 nm tartományban vesz fel értékeket, és az egyes konkrét esetekben kisebb, mint a két pillératomhoz tartozó Van der Waals-sugarak összege (lásd az I.1. példákat). A kötéshosszak alapján is érzékelhető, hogy a H-kötés kialakulásában **többféle**, klasszikusnak tekinthető, valamint kvantummechanikai leírást igénylő, például az előző pontban említett, diszperziós **kölcsönhatás** is szerepet játszhat (lásd „A H-kötés egyfajta értelmezése”).

A H-kötések a biológiai makromolekulák rendezett szerkezeti egységeinek kialakításában igen fontos szerepet töltenek be. A víz különleges szerkezetén és a vízmolekulák sokoldalú, speciális kölcsönhatásain keresztül pedig az egész élővilág szerkezetében döntő szerepük van.

I.1. példák

a) Érdekes különlegesség a C-H hidrogénkötések esete, melyeket aromás gyűrűk C atomjainál tapasztaltak. Ezek a leggyengébb H-kötések, de ugyanakkor a pillératomok távolsága a legkisebb, 0,23–0,25 nm.

b) Érdekes azt is megjegyezni, hogy a F-nál nagyobb rendszámú elektronegativ elem például a S (elektronegativitása megegyezik a szénével) már nem vesz részt H-kötés kialakításában. Ez azzal magyarázható, hogy a lényegesen nagyobb atomtérfoghat miatt a negatív töltés nagyobb felületen oszlik el, így általában nincs számottevő hatása a H-atomra.

2.1.5. I/2.1.5. A hidrofób kölcsönhatás

A biológiai rendszerek fontos sajátossága, hogy a bennük végbemenő folyamatok jelentős részben vizes közegben zajlanak le. A víz szerkezeti tulajdonságait az I/4.1. részben majd részletesebben is megbeszéljük, itt csak azt az ismeretet használjuk fel, hogy a vizet poláris molekulák alkotják és ezek H-kötéseket képesek létrehozni egymás között. Egy vízmolekula elvileg egyszerre négy H-kötést hozhat létre: kettőt mint protonadonor, kettőt mint protonakceptor.

Ha poláris, hidrofíl molekulákat vízbe juttatunk, akkor azok elkeverednek, szétoszlanak a közegben, elektrosztatikus kölcsönhatásba lépnek a vízzel, illetve ha képesek rá, H-kötéseket is létrehozhatnak a vízmolekulákkal. Apoláris, **hidrofób molekulák vízbe juttatása esetében** egészen másfajta jelenséget figyelhetünk meg. A hidrofób molekulák **igyekeznek egymás köré tömörülni**, aggregálódni, mintegy kizárni a vizet a környezetükből. Ezt a jelenséget értelmezhetjük a **hidrofób kölcsönhatás** segítségével. Ez a kölcsönhatás igen fontos szerepet játszik a biológiai rendszerekben, például a membrán- szerkezetek kialakítása során vagy a fehérjemolekulák térszerkezetének elrendeződésekor.

Az I/2.1.3. részben kifejtettek alapján tudjuk, hogy apoláris, hidrofób molekulák között **csak gyenge Van der Waals-kölcsönhatások** alakulhatnak ki. Ez önmagában nem magyarázná meg kielégítően az adott struktúrák kialakulását, hiszen szobahőmérsékleten ($T \approx 293$ K) a termikus energia ($kT \approx 0,025$ eV, k a Boltzmann-állandó) már meghaladja a Van der Waals-kölcsönhatás energiáját ($\sim 0,02$ eV, lásd I.1. táblázat), ezért **a hőmozgás szétzilálná a rendszert** (lásd még III/2.1. rész).

A megoldás kulcsa a vízmolekulákban rejlik. Ennek megértése érdekében tekintsünk egy víz-levegő határfelületet (például egy pohár vizet). Mivel H-kötések kialakítására csak a többi vízmolekula irányában van lehetőség, ezért a vízmolekulák a felszín közvetlen közelében rendezettebbek, mint a folyadék belsejében. Ehhez nagyon hasonlóan, amikor apoláris molekula merül vizes közegbe, környezetében a vízmolekulák rendezettebbé válnak. Ilyenkor **az apoláris molekula körül** egy olyan határfelület alakul ki, amelyben **a vízmolekulák** rendezettsége következtében majdnem minden H-kötés megvalósul, ami elvileg létrejöhet. Ez az

állapot sokkal **rendezettebb**, **mint** általában a víz a **folyadék belsejében**, ahol a H-kötéseknek csak egy része, mintegy 75%-a képes létrejönni.

Termodinamikai tanulmányokból tudjuk (lásd III/3.3.3.), hogy a sok részecskéből álló rendszerek egyensúlyra törekvése az entrópiánövekedés ($DS \geq 0$), azaz a rendezetlenségnövekedés irányába mutat. Ez a fizikai alapelv érvényesül akkor, amikor a vízmolekulák a rendezettség mértékét úgy igyekeznek csökkenteni, hogy kizárják maguk közül a hidrofób molekulákat, és így a hidrofób molekulák (illetve molekularészek) körül kialakult rendezett határfelület méreteit csökkentik. Ez a törekvés érvényesül a fehérjék hidrofób részleteinek tömörülésében, illetve akkor, amikor a biológiai membránok esetében az azt alkotó molekulák poláris csoportjai a víz felé, míg az apoláris csoportok a membrán belseje felé fordulnak.

A H-kötés egyfajta értelmezése

Az összetett kölcsönhatás legfontosabb elemére a proton állapotának tanulmányozása során kaphatunk magyarázatot. Az eddigiek során a protont (atommagot) klasszikusan kezeltük (lásd I/1.2.3.) és az atom mozgási energiájához adódó járulékat elhanyagoltuk. Igaz, hogy ennek értéke általában sokkal kisebb, mint az elektroné (ezért lehetett elhanyagolni), de mérsékelten nagyra válhat, ha a proton helyének határozatlansága csökken. (Ez közvetlenül kiolvasható abból az összefüggésből, amit az elektron esetében a mozgási energia becslésére használtunk $((1/4m)(h/2Dx)^2$ lásd I/1.3.1). m most az elektronnál körülbelül kétezerszer nagyobb proton tömegét jelenti, Dx pedig a proton helyének bizonytalansága.)

Dx említett csökkenése be is következik, ha a hidrogénatom beépül egy molekulába. (A többi kémiai elemnél nem érvényesül ilyen hatás, mivel atommagjaik még a protonnál is sokkal nagyobb tömegűek.) Ez az effektus önmagában nem is lenne érdekes, ha nem kerülne a beépült proton közelébe egy olyan idegen molekula, amely erős vonzóerőt fejt ki rá. A proton helybizonytalansága ilyenkor megnő („már azt sem lehet tudni, hogy melyik molekulához tartozik”), mozgási energiája lecsökken, az energiafelesleg valamilyen formában távozik, és a két molekula lazán kötött rendszerré válik. (Természetesen pontosabb elemzésnél az elektronállapotok deformációját is figyelembe kellene venni.)

3. I/3. Sokatomos rendszerek, rend és rendezetlenség

Az eddigiekben az egyedi atomok felépüléséről, illetve a közöttük kialakuló kölcsönhatások törvényszerűségeiről esett szó. A most következőkben nagyszámú részecskéből (atomokból, molekulákból) álló (makroszkopikus) rendszerek tulajdonságaival foglalkozunk. A részecskék száma N , tipikusan Avogadro-szám ($6 \cdot 10^{23}$) nagyságrendű.

3.1. I/3.1. Boltzmann-eloszlás

Az első pontban (I/1.4.3., I/1.5.3.) már megfigyelhettük, hogy az atomok és az atommagok is bizonyos általános szabályok, az energiaminimumra való törekvés elve, illetve a Pauli-elv alapján épülnek fel. A sokatomos rendszerek esetében egy újabb **univerzális rendező elv** jut érvényre. Az ezt leíró törvényszerűségeket Boltzmann-eloszlásként idézik.



3.1.1. I/3.1.1. A részecskék állapotainak eloszlása

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

Korábbi termodinamikai ismereteink alapján tudhatjuk, hogy amennyiben egy rendszer termikus egyensúlyban van (hőmérséklete állandó), akkor a rendszer teljes energiája (E) úgy oszlik el a rendszert alkotó részecskék, pontosabban azokon belül is az egyes mozgásfajták, szabadsági fokok között, hogy **átlagosan minden szabadsági fokra $1/2kT$ energia jut** (ekvipartíció tétele; k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet). A tétel kapcsán fontos hangsúlyozni azt, hogy a megszabott energiamennyiség átlagosan értendő, tehát ennek alapján semmit sem mondhatunk az egyes részecskék, illetve mozgásfajták egyedi energiájáról. A helyzetet tovább bonyolítja az a tény, hogy bár a rendszer teljes energiája állandó ($E = \text{konst.}$), a részecskék egymással állandóan energiát cserélhetnek, amelynek nyomán az energia veszteség nélkül folyamatosan újra elosztódik nemcsak a részecskék, hanem az egyes mozgásfajták között is. Mit jelent akkor a címben szereplő „részecskék állapotai” kifejezés? (lásd I.3. megjegyzés).

A megjegyzésből is az derül ki, hogy energetikai szempontból a rendszer állapotát elvileg két lényegesen különböző módon jellemezhetjük. Egyrészt úgy, hogy megadjuk az összes egyedi részecske pillanatnyi energiáját, ezt nevezzük a rendszer egy **mikroállapotának** (lásd később is: III/3.3.4. rész). Másrészt pedig úgy, hogy megadjuk az energia eloszlását, azaz csak azt adjuk meg, hogy egy adott időpillanatban hány darab részecske (n_0, n_1, n_2, \dots) rendelkezik e_0, e_1, e_2, \dots energiával. Az **n_i betöltési számok egy sorozata, $\{n_0, n_1, \dots\} = \{n_i\}$ definiálja a rendszermakroállapotát** (lásd I.2. példa). Egy makroállapotot általában nagyon sok mikroállapot képes megvalósítani, egy n_i betöltési szám akár hosszabb ideig is nagyjából változatlan maradhat, miközben maguk a részecskék állandóan cserélődhetnek. Bár természetesen a rendszer pillanatnyi makroállapota is változhat az időben, **termikus egyensúly esetén van egylegvalószínűbb $\{n_i\}$ sorozat**, ami azt jelenti, hogy a rendszer szinte mindig ebben a makroállapotban található.

Tegyük fel, hogy a részecskék függetlenek (nem számolunk azzal, hogy a valós rendszerekben a teljes energia egy része a részecskék közötti kölcsönhatásból eredhet). Ebben az esetben a rendszer teljes energiája mindig az egyedi részecskék energiájának összege:

$$E = \sum_i n_i \varepsilon_i$$

Ludwig Eduard Boltzmann 1844–1906, osztrák fizikus
(I.23)

Jobb feltételezés híján elfogadjuk azt is, hogy a mikroállapotok egyformán valószínűek. Ilyen feltételek mellett az n_i betöltési számok a következőképpen adhatók meg:

$$n_i = \frac{N e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}}$$

(I.24)

ahol N az összes részecske száma:

$$N = \sum_i n_i$$

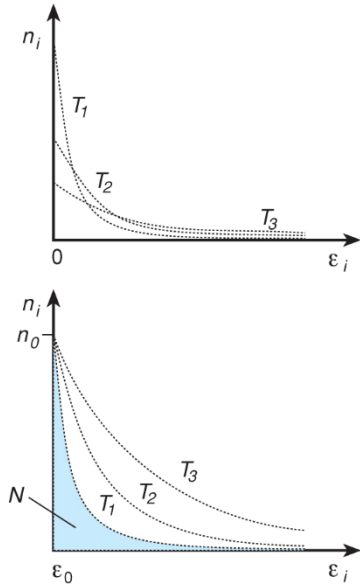
A (I.24) összefüggést nevezik Boltzmann-eloszlásnak. A törvény egyszerűbb, a gyakorlati alkalmazásokban jobban elterjedt másik lehetséges felírása az n_i/n_0 hányados megadása, ami (I.24)-ből egyszerűen származtatható:

$$\frac{n_i}{n_0} = \frac{N e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}} \sum_j e^{-\frac{\varepsilon_j}{kT}}}{\sum_j e^{-\frac{\varepsilon_j}{kT}} N e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}}} \quad n_i = n_0 e^{-\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_0}{kT}} \quad (\text{I.25})$$

ahol n_0 a legalacsonyabb, e_0 energiájú állapot betöltöttsége. (Ebben az összefüggésben a legalacsonyabb energiájú állapot energiájához (e_0) illetve betöltöttségéhez (n_0) viszonyítjuk a többi. A legtöbb esetben megtehetjük, hogy e_0 -t önkényesen az energiaskála zéruspontjának választjuk ($e_0 = 0$), mivel a tapasztalatok általában az energiakülönbségekre nézve szolgáltatnak adatokat. Az I.23. ábrán látható a Boltzmann-eloszlás

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

grafikus ábrázolása három különböző hőmérsékleten a kétfajta felírásnak megfelelően. Az ábráról a törvény szemléletes jelentése is leolvasható. Egy állapot relatív betöltöttsége csak a kT egységekben mért energiától függ. Ha a hőmérséklet alacsony (T_1), akkor (a gyorsan lecsengő exponenciális függvény miatt) csak a legalacsonyabb energiájú állapotok vannak számottevően betöltve. Magas hőmérsékleten (T_3) viszont a nagyobb energiájú állapotok is jelentősen betöltöttek (az exponenciális függvény kevésbé gyorsan változik). Megjegyezzük, hogy az (I.24) összefüggésből egyszerűen kifejezhető a $p_i = n_i/N$ hányados, ami annak a valószínűségét adja meg, hogy az ϵ_i energiájú állapot a rendszerben megvalósul.



I.23. ábra. A Boltzmann-eloszlás grafikus ábrázolása különböző hőmérsékleteken ($T_3 > T_2 > T_1$) az (I.24), illetve az (I.25) összefüggésnek megfelelően.

I.3. megjegyzés

Ha a részecskék közötti energiacsere például ütközéssel valósul meg, akkor minél nagyobb egy részecske energiája, annál valószínűbb, hogy veszít energiájából a következő ütközésnél; illetve minél kisebb, annál valószínűbb, hogy nyer. Az egyes részecskék állapota, tehát még termikus egyensúly esetén is folytonosan változik, miközben makroszkopikusan az egész rendszert ugyanolyan állapotúnak észleljük.

I.2. példa

Az egyszerűség kedvéért álljon a rendszerünk 6 részecskéből és legyen összesen 10 egységnyi (e) energiája. Az alábbi táblázat soraiban (1-4.) azt tüntettük fel, hogy hány részecske rendelkezik a fejlécben megadott energiával (betöltési számok). A négy számsorozat példa a rendszer egy-egy makroállapotára.

1.3. táblázat - A két görbesereg között az a lényeges különbség, hogy a felső azt is szemlélteti, hogy a görbék alatti terület, azaz a részecskék száma (N) állandó

	1e	2e	3e	4e	5e
1.	5	0	0	0	1
2.	4	1	0	1	0
3.	3	2	1	0	0
4.	2	4	0	0	0

Az 1. makroállapotban a 6 részecske közül bármelyiknek lehet $5e$ energiája, így ezt a makroállapotot 6 mikroállapot képes megvalósítani. Az összenergiát bármelyik sorban ellenőrizhetjük, például a másodikban: $41e + 12e + 14e = 10e$.

3.1.2. I/3.1.2. Milyen jelenségekben tapasztaljuk a Boltzmann-eloszlás érvényesülését?

Ebben a részben néhány igen különböző jelenségnél rámutatunk arra, hogyan érvényesül az univerzális Boltzmann-eloszlás a gyakorlatban.

a) A barometrikus magasságformula

Közismert tény, hogy Földünkön az atmoszféra felfelé haladva ritkul. Mi szabályozza ezt a jelenséget? Tegyük fel, hogy rendszerünk egy, a szélétől és minden egyéb zavaró hatástól mentes gázoszlop, amely termikus egyensúlyban van, tehát a hőmérséklet mindenhol azonos (megfeledezzünk arról, hogy ez a feltevés nagy magasságok esetén már biztosan nem teljesül). Ekkor érvényes rá az (I.25) összefüggés. Mivel a magasság növekedtével nő a lehetséges állapotok energiája, ennek megfelelően csökken az állapotok betöltöttsége.

Azt, hogy a gáz mennyire sűrű vagy ritka, az egységnyi térfogatban lévő molekulák számával ($n = N/V$), azaz a koncentrációval jellemezhetjük. A betöltési számok (n_i, n_0) használata helyett célszerűbb azok arányát képezni (n_i/n_0), mert ez az arány éppen a közvetlenül mérhető koncentrációarányokkal egyezik meg. További egyszerűsítésként a lehetséges állapotok energiáját egyetlen fajta m tömegű molekulára (mondjuk O_2 -re) írjuk fel $\varepsilon = \varepsilon_{kin.} + \varepsilon_{pot.}$. Hogyan függ ez a mennyiség a magasságtól? Amint azt később be is látjuk (lásd I.3.2.2), a mozgási energia eloszlása nem függ a magasságtól (T azonos), ezért annak járuléka a magasságtól függetlenül a mozgási energia átlagos vagy várható értékével ($\langle \varepsilon_{kin.} \rangle$) helyettesíthető. A potenciális energia pedig az ismert összefüggéssel, $\varepsilon_{pot.} = mgh$ adható meg (ahol g a nehézségi gyorsulás). Ezek után az (I.25) összefüggésbe helyettesítve kapjuk:

$$\frac{n(h)}{n(0)} = e^{-\frac{(mgh + \langle \varepsilon_{kin.} \rangle) - (mg0 + \langle \varepsilon_{kin.} \rangle)}{kT}} = e^{-\frac{mgh}{kT}}.$$

(I.26)

Az $n(h)/n(0)$ hányados tehát megadja, hogy T hőmérsékletű termikus egyensúly esetén egy 0 referencia magasságtól (például a tengerszinttől) mért h magasságban mekkora az m tömegű részecskék koncentrációjának aránya a referencia magasságban mért koncentrációhoz ($n(0)$ -hoz) viszonyítva. Ugyanehhez az eredményhez juthatunk egy másik úton is, amit az alábbiakban mutatunk be (lásd „A barometrikus magasságformula makroszkopikus megközelítése”).

b) A fémek termikus emissziója (hőhatás következtében létrejövő elektronkilépés).

A fémekben közös pályán lévő delokalizált elektronok sok szempontból úgy viselkednek, mint a gázok. Ez az „elektronatmoszféra” a Föld légköréhez hasonlóan exponenciálisan rétegződött (lásd az előző a) pontot). A rétegződést azonban itt nem geometriai, hanem energetikai értelemben használjuk. A fémen kívüli állapot eléréséhez meglehetősen nagy energia, a W_a kilépési munkaszükség, ami ahhoz kell, hogy az elektront a pozitív fémrácsból elszakítsuk. Minél melegebb a fém, annál „magasabbra” ér az „elektronatmoszféra”, annál több elektron tud a fémből eltávozni. Számukat ugyancsak a Boltzmann-eloszlás írja le.

A kérdés ugyanis most az, hogy hány darab részecske rendelkezik $\varepsilon_i = W_a$ vagy ennél több energiával. Jelöljük ezek számát N_i -l. A kérdésre adandó válasz érdekében össze kell adni azokat az n_i betöltési számokat, amelyekre $\varepsilon_i \geq W_a$. Ez azzal ekvivalens, hogy ε_i -től kezdődően meghatározzuk az eloszlásgörbe alatti területet. Ez nem nehéz feladat, ha tudjuk, hogy az exponenciális függvény azzal a tulajdonsággal is rendelkezik, hogy egy adott helyen vett függvény értéke arányos az ugyanonnan mért görbe alatti területtel (lásd I.23. ábra), így $n_0/N = n_i/N_i$. Az (I.25) összefüggés alapján

$$n_i = n_0 e^{-\frac{\varepsilon_i}{kT}}, \text{ és } N_i = N e^{-\frac{W_a}{kT}}.$$

(I.27)

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

A termikus emisszió következményeit, illetve az (I.27) összefüggés gyakorlati érvényesülését figyelhetjük meg például a katódsugárcsőnél (VII/1.5.1.), a röntgensőnél (II/3.1.), de a fotoelektron-sokszorozónál is (VIII/3.2.).

c) Koncentrációs elemek, Nernst-egyenlet

Ha két hely (A és B) között az elektromos feszültség U , ez azt jelenti, hogy az egy elektronnyi töltéssel rendelkező részecskékre nézve a potenciális energiakülönbség $e_{\text{pot.}} = qU$ (q az elemi töltés). Termikus egyensúlyban a két helyen vett betöltési szám, illetve a töltött részecskék koncentrációjának aránya ugyancsak a Boltzmann-eloszlás szerint adható meg:

$$\frac{n_A}{n_B} = e^{-\frac{qU}{kT}}$$

(I.28)

Ennek a megfordítottja is igaz: ha az elektronok vagy más töltött részecskék koncentrációja két helyen különböző (n_A és n_B), akkor a két hely között mérhető feszültség:

$$U = \frac{kT}{q} \ln \frac{n_A}{n_B}.$$

(I.29)

Ez a törvény a Walter Hermann Nernst (1864–1941) német vegyész és fizikustól származó, kémiából is ismert Nernst-féle egyenlettel analóg (1920, Nobel-díj). Ez az összefüggés írja le például azt a feszültséget, ami a K^+ ionok koncentrációjának különbsége miatt az idegsejt és a környezete között fellép. Ennek a „koncentrációs elemnek” a rövid kisülése, mint idegimpulzus fut végig a sejtthártya mentén, amire később szintén visszatérünk (lásd III/4.2.2. és III/4.4.).

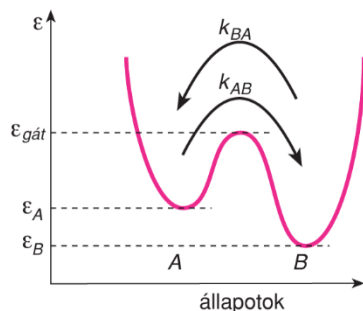
d) Kémiai reakciók egyensúlya, sebessége

Minden kémiai reakció egy vagy néhány atom átmenetét jelenti az egyik kötési állapotból a másikba. A legegyszerűbb esetben egy molekula az A állapotból a B állapotba jut. Általában a megfordított átmenet is lehetséges: $A \leftrightarrow B$. Egyensúly esetén mindkét irányban ugyanannyi molekula változtatja meg az állapotát. A két állapotban a molekuláknak általában különböző az energiájuk: ϵ_A , illetve ϵ_B (I.24 ábra). Egyensúlyban a két állapot között az eloszlást a következő összefüggés írja le:

$$\frac{n_A}{n_B} = e^{-\frac{\epsilon_A - \epsilon_B}{kT}}.$$

(I.30)

Ez nem más, mint a tömeghatás törvénye néven ismert összefüggés. Az $n_A/n_B = K$ hányados az egyensúlyi állandó, amelynek negatív tízes alapú logaritmusát a reakció pK -értékének nevezzük. Ahogy látni lehet, ez is hőmérséklettől függő mennyiség.



Az, hogy egy ilyen reakció milyen gyorsan zajlik le, nemcsak a kiinduló és a végállapot energiakülönbségétől függ. Az átmenet során ugyanis legtöbbször egy közbülső, átmeneti állapotnak kell létrejönnie, amelynek energiája mindkét állapot energiájánál magasabb. Így az átalakuláshoz egy bizonyos nagyságú $D_{e_{\text{gát,A}}} = e_{\text{gát}} - \epsilon_A$

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

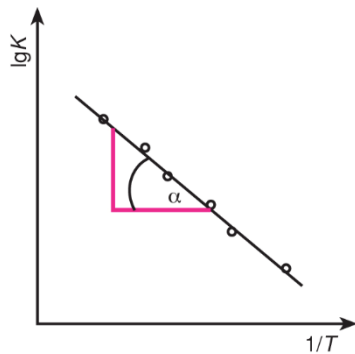
aktiválási energia szükséges, amely a kiindulási és a végállapot között elhelyezkedő energiagát ($\epsilon_{\text{gát}}$) magasságától függ (I.24. ábra). (Természetesen a megfordított átmenet esetében ($B \rightarrow A$) az aktiválási energia $\Delta\epsilon_{\text{gát},B} = \epsilon_{\text{gát}} - \epsilon_B$.) Ahhoz hogy a reakció létrejöjjön, a rendszernek a $\Delta\epsilon$ „magasságon” át kell jutnia. Ez azonban csak a részecskék egy töredékének sikerül, amelyek részaránya a hőmérséklet növekedésével $e^{-\Delta\epsilon/kT}$ -vel arányosan növekszik. Mivel az energiagáton átjutott részecskék száma szabályozza a reakciósebességet, ezért a reakciósebesség is ugyanilyen arányban növekszik. A sebességi állandókra tehát igaz, hogy

$$k_{AB} = \text{konst} e^{-\frac{\Delta\epsilon_{\text{gát},A}}{kT}} \quad \text{illetve} \quad k_{BA} = \text{konst} e^{-\frac{\Delta\epsilon_{\text{gát},B}}{kT}}. \quad (\text{I.31})$$

Hányadosuk pedig visszaadja az egyensúlyi állandót:

$$\frac{k_{BA}}{k_{AB}} = \frac{e^{-\frac{\Delta\epsilon_{\text{gát},A}}{kT}}}{e^{-\frac{\Delta\epsilon_{\text{gát},B}}{kT}}} = e^{-\frac{\epsilon_{\text{gát}} - \epsilon_B}{kT} + \frac{\epsilon_{\text{gát}} - \epsilon_A}{kT}} = e^{-\frac{\epsilon_A - \epsilon_B}{kT}} = K \quad (\text{I.32})$$

A reakciósebességet a katalizátorok, a biokémiai reakciókban az enzimek gyakran több nagyságrenddel növelhetik: Ezt nem a kiindulási és a végállapot energiaszintjének eltolásával, hanem az aktivációs küszöb leépítésével érik el. Ezek a megfontolások legnagyobb részben Svante August Arrhenius (1859–1927) svéd kémikustól származnak (1903, Nobel-díj). A róla elnevezett ábrázolásmódban az egyensúlyi állandó (illetve a sebességi állandó) értékeinek a Boltzmann-eloszlás alapján feltételezett hőmérséklettől való függését használjuk fel arra, hogy az állapotok energiakülönbségét (illetve az aktivációs energiát) kísérleti úton meghatározzuk (I.25. ábra).



$$\lg K = -\lg e \cdot \frac{\epsilon_A - \epsilon_B}{k} \cdot \frac{1}{T}$$

I.25. ábra. Példa az Arrhenius-féle ábrázolásra: az egyensúlyi állandó logaritmus a hőmérséklet reciprokának függvényében.

$$\text{tg} \alpha = -\lg e \cdot (\epsilon_A - \epsilon_B) / k$$

A barometrikus magasságformula makroszkopikus megközelítése

Tételezzük föl, hogy a Boltzmann-eloszlásról még nem hallottunk és csak annyit tudunk, hogy az idealizált gázoszlop egyensúlyban van.

Az egyszerűség kedvéért fogalmazzuk meg az egyensúly feltételét a nyomás segítségével $h_2 > h_1$ magasságok esetén: h_1 magasságban a nyomás éppen a $Dh = h_2 - h_1$ magasságú levegőoszlop súlyából származó többletnyomás

miatt nagyobb, mint h_2 magasságban. A többletnyomás tehát éppen a $\rho g Dh$ hidrosztatikai nyomással egyenlő. ρ a gáz sűrűsége, g a nehézségi gyorsulás. Valójában mindkét mennyiség függ a magasságtól, bár különböző mértékben, így csak akkor tekinthetők állandónak, ha Dh elég kicsi.

Az egyensúly feltétele tehát kis Dh -ra: $Dp = -\rho g Dh$, ahol a negatív előjel p illetve h ellentétes változását fejezi ki. Ha még azt is kihasználjuk, hogy a sűrűség és a nyomás arányosak ($\rho = \text{konst.} \cdot p$) egymással, akkor az egyensúlyt kifejező egyenlet a következő alakra hozható:

$$\frac{\Delta \rho}{\Delta h} = -\text{konst.} \rho g$$

Mint később látni fogjuk (lásd II/1.1.3. rész) az ilyen típusú egyenletek (egy mennyiség és annak megváltozása arányosak egymással) megoldása mindig exponenciális függvény:

$$\rho(h) = \rho(0) e^{-\text{konst.} gh}$$

Az ebben szereplő mennyiségek mind makroszkopikusak: $\rho(h)$, $\rho(0)$ a sűrűségek h , illetve 0 magasságokban, g a nehézségi gyorsulás, csak a másik konstans értékét nem ismerjük.

Az általános gáztörvényt ($pV = NkT$), illetve ($p = NkT/V$) és a sűrűség definícióját ($\rho = mN/V$, ahol m egyetlen molekula tömege) felhasználva a hiányzó konstans is meghatározható $\rho = \text{konst.} \cdot p$:

$$mN/V = \text{konst.} NkT/V \text{ tehát } \text{konst.} = m/kT$$

Így a fenti összefüggés a következő alakra hozható:

$$\frac{\rho(h)}{\rho(0)} = e^{-\frac{mgh}{kT}}$$

Mivel a sűrűség és a koncentráció arányos egymással ezért ez utóbbi és az (1.26) összefüggés azonos értelmű.

3.2. I/3.2. Gázok

A tapasztalatok és az elvégzett kísérletek szerint a különböző gázok tulajdonságai nagyon hasonlóak. Ez a hasonlóság teszi lehetővé azt, hogy a gázok viselkedését egységesen a gáztörvényekkel írjuk le.

3.2.1. I/3.2.1. Ideális gáz

Az ideális gáz modelljét úgy képzelhetjük el, hogy egy edényben a **nagyszámú** (N), **azonos tömegűgömb alakú részecske rendszertelen mozgást végez**, miközben egymással és az edény falával rugalmasan ütköznek. Minden egyéb **kölcsönhatás, valamint a részecskék ösztérfogata** az edény térfogatához képest **elhanyagolhatóan kicsi**. (Határesetben a részecskék térfogatát egyáltalán nem vesszük figyelembe, ilyenkor pontszerű részecskékről beszélünk, amelyek egymással már nem, csak az edény falával ütközhetnek.) A környezettel termikus egyensúlyban levő rendszerben a részecskék egyenletesen töltik ki az edény térfogatát, és egymástól függetlenül (a tér minden irányába) haladó mozgást végeznek. A gáz teljes energiataralmát (belső energiáját, $E_{\text{belső}}$) a részecskék kinetikus energiájának összege adja meg.

Egyetlen részecske kinetikus energiája $e_{\text{kin}} = (1/2)mv^2$, ahol m a részecske tömege, v pedig a sebessége. Ennek átlagértéke az I/3.1.1. részben is említett ekvipartíció tétel alapján meghatározható. A csak haladó (transzlációs) mozgást végző részecske szabadsági foka 3, az egy szabadsági fokra jutó átlagos energia pedig

$$\frac{1}{2} kT = \frac{1}{2} m \overline{v_x^2} = \frac{1}{2} m \overline{v_y^2} = \frac{1}{2} m \overline{v_z^2} \quad (1.33)$$

(Az átlagolást a felülvonás jelzi, amit a négyzetre emelés után kell elvégezni.) Mivel $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = v^2$, ezért 1 illetve N részecske esetében

$$\frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT \quad E_{\text{belső}} = \frac{3}{2} NkT$$

A mérési adatokra illesztett egyenes meredekségéből ($\tan\alpha$) az állapotok energiakülönbsége meghatározható: (I.34)

Ezek az összefüggések a **hőmérséklet** egyfajta definíciójának is tekinthetők.

A modellben a **gáz nyomása** a részecskéknél az edény falával való ütközései során kifejtett erőlközésekből származik. Tehát a nyomást az egységnyi felületre jutó, egységnyi idő alatt bekövetkező impulzusváltozások átlaga adja meg.

A gáz állapotát jellemző paraméterek között az állapotegyenlet teremt összefüggést:

$$pV = NkT \quad (I.35)$$

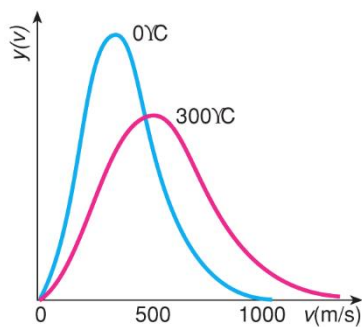
ahol N , V , p , T az állapotot leíró termodinamikai paraméterek: részecskeszám, térfogat, nyomás és hőmérséklet; k a Boltzmann-állandó.

Az ideális gázban a rugalmas ütközéseken kívül minden kölcsönhatást elhanyagolunk, ezért az ilyen rendszerek a legrendezetlenebbek.

3.2.2. I/3.2.2. A Boltzmann-eloszlás következményei ideális gázban: a Maxwell-féle sebességeloszlás

A rendezetlenség még az ideális gázban sem jelent teljes „káoszt”, mert bizonyos szabályok azért itt is érvényre jutnak. Ebben a részben azt mutatjuk meg, hogy a Boltzmann-eloszlás érvényesülése révén nemcsak a részecskék sebességnégyzetének átlagértéke, hanem az egyedi részecskék sebessége (pontosabban annak abszolút értéke) is statisztikai értelemben meghatározott (lásd „*A molekulák sebességének eloszlása*”).

Az I.26. ábrán éppen ez látható, ahol a v sebesség abszolút értékek eloszlását az ún. **Maxwell-féle sebességeloszlást** mutatjuk be grafikusán, két hőmérsékleten. Megfigyelhető, hogy a hőmérséklet emelésével a sebesség abszolút értékének átlaga (az ekvipartíció tételének megfelelően) nő, és az eloszlásfüggvény szélesedik. Mindebből arra következtethetünk, hogy még a legrendezetlenebb rendszerek is bizonyos statisztikai törvények által előírt szabályoknak engedelmeskednek.



A molekulák sebességének eloszlása

Az egyszerűség kedvéért hanyagoljuk el a részecskék egymásközti ütközését és induljunk ki a barometrikus magasságformulából (I.26 összefüggés), mely szerint a molekulák koncentrációja a magassággal exponenciálisan csökken. Az egyszerűsített rendszerben ez oly módon képzelhető el, hogy a referenciamagasságban (0 szinten) felfelé haladó molekulák egy része túl lassan mozog ahhoz, hogy a h magasságot elérje (gondoljunk a felfelé történő hajításokra). Jelöljük u -val azt a függőleges sebességet, ami az ideális gázban, egy referenciamagassághoz képest a h magasság eléréséhez éppen szükséges. Ekkor a kinetikus energia:

$$\frac{1}{2} mu^2 = mgh$$

Az $y(v)Dv$ görbe alatti terület megadja a v és $v + Dv$ közé eső sebességgel (sebesség nagysággal) rendelkező molekulák hányadát

Ebben az esetben időegység alatt a 0 szinten $v_z > u$ sebességgel áthaladó molekulák száma megegyezik a h magasságon $v_z > 0$ sebességgel áthaladó molekulák számával. Ezt a molekula koncentrációkra felírva:

$$n_{v_z > u}(0) = n_{v_z > 0}(h)$$

Alkalmazzuk a (I.26) formulát csak a $v_z > 0$ sebességgel (azaz a felfelé) mozgó molekulákra, valamint felhasználva az előbbi összefüggéseket:

$$\frac{n_{v_z > 0}(h)}{n_{v_z > 0}(0)} = e^{-\frac{mgh}{kT}} = \frac{n_{v_z > u}(0)}{n_{v_z > 0}(0)} = e^{-\frac{mv^2}{2kT}}. \quad (1)$$

A kifejezés megadja az u -nál nagyobb függőleges sebességkomponenssel ($v_z > u$) rendelkező molekulák koncentrációját az összes felfelé mozgó molekula koncentrációjához viszonyítva.

Mivel a referencia magasság ($h = 0$) nincsen kitüntetve, ezért a sebesség (és így a mozgási energia is) minden h magasságban ugyanilyen eloszlású. Egy kicsivel több matematikai ismerettel az is belátható, hogy a v_z sebességkomponens eloszlását, $y(v_z)$ -t (1)-gyel megegyező alakú összefüggés írja le:

$$y(v_z) = \text{konst.} \cdot e^{-\frac{v_z^2}{2kT/m}} \quad (2)$$

ahol $y(v_z)Dv_z$ megadja a v_z és $v_z + Dv_z$ közé eső függőleges sebességkomponenssel rendelkező molekulák hányadát. A (2) kifejezés azt jelenti, hogy **v_z Gauss-eloszlású változó. Az eloszlás várható értéke 0, szórása pedig $\sqrt{kT/m}$.** Ebből v abszolút értékének eloszlását is meghatározhatjuk, és így a **Maxwell-féle sebességeloszláshoz** jutunk.

Ehhez a matematikai statisztikának azt a tételét kell felhasználnunk, hogy a független (standard) Gauss-eloszlású változók négyzetösszegének négyzetgyöke χ -eloszlású változót eredményez. Mivel

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$$

és a komponensek függetlenek, valamint Gauss-eloszlásúak, a tétel alkalmazható. Így a Maxwell-féle sebességeloszlás a χ -eloszlásnak egy speciális formája.

3.2.3. I/3.2.3. Reális gáz

Különösebb előtanulmányok nélkül is méltán gondolhatjuk, hogy a gázból folyadékká történő átalakulást a részecskék között ható vonzóerők idézik elő, a folyadék térfogatát pedig elsősorban az összenyomhatatlannak feltételezett, térfogattal rendelkező (nem pontszerű) részecskék térkitöltése jelenti. Mivel az ideális gáz modelljében épp ettől a két tulajdonságtól tekintettünk el (a gáz molekuláinak kiterjedését, valamint a köztük lévő kölcsönhatásokat elhanyagoltuk), nem is várható, hogy magyarázatot kapunk az említett gáz-folyadék átalakulásra. Az ilyen átalakulás közelében a gáz biztosan nem ideális, és viselkedését nem a 3.13 állapotegyenlet ($pV = NkT$) írja le.

Egy reálisabb leírás érdekében tehát abból a térfogattól, amelyben a molekulák szabadon mozoghatnak (azaz az edény térfogatából, V -ből), le kell vonni a **részecskék saját térfogatát**. Ezenkívül **figyelembe kell vennünk** azt, hogy a reális gáz az ideális gáznál valamivel **kisebb nyomást fejt ki a falakra**, mert amikor egy molekula a falhoz, vagyis a molekulahalmaz széléhez közeledik, a többiek vonzása kissé lefékezi.

Ha egyetlen molekula saját térfogata b , akkor a gázcsepp mozgására az edényben csak a $V - Nb$ térfogat áll rendelkezésre. Ezt a korrekciót figyelembe véve a nyomásra a $p = NkT/(V - Nb)$ -t kapnánk. A nyomás azonban az előbb említett vonzóhatás miatt ennél az értéknél kisebb. A csökkenés mértéke egyrészt a falhoz közeledő egyetlen molekulára a többi részecske által kifejtett vonzóerőtől, másrészt az időegység alatt a falnak ütköző molekulák számától függ. Mindkét mennyiség arányos az egységnyi térfogatban lévő molekulák számával, azaz az $n = N/V$ részecskekonzentrációval. Így a falra gyakorolt p nyomás egy n^2 -tel arányos taggal csökken:

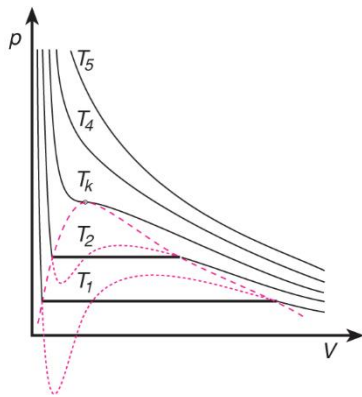
$$p = \frac{NkT}{V - Nb} - an^2, \quad (I.36)$$

ahol a az anyagi minőségtől függő állandó, amely az intermolekuláris erők nagyságára jellemző.

Ebből az összefüggésből (I.36) kapjuk a reális gázokra vonatkozó, **Van der Waals-féle állapotegyenletet**:

$$\left(p + a \frac{N^2}{V^2}\right)(V - Nb) = NkT. \quad (\text{I.37})$$

Ennek izotermáit ($p(V)$ diagramját) mutatja be az I.27. ábra. Elég magas hőmérsékleten az izoterma alakja megközelítően hiperbola $p \sim 1/V$. Ilyen **magas hőmérsékleten** a gázt nagy nyomáson sem lehet cseppfolyósítani, tehát **olyan, mint az ideális gáz**. Növekvő nyomás hatására csupán egyre sűrűbbé válik. Szobahőmérsékleten így viselkedik például a levegő és a hidrogén: még az 50 bar nyomású palackban (azaz a normális légnyomás ötvenszeresén) is légneműek, ellentétben a propánnal és a butánnal, amelyek a palackban jól hallhatóan lötyögnek.



Ahhoz, hogy a gázt cseppfolyósítsuk, az ún. kritikus hőmérséklet (T_c) alá kell hűteni. Ez alatt a hőmérséklet alatt az (I.37) összefüggés szerinti izotermák egy minimummal és egy maximummal rendelkező, „völgy-hegy” alakú görbét írnak le.

A kondenzáció során azonban az izotermák völgy és hegy alakú részei nem jelennek meg; az átmenet egy olyan állandó nyomású egyenes szakaszon (az ún. Maxwell-féle egyenesen) játszódik le, amely a völgyből és a hegyből ugyanakkora területet vág le. Ez a nyomás az adott hőmérsékleten a telített gőz nyomása. Így zajlanak le a folyamatok, ha a rendszer állapotváltozása olyan lassú, hogy közben mindig egyensúly áll fenn.

A Van der Waals-egyenlet pontosabban írja le a gázok viselkedését, mint az (I.35) állapotegyenlet ($pV = NkT$), de a pontosság növelése érdekében le kellett mondanunk az egyenlet anyagi minőségtől független általános érvényességéről. Természetesen a Van der Waals-egyenletnél jobb közelítések is léteznek, de azok sokkal bonyolultabbak.

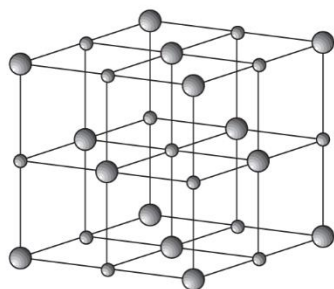
3.3. I/3.3. Szilárd anyagok

Az I/2. részben tárgyalt kötéstípusok a szilárd anyagok szerkezetének kialakulásában ugyanúgy szerepet játszanak, mint a molekulák létrejöttében; egy szilárd test sok szempontból olyan, mint egy óriás molekula. Ebben a részben csak a **kristályos anyagokkal** foglalkozunk, melyek legfontosabb tulajdonsága a **periodikus hosszú távú rendezettség**. (Az amorf, üvegszerű szilárd anyagokat inkább igen nehezen folyó, nagyon viszkózus folyadékoknak tekinthetjük.)

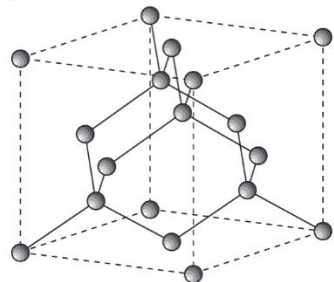
3.3.1. I/3.3.1. A kristályos állapot

Ha az ideális gáz a legrendezetlenebb állapotú anyagok modellje, amelyben a részecskék között semmiféle kölcsönhatás nincsen, akkor a különböző kötésekkel összetartott ideális kristály az ideális gáz szerkezeti ellenpólusa, a legrendezettebb anyagi halmazok modellje. Az **ideális kristályazonos szerkezeti elemeknek a térben szabályosan ismétlődő végtelen sorozata**. A kristály geometriai tulajdonságait, illetve szimmetriáját a **térrácsal jellemezzük**. (A kristályszerkezetet akkor kapjuk meg, ha a térrács minden pontjába elhelyezzük a megfelelő „építőelemeket”.) A **térrács** a szorosan egymás mellé helyezett alapegységekből, az **elemi cellákból építhető fel**. Megmutatható, hogy összesen 14-féle különböző térrács létezik. Ezek közül két gyakori típust mutat be az I.28. ábra.

a



b

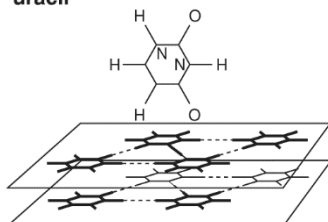


I.27. ábra. Van der Waals-izotermák ($p(V)$ diagram; $T_1 < T_2 < T_k < T_4 < T_5$). Az ábrán a Maxwell-egyeneseket (vastagabb vonalak) is feltüntetjük, amely mentén a forrás vagy a párolgás egyensúlyban végbemegy. Ezek az egyenesek a kritikus hőmérséklet (T_k) alatti izotermákból (pontozott vonalak) fölül és alul egyenlő területeket metszenek ki. A szaggatott vonalon belül a két fázis (folyadék és telített gőz) együtt van jelen.

A kristályok négy csoportba sorolhatók aszerint, hogy milyen kölcsönhatások tartják össze szerkezeti elemeiket. Így megkülönböztetünk kovalens, ionos, fémkristályokat valamint másodlagos kötésekkel összetartott kristályokat (lásd I/2. rész). Ennek megfelelően beszélünk **atom-, ion-, fémes és molekulárcsról**. Az I.28. ábrán az ionos kötésekkel összetartott NaCl, valamint a szomszédos atomok közötti kovalens kötésekkel összetartott Si egy-egy elemi cellája látható. A fémes kötéssel összetartott kristályokban az ismétlődő egységek pozitív ionok (az atommagok és a belső pályák elektronjai), amelyeket a csaknem szabad elektronként elképzelt, az egész kristályra kiterjedő delokalizált vegyértékelektronok „felhője” tart össze (lásd I/2.1.). Meg kell jegyeznünk, hogy ez a kép elsősorban az alkálifémekre (például nátriumra, káliumra) érvényes, amikor az iontörzs és a vezető elektronok közötti kölcsönhatás adja a kötési energia legnagyobb részét. Az átmeneti fémek (például vas, wolfrám) esetében a belső héjak elektronjai a kötés kialakításához jelentős mértékben hozzájárulnak.

A kovalens, ionos vagy fémes kötéssel felépülő kristályok mellett molekulák is képesek kristályszerkezetbe rendeződni. Ilyen esetben a molekulák alkotják a kristályrács elemeit, és a felépülést a gyengébb, intermolekuláris kölcsönhatások szabályozzák. A molekulárcsra jó példa a kristályos uracil (I.29. ábra), de itt említhetjük meg a jégkristályokat is, melyeket H-kötések tartanak össze (lásd I/4.1.2. rész).

uracil



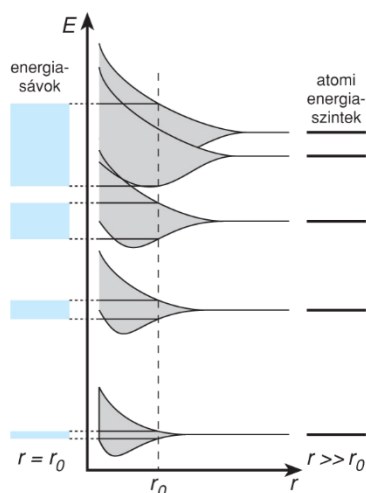
Az ideális kristállyal ellentétben a gyakorlatban a **kristályos rend általában csak mikroszkopikus távolságokra terjed ki**. Ha egy anyag olyan rendezett egységek sokaságából épül fel, amelyekben belül azonos típusú kristályos rend áll fenn, de azok egymástól méretben és orientációban különböznek, akkor **mikrokristályos anyagról** beszélünk. Ilyen esetben a kristályos rend tartományait, a szemcséket rendezetlen határfelületek, szemcsehatárok választják el egymástól. Ezek a szemcsék az atomi méretek kicsisnyisége miatt még így is óriási mennyiségű rendezett építőelemet tartalmazhatnak (például 10 mm-es lineáris méret esetén

körülbelül 10^{14} darabot). Ha a kristályos rend az ideális kristályhoz hasonlóan folyamatosan kitölti az anyag teljes térfogatát, akkor **egy kristályról** beszélünk. Az egykristály-állapot csak a kristályosítás különleges technikai megoldásaival érhető el. Ilyen egykristályok, például a nukleáris medicina területén széles körben elterjedt szcintillációs detektor-kristályok, vagy a félvezető technikában alkalmazott szilíciumkristályok (lásd I/3.3.4. és VIII/3.2.).

A kristályok felépítésüknél fogva **anizotropok**, ami azt jelenti, hogy **vannak bennük kitüntetett irányok**. Ez például abban nyilvánulhat meg, hogy a fény nem ugyanakkora sebességgel terjed a kristályon belül a különböző irányokban.

3.3.2. I/3.3.2. Energiasávok

A kristályos rendben összekapcsolódó atomok elektronállapotai lényegesen különböznek az izolált, egymással kölcsönhatásban nem lévő atomok diszkrét állapotaitól. (Egyetlen hidrogénatom lehetséges energiáit az I.9. ábrán tüntettük fel, de más atomokra is nagyon hasonló sémát kaphatunk.) Amíg egy azonos atomokból álló „rendszerben” az atomok között nincs kölcsönhatás, addig minden atom ugyanabban a kvantumállapotban található, tehát ugyanazokkal a diszkrét atomi energiaszintekkel rendelkezik. Ez nem mond ellent a Pauli-elvnek, mivel N db független atom kvantummechanikai értelemben nem tekinthető egy rendszernek. Amint azonban az atomok a kristály felépülése érdekében egyre közelebb kerülnek egymáshoz és az atomi elektronok állapotfüggvényei kezdik átfedni egymást, a **Pauli-elv érvényre jut**. Az azonos kvantumállapotok elkerülését a rendszer úgy valósítja meg, hogy a **kölcsönhatásba kerülő elektronok atomonként azonos energiaszintje Ndb közeli szintre „hasad fel”**. (A felhasadás az atomok közötti távolság (r) függvényében a magok taszítása miatt nem szimmetrikus.) Mivel N igen nagy szám (Avogadro-számmal), ezért mindegyik atomi energiaszintből felhasadt **közeli szintek sokasága** gyakorlatilag egy-egy **folytonos energiasávot képez**, ahogy azt az I.30. ábrán szemléltetjük.



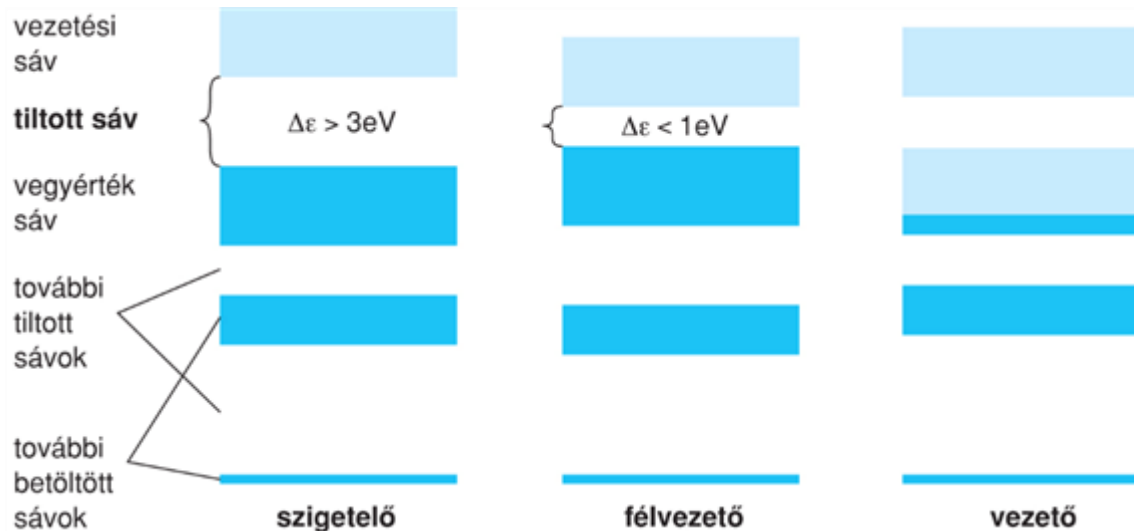
Mivel a kölcsönhatás a legkülső, vegyértékelektronoknál a legjelentősebb, ezért a felhasadás is itt a legnagyobb mértékű. Ezt a sávot **vegyértéksávnak** nevezzük (I.31. ábra). Az atomok belső elektronjaiból létrejövő energiasávok a maghoz közeledve egyre keskenyebbek, (a belső elektronpályák energiáját az atomok közötti kölcsönhatás egyre kisebb mértékben módosítja). Az egymást követő energiasávok közötti részek, ahol nincsenek megengedett energiaszintek, **tiltott sávoknak** nevezzük (I.31. ábra). Két energiasáv oly mértékben is kiszélesedhet, hogy a közöttük lévő tiltott sáv teljesen eltűnik. Ilyenkor a két sáv egy szélesebb, közös sávot alkot (lásd az I.30. ábra legfelső részét).

Eddigi tapasztalatainkból is tudjuk, hogy az anyagok igen sok tulajdonságát a leglazábban kötött vegyértékelektronok lehetséges energiaátmenetei határozzák meg. A kristályos anyagok esetében is elsősorban a vegyértéksáv betöltöttsége, illetve az onnan történő átmenet lehetősége a meghatározó.

Ha a vegyértéksávon belül minden energiaállapotban található elektron, tehát a sáv „teljesen betöltött”, akkor energiafelvétel csak akkor lehetséges, ha legalább a következő tiltott sáv szélességének ($D\varepsilon$) megfelelő minimális energiaadag rendelkezésre áll. Az ekkora energiával történő gerjesztés során egy elektron a tiltott sáv feletti üres energiasávba juthat. Mivel egy ilyen elektronállapot közelében a sávon belül igen sok megengedett, de betöltetlen energiaszint található, az elektron egy külső elektromos térből tetszőlegesen kis energiát felvéve

mozgásba jöhet. A kristályban „elektromos áram” indulhat meg. Ezért ezt a megengedett állapotokat jelentő üres sávot **vezetési sávnak** nevezzük (I.31. ábra).

A vezetés a vegyértéksávban is bekövetkezhet, ha teljesül, hogy egy elektronállapot közelében a sávon belül igen sok megengedett, de betöltetlen energiaszint legyen található, ami „részlegesen betöltött” vegyértéksáv esetén lehetséges.



3.3.3. I/3.3.3. A tiltott sáv szélessége által meghatározott tulajdonságok; szigetelők, félvezetők, vezetők

Ebben a részben csak a vegyértéksáv és a vezetési sáv közötti tiltott sávval foglalkozunk, mivel ennek van jelentősége a kristályos anyagok elektromos és optikai tulajdonságai szempontjából. Az előző rész végén láthattuk, hogy elektromosan vezető állapot teljesen betöltött vegyértéksáv esetén akkor jöhet létre, ha az elektronok valamilyen gerjesztés útján legalább a tiltott sáv szélességének ($D\varepsilon$) megfelelő többletenergiahoz jutnak. Mivel az energiaközlés egyik legegyszerűbb módja a termikus gerjesztés, a $D\varepsilon$ energiaadag nagyságát érdemes a Boltzmann-eloszlás szemléletét követve (lásd I/3.1.1. I/3.1.2.) a kT termikus energiához hasonlítani.

Ha a vegyértéksáv teljesen betöltött és $D\varepsilon \gg kT$, azaz a tiltott sáv elegendően „széles”, akkor termikus okokból elektronok gyakorlatilag nem kerülhetnek a vezetési sávba. **Az ilyen anyagok a szigetelők** (lásd I.31. ábra). **Ha azonban $D\varepsilon$ csak egy vagy két nagyságrenddel nagyobb, mint kT , akkor a tiltott sáv már elegendően „keskeny” ahhoz, hogy a vezetési sávba került elektronok száma biztosítja az elektromos vezetés feltételét. Az ilyen anyagok a szerkezeti vagy tisztafélvezetők** (lásd I.31. ábra). Azt mondhatjuk tehát, hogy a szigetelők és a tiszta félvezetők sáv szerkezete nagyon hasonló, az elektromos tulajdonságaikban tapasztalható különbség csak a tiltott sáv szélességének különbözőségéből ered (lásd „A „széles”, illetve „keskeny” tiltott sáv ($D\varepsilon$) jelentése a gyakorlatban”).

Azt mondhatjuk tehát, hogy **ha $D\varepsilon$ néhány eV nagyságú, akkor az anyag szobahőmérsékleten szigetelő, ha pedig csak néhány tized eV nagyságú, akkor** (szintén szobahőmérsékleten) **tiszta félvezető.**

Bár ez utóbbi megállapítás érvényességét nem érinti, meg kell jegyeznünk, hogy az alkalmazott (a fémek termikus emissziójánál bevált) gondolatmenet itt nem egészen helytálló. Ha a félvezetők fajlagos vezetőképessége (σ) csupán a tiltott sávon átjutó termikusan gerjesztett elektronok számával lenne arányos, akkor azt a következő formula adná meg:

$$\sigma = \text{konst.} \cdot e \frac{\Delta\varepsilon}{kT} \quad (\text{I.38})$$

A vezetőképességet azonban nemcsak a vezetési sávban mozgékonyvá vált elektronok, hanem a vegyértéksávban hátrahagyott elektronhiányok, azaz **lyukakis befolyásolják** (lásd „Töltéshordozók a félvezetőkben”).

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

A előbbiek alapján (az I.38 összefüggés helyett) a fajlagos vezetőképességre a következő eredményt kapjuk (lásd még I.4. megjegyzés):

$$\sigma = \text{konst.} \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{2kT}}. \quad (\text{I.39})$$

Az I/3.3.2. rész végén már említettük, hogy **vezetés a vegyértéksávban is bekövetkezhet, ha az nincs teljesen betöltve** (lásd I.31. ábra). Ezek az anyagok a **jó vezetők**. Ilyenkor ugyanúgy, mint a vezetési sávba került elektron esetében, a külső elektromos térből tetszőlegesen kis energiát felvéve a kristályban elektronok árama indulhat meg. Ehhez azonban most nem kell a tiltott sávon átkelnie az elektronnak. A **részleges betöltés** többféleképpen is megvalósulhat: például **úgy, hogy a kölcsönhatásba lépő atomok legkülső elektronjai eredetileg sem telítettek elektronpályáikat** (például a Li-nál), vagy **úgy, hogy az energiaszintek kiszélesedése során egy telített és egy üres sáv átfedésbe kerül** (lásd I.30. ábra) (például a Be esetében). Természetesen egy telítetlen és egy üres sáv is átfedheti egymást (például a Na-nál).

A vezetők fajlagos vezetőképessége a hőmérséklet függvényében a félvezetőkhez képest épp ellenkezőleg változik. A hőmérséklet növelése mind a rácspontok rezgőmozgását, mind a kristályhibák számát megnöveli (lásd I/3.3.5.). Ezek a jelenségek a vezetési elektronoknak az elektromos tér irányában történő elmozdulását akadályozzák, így a hőmérséklet növekedésével a vezetőképesség csökken.

A különböző elektromos vezetési tulajdonsággal rendelkező anyagok áttekintése után szintén az alkalmazott „sávmodell” alapján egyszerű képet alkotni ezen anyagok **optikai tulajdonságairól** is. Egy adott fotonenergiájú elektromágneses sugárzás áteresztése vagy elnyelődése attól függ, hogy létezik-e az anyagban az adott energiának megfelelő elektronátmenet. Mivel az elektromágneses sugárzás látható tartománya körülbelül 1,5 és 3 eV közé esik (lásd II/2.1.8. rész II.28 ábra), ezért a 3 eV-nál szélesebb tiltott sávval rendelkező szigetelőanyagok **átlátszóak** (I.31. ábra). A részlegesen betöltött vegyérték- sávval rendelkező vezetők 0 eV-tól a sáv széléig folytonosan gerjeszthetők, ezért **átlátszatlanok**.

A „széles”, illetve „keskeny” tiltott sáv (D ε) jelentése a gyakorlatban

A fémek termikus emissziójánál követett gondolatmenetet (I/3.1.2.b) felhasználva a Boltzmann-eloszlás segítségével kiszámítható, hogy adott hőmérsékleten átlagosan az elektronok hányadrésze képes arra, hogy a tiltott sávon túl jusson:

$$\frac{n}{n_0} = e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}.$$

1.4. táblázat - I.31. ábra. A szigetelők, félvezetők, vezetők sáv szerkezete. A betöltött sávokat, sáv részeket sötétebb, míg a betöltetlen világosabb téglalapok jelzik. Az üresen hagyott részek a tiltott sávok (Szobahőmérsékleten a 3 eV körülbelül 120 kT-nek, az 1 eV pedig 40 kT-nek felel meg.).

T (°C)	D ε (eV)
0	1,3
20	1,4
50	1,5
100	1,8
200	2,2
500	3,6

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

1000	6,0
------	-----

Az összefüggés szerint, ha $D\varepsilon/kT \approx 55$ akkor Avogadro-számnyi elektrontól átlagosan már egy sem jut túl a tiltott sávon. Ennek alapján készült a táblázat, ami azt adja meg, hogy adott hőmérsékleten mekkora a (feltételnek megfelelő) tiltott sáv szélessége.

A szobahőmérsékletre jellemző kT ($T = 293 = 20^\circ\text{C}$) $\approx 0,025$ eV. Ezen a hőmérsékleten 1eV tiltott sáv szélesség esetén, (azaz $D\varepsilon/kT \approx 40$, és ismét Avogadro-számnyi elektront véve alapul) a fenti összefüggésből az számítható ki, hogy akár több millió elektron is túljuthat a tiltott sávon. Ez a szám a hőmérséklet emelkedésével rohamosan növekszik.

I.4. megjegyzés. Félvezetők fajlagos vezetőképessége (σ) a hőmérséklet függvényében

Mint láthattuk, a töltéshordozók száma nő a hőmérséklet emelkedésével, de a valóság ennél bonyolultabb, mert a „konstans” is függ egy kicsit a hőmérséklettől. Így teljes általánosságban a tiszta félvezetők fajlagos vezetőképességének hőmérsékletfüggését nem tudjuk egyszerűen megadni. Azt azonban mondhatjuk, hogy a meghatározó tényező az exponenciális tag, mivel a többi tényező sokkal lassabban változik a hőmérséklet függvényében.

Töltéshordozók a félvezetőkben

A lyukak a többi vegyértékelektron számára megnyílt energetikai lehetőségeket jelentenek, amelyeket egy külső elektromos térből felvett energia révén betölthetnek. A betöltés a lyuk számára az elektronok mozgásával ellentétes irányú elmozdulást jelent, tehát a lyukak a vegyértéksáv energiaállapotain belül mozgékony, pozitív töltéshordozókként viselkednek. Szokásos elnevezésük még a **p típusú** (pozitív) **töltéshordozó**, amely a vezetési **elektron**, **mint n típusú** (negatív) töltéshordozó ellenpárja.

Így amikor egy elektron a vezetési sávba jut, akkor valójában elektron-lyuk párkeltés történik. Annak a valószínűsége, hogy időegység alatt egy ilyen pár létrejöjjön, $e^{-D\varepsilon/kT}$ -vel arányos (lásd az I/3.1.1. rész végét). Bár a sáv szerkezet alapján az elektronok és lyukak energetikailag különválnak, ez nem jelenti azt, hogy helyileg is messze kerülnek egymástól. Így véletlenszerűen újra egymásra találhatnak, a felszabaduló energia pedig átadódik a rácsnak. Ez a rekombináció. Annak a valószínűsége, hogy időegység alatt egy elektron és egy lyuk találkozzon egymással és rekombináldjon, arányos az $npnn$ szorzattal (mivel bármelyik elektron bármelyik lyukkal rekombináldhat). Egyensúly esetén a párkeltés és a rekombináció valószínűsége pedig megegyezik, így:

$$n_p n_n = \text{konst.} \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}.$$

Mivel tiszta félvezetők esetében a pozitív és a negatív töltéshordozók koncentrációja ugyanakkora ($n_p = n_n$), ezért nm^2 -re ugyanilyen összefüggés írható fel. A négyzetgyökvonás elvégzése után:

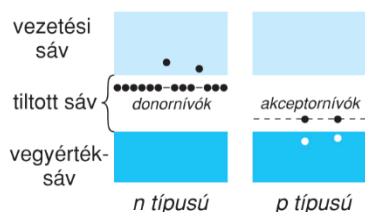
$$n_n = \text{konst.} \cdot e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{2kT}}.$$

3.3.4. I/3.3.4. „Félvezető tulajdonság” létrehozása szennyezéssel

A **gyakorlati felhasználás szempontjából** nem a szerkezeti félvezetőknek, hanem **az ún. szennyezéses félvezetőknek van igen nagy jelentőségük**. Az elektronika fejlődésében alapvető fontosságú lépés volt annak felismerése, hogy **kis mennyiségű idegen anyag** (szennyező) bejuttatása egy teljesen betöltött vegyértéksávval rendelkező kristályrácsba olyan **új elektronállapotok kialakulásához vezethet**, amelyek az így létrehozott „új anyagnak” **igen keskeny tiltott sávú félvezető** jelleget kölcsönöznek. Az ötlet és az abból származó elektronikai egység, a tranzistor működési elvének kidolgozása William Bradford Shockley (1910–1989), John Bardeen (1908–1991) és Walter Houser Brattain (1902–1987) amerikai fizikusok nevéhez fűződik (1956, Nobel-díj).

Megfelelő szennyezéssel elérhető, hogy például egy Si-egy kristály már szobahőmérsékleten is igen nagy számú, akár *p*, akár *n* típusú töltéshordozóval rendelkezzen. A négy vegyértékű Si kristályszerkezete az I.28b ábrán látható, ahol minden atom kovalens kötést létesít négy közvetlen szomszédjával. Az egymástól izoláltan elhelyezkedő szennyezők a Si atomok helyére és nem a rácsközti térbe épülnek be. Ha a szennyező atom öt

vegyértékű (elektron donor, például P), akkor a négy kovalens kötés létesítése után a maradék ötödik elektron a tiltott sávba eső lazán kötött elektronállapotba az ún. **donornívóra** kerül. A laza kötés azt jelenti, hogy ez az energiaállapot a vezetési sávhoz közel esik, tehát az elektron kis energiafelvétellel a vezetési sávba kerülhet, és részt vehet a vezetésben (n típusú félvezető) (lásd I.32. ábra). Mivel a szennyező atomok igen ritkán helyezkednek el, nincs közöttük kölcsönhatás ezért a Pauli-elv nem zárja ki az azonos elektronállapotok lehetőségét.



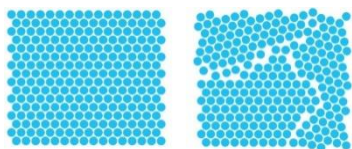
I.32. ábra. Szennyezéses félvezetők sáv szerkezete. A fekete pötty elektron, a fehér pötty pedig elektronhiányt, azaz lyukat szemléltet. A vékony szaggatott vonal a donor-, illetve akceptor-nívók sokaságát jelöli. (0 K-en a donornívók teljesen betöltöttek, az akceptornívók pedig üresek.)

Ha a szennyező atom három vegyértékű (elektron akceptor, például Al), akkor az egyik szomszédos Si atom párosítatlan vegyértékelektronja olyan elektronfogadó állapotot ún. **akceptornívót** hozhat létre, amit a Si gazdarács vegyértékelektronjai kis energia-felvétellel betölthetnek. Ha ez megtörténik, a vegyértékelektron helye mint elektronhiány vagy lyuk hozzájárulhat az elektromos vezetéshez (p típusú félvezető) (lásd I.32. ábra). A többségi, n vagy p típusú töltéshordozók mellett a gazdarács eredeti tiltott sáv szélességétől, illetve a hőmérséklettől függően bizonyos számú, ellentétes töltésű kisebbségi töltéshordozó is jelen lesz az anyagban. Összehasonlítás-képpen, míg a tiszta Si-kristályban a tiltott sáv szélessége 1,1 eV, addig P-, illetve Al-szennyezés esetén csupán $\sim 0,05$ - $0,06$ eV a vezetéshez szükséges többségi töltéshordozó „gerjesztési energiája”.

A p és n típusú szennyezéses félvezetőkből igen kis méretű elektronikai elemeket, fény- és hőérzékeny ellenállásokat, egyenirányítókat (diódákat), erősítőket (tranzisztorokat) lehet készíteni. Továbbá ezek „összekapcsolásával” bonyolult elektronikai feladatokat ellátó funkcionális egységeket, integrált áramköröket (IC-eket) lehet kialakítani mikroszkopikus méretben (lásd a VII/1.3. részt). A technikai fejlődésnek ezt az új ágát, a mikroelektronikát részben az alapelvek felismerése, de legalább ilyen mértékben a megfelelő szennyezési technikák kidolgozása tette lehetővé. (Egy n vagy p típusú Si alapú félvezető gyártásához olyan szintű gyártási technológia szükséges, amely biztosítja, hogy átlagosan minden 10^{10} rácspontban kizárólag Si-atomok üljenek, és csak ezután következzen 1 db szennyező atom.)

3.3.5. I/3.3.5. A kristályszerkezet hibái

Az I/3.3.1. részben már említettük, hogy sok esetben a kristályos rend csak mikroszkopikus távolságokra terjed ki. Ebből az következik, hogy a szemcsék illeszkedésénél, a szemcsehatárok mentén biztosan lesznek szabálytalanabb „hibás” helyek (lásd I.33. ábra). Az is könnyen elképzelhető, hogy a kristály növekedésekor véletlenszerűen idegen részecskék kerülnek a rácsba. A Boltzmann-eloszlás ismeretében azt is tudjuk, hogy tökéletes kristályos rend elvileg csak 0 K hőmérsékleten lehetséges. Mindezek alapján megállapíthatjuk, hogy a **rácshibák a kristályok természetes velejárói**.

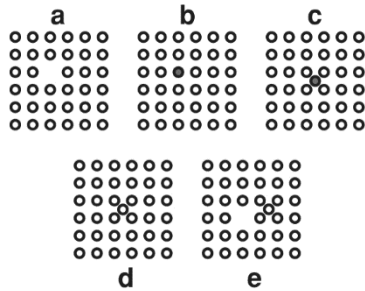


I.33. ábra. Tökéletes kristály és kristályhibák a szemcsehatárok mentén.

A rácshibák közül egyszerűen tárgyalhatók az ún. **ponthibák**, amelyek összefoglaló szemléltetése az I.34. ábrán látható. Diffúzió vagy külső hatás (deformálás, hőkezelés) eredményeként a ponthibákból vonalak, élek, felületek (például szemcsehatárok) mentén újabb hibahelyek alakulhatnak ki. A ponthibák közül is a „legegyszerűbb” az, ha egy rácspontból egy részecske hiányzik. Ez a **rácslyuk** vagy **vakancia**, amelyet Schottky-hibának is szoktak nevezni (Walter Schottky (1886–1976) német fizikus neve után). Ha egy részecske a betöltött rácspontok mellett többletként egy lokális energiaminimumnak megfelelő rács közti (intersticiális)

helyre kerül, akkor azt **intersticiumnak** nevezzük. Ez a részecske lehet a gazdarács részecskéivel azonos, de különböző is.

Intersticium úgy is keletkezhet, hogy nincs „felesleges” részecske a rácsban, tehát a rácspontok és a részecskék száma megegyezik. Ilyenkor a rács közti térbe kerülő részecske helyén vakancia keletkezik. Ezt az összekapcsolt vakancia-intersticium képződményt Frenkel-hibának nevezik (Jakov Iljics Frenkel (1894-1952) orosz fizikus neve után). (Megemlítjük, hogy az a rácshiba, amikor egy idegen részecske nem a rács közti térbe, hanem egy rácspontba épül be az az előző részben már tárgyalt szennyezésnek felel meg.)



I.34. ábra. A ponthibák: a) üresen maradt rácspont, *vakancia* vagy *Schottky-hiba*, b) idegen részecske a rácspontban, *szennyezés*, c) idegen részecske a rácsközti térben, d) azonos részecske a rácsközti térben *intersticiumok*, e) a) és d) együtt, *Frenkel-hiba*.

Egy kristályban adott hőmérsékleten a Boltzmann-eloszlás segítségével megbecsülhető a Schottky-, illetve Frenkel-hibák száma:

$$n_s \cong N e^{-\varepsilon_s/kT}, \quad n_f \cong (NN')^{1/2} e^{-\varepsilon_f/2kT}$$

(I.40)

ahol N a rácspontokban elhelyezkedő részecskék száma, N' a rács közti helyek száma, ε_s egyetlen Schottky-hiba létrehozásához szükséges energia, (tehát az az energia, ami ahhoz szükséges, hogy a kristály belsejében lévő rácspontból a kristály felszínére juttassunk egy részecskét), ε_f egyetlen Frenkel-hiba létrehozásához szükséges energia, (tehát az az energia, ami ahhoz szükséges, hogy egy részecske a rácspontból a rács közti helyre kerüljön). (A Frenkel-hiba keletkezési mechanizmusa az elektron-lyuk pár keletkezéséhez hasonlít, amit a fenti összefüggés is tükröz (vö. I.39).) A ponthibák nem helyhez kötöttek, a kristályban diffundálva vándorolhatnak.

3.4. I/3.4. Folyadékok, folyadékkristályok

3.4.1. I/3.4.1. A folyadék állapot

Ha egy kristályos, szilárd testet melegítünk, akkor abban a rácshibák száma fokozatosan nőni fog. Emiatt a szabályos, ismétlődő rendben elhelyezkedő részecskék tartományai egyre kisebbek lesznek. Ha a kristály megolvad és az anyag folyadék fázisba kerül, a részecskék korábbi helyhezkötöttsége megszűnik, bár a közöttük fellépő kölcsönhatás továbbra is számottevő marad. Így **az olvadáspont fölött, de nem túl magas hőmérsékleten a kristályos állapotra jellemző rend bár kisebb tartományokban, de továbbra is felismerhető**. Míg a kristályos állapotot az ismétlődési távolság sokszorosára kiterjedő, hosszú távú rendezettség jellemzi, **a folyadékokban rövid távú** (néhánytól néhány száz kötэшosszra kiterjedő) **renduralkodik**. Ha a hőmérséklet tovább emelkedik, a gáz állapothoz közeledve a rendezett tartományok mérete egyre csökken.

A folyadékokban a rendezett tartományok nem hosszú életűek, a hőmozgás miatt minduntalan felbomlanak, majd kicsit másként újjáalakulnak. A folyadék annál folyékonyabb, annál kisebb viszkozitású, minél kevésbé stabilak benne a kis kiterjedésű rendezett tartományok. (Azokat a nagy viszkozitású folyadékokat, amelyek mechanikai értelemben már szilárdnak tekinthetők, üvegeknek nevezzük (lásd I/3.3.)) A szigorú rend megszűnésével a kristályokra még jellemző anizotropia is eltűnik. Így **a folyadékok izotropok, azaz nincs bennük kitüntetett irány**, ami például a rajtuk végzett mérések eredményeinek iránytól való függetlenségében nyilvánul meg.

A folyadékok könnyen deformálhatók, felveszik a tárolóedény alakját. Ezek a tulajdonságok jelzik, hogy a kristályos szilárd testekhez képest jelentősen kisebb a részecskéket összetartó átlagos kötési energia.

3.4.2. I/3.4.2. Folyadékkristályok: anizotrop folyadékok

Első hallásra a **folyadékkristály** elnevezés olyan, mint a fából vaskarika, ám ilyen anyagok mégis léteznek. A terminológia ellentmondásossága idegen szó használatával elkerülhető, ezért használatos a **mezomorf** állapot elnevezés is. Az ilyen anyagok alapegységei olyan molekulák, amelyek között átlagosan gyengébb kölcsönhatások lépnek fel, mint a szilárd testek alkotóelemei között, így a molekulakristályok speciális esetének is tekinthetők. A folyadékkristályokat **felépítő molekulák** nem gömbszimmetrikusak, inkább **fonal, pálcika vagy korong alakúak**. Az ilyen molekulák speciálisan rendezett struktúrákat képesek kialakítani, amelyekben a rendezettségnek kétféle típusát lehet megkülönböztetni.

Transzlációs rend: a molekulák tömegközéppontjai síkokat alkotnak, és ebben a molekulák szabályosan ismétlődő távolságban, periodikusan helyezkednek el.

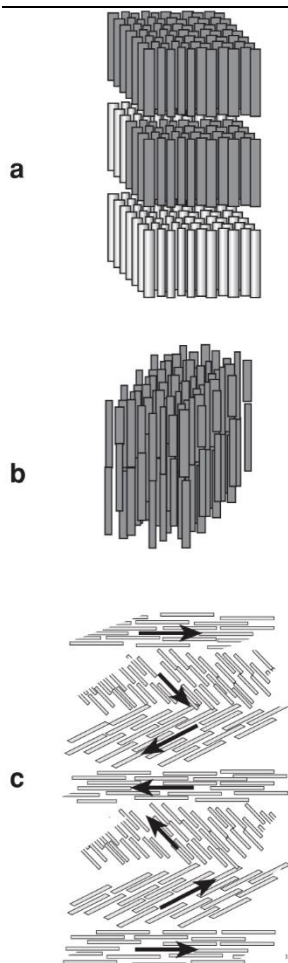
Orientációs rend: a molekulatengelyek azonos irányban állnak.

Ezek figyelembevételével háromféle struktúrát különböztetünk meg. A legrendezettebb a **szmektikus** állapot. (Az elnevezés a görög *szmegma* = szappan szóból származik.) Ebben mind a kétféle rend megfigyelhető. A molekulák tömegközéppontjai meghatározott síkokban helyezkednek el, a molekulatengelyek pedig azonos irányba mutatnak, amely lehet merőleges a tömegközéppontok által meghatározott síkra, de lehet azzal szöveget bezáró is (I.35a ábra).

A **nematikus** állapot kevésbé rendezett. (A név a görög *nema* = fonal szóból ered.) Itt csak orientációs rend figyelhető meg, vagyis a molekulatengelyek egy irányba mutatnak, de a tömegközéppontok nem hoznak létre síkokat (I.35b ábra).

A **koleszterikus** állapot a nematikusnál azonos rendezettségi szintet jelent. (A név onnan ered, hogy ezt az állapotot először a koleszterin esetében figyelték meg.) Egy-egy síkban a nematikus állapotnak megfelelő rendezettséget találunk, de az egymás fölötti síkokban a molekulatengelyek egy meghatározott szöggel elfordulnak egymáshoz képest. Ha sok egymás fölötti síkot figyelünk meg, azt láthatjuk, hogy a molekulatengelyek csavarvonal mentén helyezkednek el, emiatt ezt az állapotot **csavart nematikus** állapotnak is nevezik (I.35c ábra).

A folyadékkristályokat osztályozhatjuk aszerint is, hogy milyen paraméter befolyásolja leginkább a rendezettségüket. Ennek alapján beszélhetünk termotrop és liotrop folyadékkristályokról.

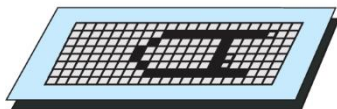
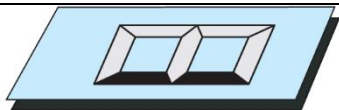


I.35. ábra. Folyadékkristályos struktúrák: a) szmektikus, b) nematikus, c) koleszterikus.

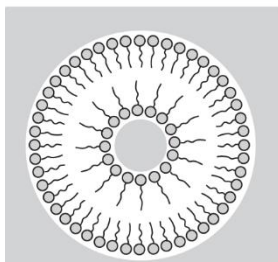
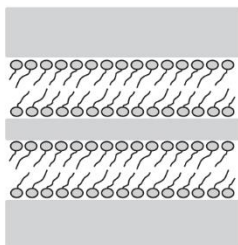
A **termotrop** folyadékkristályok rendezettsége elsősorban a hőmérséklettől függ. Bizonyos koleszterikus folyadékkristályok esetében például azt figyelhetjük meg, hogy az ilyen anyagból készült réteg színe erősen függ a hőmérséklettől (lásd „*Kontakttermográfia*”). Hőmérsékletváltozás hatására ugyanis lokálisan megváltozik a koleszterikus folyadékkristály „csavarvonalának menetmagassága”, vagyis azoknak a rétegeknek a távolsága, amelyek egy bizonyos orientációs iránynak felelnek meg. A periodikusan ismétlődő rétegeken a fehér fény diffrakciót szenved (lásd II/2.1.5. rész). Az interferenciából származó kioltás feltétele a rétegek közötti távolság függvényében mindig csak egy bizonyos hullámhosszra teljesül. Ez a komponens a visszavert fényből hiányozni fog. Így a visszavert fény színe a kioltott hullámhossz komponens kiegészítő színe lesz. Az ilyen és ehhez hasonló jelenségek az ún. **termooptikai jelenségek**.

Egy másik gyakorlati szempontból hasznos jelenség nematikus folyadékkristály rétegekben akkor figyelhető meg, ha a molekulák elektromos dipólusmomentummal rendelkeznek. Az ilyen folyadékkristályban a molekulák orientációja elektromos erőterrel változtatható, ami ez előbbi elnevezés mintájára az ún. **elektrooptikai jelenségek** körébe tartozik. A molekulák irányának megváltozása például a fényáteresztő képesség megváltozásához vezethet. Ily módon a megfelelően elhelyezett és kellően formált elektródok alkalmazásával az ilyen anyagokból kijelzők készíthetők, amelyek segítségével például világos háttér előtt sötét számokat, vagy bonyolultabb jeleket is meg lehet jeleníteni (lásd I.36. ábra és VIII/1.5.2. rész).

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



A **liotrop** folyadékkristályok rendezettségét döntően a komponensek koncentrációjának aránya befolyásolja (lio- mint folyadék, illetve oldószer által). Liotrop folyadékkristályos szerkezetet **amfifil** („kétfélet kedvelő”) molekulák hoznak létre víz vagy más oldószer jelenlétében. Amfifilnek azt a molekulát nevezzük, amelyiknek egymástól jól elkülönülő poláris és apoláris része van. Ilyenek a sejtmembránt alkotó foszfolipidek is. Az I.37. ábrán példaként a foszfolipidból és vízből álló liotrop folyadékkristályos rendszer két lehetséges, gyakorlati szempontból nagy jelentőségű szerkezeti formáját mutatjuk be: a sejtmembránra is jellemző **lamelláris szerkezetet** (lásd I/5.1.1.), és a lipid kettős rétegből álló gömböt az ún. **liposzómát** (lásd I/5.1.2.).



A kialakuló szerkezet a komponensek koncentrációarányán kívül még számos tényezőtől függ. Ilyen a komponensek minősége, a hőmérséklet, a nyomás, a pH és a környezetben levő egyéb ionok minősége és mennyisége.

Kontakttermográfia

Testfelszínnel kontaktusba hozott koleszterikus filmek színének megváltozása alkalmas a hőmérséklet mérésére. A módszer alkalmazható a diagnosztikában a környezetüknél magasabb hőmérsékletű (például gyulladós, daganatos) góccok vagy a környezetüknél alacsonyabb hőmérsékletű területek (például vérellátási vagy beidegzési zavar) kimutatására.



4. I/4. Az élő anyag szerkezeti egységei

4.1. I/4.1. A víz

A Föld felszínének kétharmadát a „legközségesebb anyag”, víz borítja. Az élő szervezetekben is a víz fordul elő a legnagyobb mennyiségben (lásd I.3. táblázat). Az anyagcseréhez szükséges diffúzió, az ozmózis, az anyagszállítás legkülönbözőbb folyamatai, túlnyomó többségükben vizes közegben játszódnak le, de a vízmolekulák rendezett formában, makromolekuláris komplexekhez kötötten is rendkívül fontos szerkezetstabilizáló szerepet töltenek be. **Az élet és a víz elválaszthatatlan kapcsolata a víz különleges tulajdonságaiból adódik.** Ezek közül is talán a legfontosabb, hogy a víz széles hőmérsékleti tartományban folyékony. A folyadékok többségéhez képest anomálishan nagy a víz fajhője, felületi feszültsége, olvadáshője és párolgáshője (lásd I.4. táblázat).

1.5. táblázat - I.3. táblázat. Élőlények, emberi szövetek és szervek hozzávetőleges víztartalma súlyszázalékban

Élőlények	%	Emberi szövetek, szervek	%
Medúza	98	Tüdő	83
Éticsiga	84	Vér	82
Pisztráng	84	Izom	79
Cápa	81	Lép	79
Béka	80	Vese	79
Emberi magzat	95	Agy	73
Felnőtt ember	55	Máj	71
		Bőr	65
		Zsír	50
		Csont	32

1.6. táblázat - I.4. táblázat. Néhány folyadék néhány fizikai jellemzőjének összehasonlítása 0°C-on

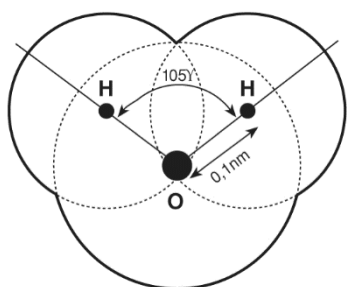
Folyadék	Fajhő (kJ/kg)	Felületi feszültség (mN/m)	Olvadáshő (kJ/kg)	Párolgáshő(kJ/kg)
Víz	4,18	72,90	333,70	2256,37
Metanol	2,41	22,70	83,74	1109,56
Etanol	2,39	22,40	106,77	906,07

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

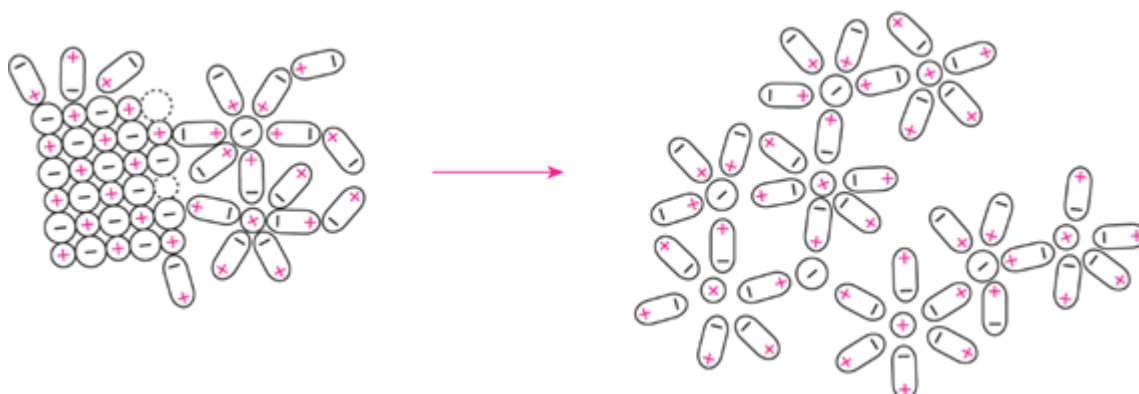
Aceton	2,16	23,70	82,07	524,63
Benzol	1,74	28,50	127,28	395,67
Kloroform	0,94	27,10	74,95	247,03

4.1.1. I/4.1.1. A vízmolekula szerkezete

A vízmolekula H_2O képlete azt jelenti, hogy az O-atom második elektronhéján lévő 6 elektronja ($2s^2 2p^4$) a 2 H-atom 1s elektronjaival stabil 8-as konfigurációt alkot. A molekula egyszerű szerkezeti modelljét az I.38. ábrán láthatjuk. A H-atomok úgy „belemerülnek” az O-atomba, hogy az egész molekula „sugara” alig nagyobb az O-atom sugaránál. A vízmolekulában a H-O-H kötési szög körülbelül 105° -os. Ez a szerkezet (az elektronpályák ennek megfelelő térbeli elhelyezkedése) maga után vonja azt, hogy a pozitív és negatív töltésközéppontok nem esnek egybe. Az eltolódás mértéke jelentős, emiatt **a vízmolekula nagy permanens dipólusmomentummal rendelkezik.**



A víz dipóluskaraktere alapján egyszerű modellt alkothatunk az elektrolitok oldódásakor történő elektrolitos disszociáció jelenségéről is (I.39. ábra). Az elektrolit oldódása úgy értelmezhető, hogy a dipólus-vízmolekulák kölcsönhatásba kerülnek az elektrolit kationjaival és anionjaival (hidratáció). E kölcsönhatás energiája fedezi az oldódás és az elektrolitos disszociáció energiaszükségletét. Ha az oldódáskor bekövetkező térfogatváltozást is értelmezni akarjuk, akkor ehhez tekintetbe kell vennünk még azt is, hogy az ionok és a vízmolekulák kölcsönhatásának eredményeként többé-kevésbé rendezett szerkezetű lesz az oldat. Esetenként meglepő módon az oldat térfogata a víz és az oldott anyag együttes térfogatánál kisebb is lehet. Sőt előfordulhat az is, hogy az elektrolitoldat térfogata kisebb lesz, mint az oldószerként szereplő víz eredeti térfogata, pedig kétséget kizárólag térfogattal rendelkező többletkomponenst tettünk hozzá. Ilyenkor a kölcsönhatások eredményeképpen annyira rendezett állapot jöhet létre, hogy a térfogatcsökkenés meghaladja az oldott anyag hozzáátételéből származó térfogat-növekedést.



4.1.2. I/4.1.2. A vízmolekulák H-hidas kötésrendszere

Az I.5. táblázat a periódusos rendszer egy kiemelt részét, az oxigén környezetét tartalmazza. Az ehhez csatlakozó I.40. ábra pedig ezeknek az elemeknek a H-nel alkotott vegyületeit, illetve azok folyékony állapotához tartozó (az olvadás- és forráspont közötti) hőmérséklet-tartományokat mutatja be. A víz különlegessége itt is jól látható. A szilárd víz (jég) a többihez képest feltűnően a legmagasabb hőmérsékleten

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

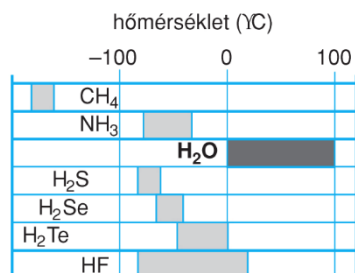
kezd olvadni és hasonlóan a folyékony víz is a legmagasabb hőmérsékleten kezd forrni. Az I.4. táblázat adatait is figyelembe véve láthatjuk, hogy nagyon sok energia kell a jég megolvadásához és még sokkal több a víz elpárolgásához. **A víznek ezekre az anomális tulajdonságaira önmagában az egyedi molekula szerkezeti paraméterei nem adnak magyarázatot. Ennek értelmezéséhez meg kell vizsgálni a molekulák egymással alkotott kötéseit is.**

1.7. táblázat - I.5. táblázat. A periódusos rendszer részlete az O környezetében

	IV.A.	V.A.	VI.A.	VII.A.
2	6 C	7 N	8 O	9 F
3			16 S	
4			34 Se	
5			52 Te	

Korábbi kémiai ismereteinkből tudjuk, hogy a metánmolekula (CH₄) tetraéderez szerkezetű. Ez azzal magyarázható, hogy benne a C–H kötések olyan geometriai elrendezésre törekednek, hogy a kötő elektronpárok a lehető legmesszebbre kerüljenek egymástól.

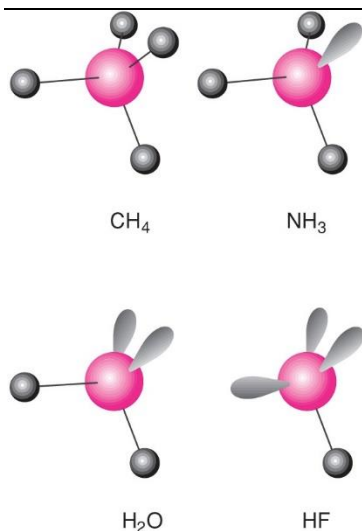
Az I.40. ábrán feltüntetett többi vegyület (NH₃, H₂O, HF) molekuláinak közös jellemzője, hogy a metánhoz hasonlóan mindegyik 10 elektront tartalmaz (az első lezárt atomi héjon kívül 8-at). Így mindegyik molekula stabil elektronszerkezetet képes kialakítani, és az elektronpárok közötti taszítási elv is érvényesül. Mindezeknek az a következménye, hogy a molekulák alakja is nagyon hasonló a metánéhoz. A tökéletes tetraéderez szerkezettől való eltérés csak abból adódik, hogy a nem kötő elektronpároknak nagyobb a térigényük, ami kismértékben befolyásolja a kialakuló kötési szögeket. A molekulák még méretre is majdnem azonosak, a központi atomok kovalens sugarai a 0,071–0,077 nm-es tartományba esnek (lásd I.2. táblázat).



I.40. ábra. Az I.5. táblázatban feltüntetett elemek H-nel alkotott vegyületeinek folyékony állapotához tartozó hőmérséklet-tartományok.

Az I.41. ábrán szemléltetett molekulák további közös sajátossága, hogy az apoláris metánon kívül H-kötés kialakítására is képesek. Itt azonban egy igen fontos különbség figyelhető meg közöttük abban, hogy egy molekula inkább donorként vagy inkább akzeptorként vesz részt a H-kötésben. Az ammóniára a 3:1, a vízre 2:2, a HF-ra az 1:3 donor/akceptor arány jellemző. Ez pedig azt jelenti, hogy *N* darab azonos molekula között az ammónia és a HF esetében maximálisan *N* darab H-kötés tudna létrejönni, míg víz esetében *2N*. Ennek következményeképpen az ammóniában és a HF-ban csak rövidebb, hosszabb láncok, míg a **vízben térbeli hálós szerkezet (rács) is kialakulhata H-kötések révén.**

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

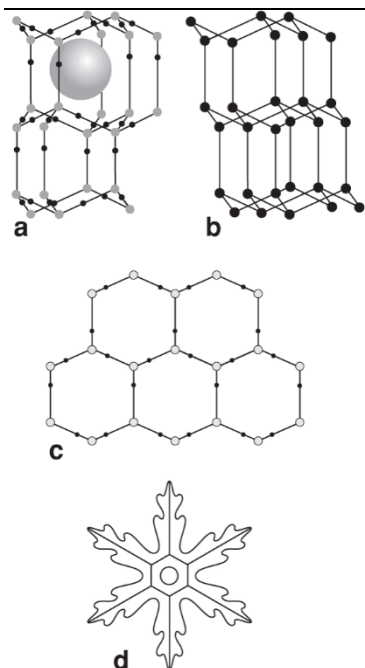


I.41. ábra. A vízhez „hasonló” 10 elektront tartalmazó vegyületek.

Mint később látni fogjuk ez az a szerkezet, ami magyarázatot ad csaknem valamennyi anomáliára. A víznek három **fizikai** állapotát ismerjük, amelyek közül biológiai szempontból a folyékony halmazállapotnak van a legnagyobb jelentősége. Ennek ellenére a szerkezet jobb megismerése érdekében induljunk ki a szilárd állapotból.

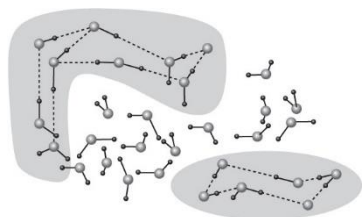
Az I.42a ábrán a vízmolekulák elhelyezkedése látható **szilárd halmazállapotban**. A szomszédos molekulákat hidrogénkötések kötik össze: **hosszú távú** (sok kötéshosszon keresztül érvényesülő) **rendezettség** jellemzi. A négy irányba mutató hidrogénhidak tetraédres térszerkezete miatt a nagy szilárdságú jégkristály a gyémánthoz hasonló elrendeződést mutat (I.42b ábra). Ez a térháló a szoros illeszkedésnél sokkal lazább szerkezet, ezért a rácspontok között sok üres teret találunk. Ez magyarázatot ad arra, hogy a jég kisebb sűrűségű, mint a víz (a körülbelül 1000 kg/m³ helyett csak 920 kg/m³). A jégkristály bizonyos szemszögből hatszöges szerkezetű (I.42c ábra), noha a hatszög csúcsai nincsenek egy síkban. Ez magyarázza a felhőben kristályosodó hópilehek szabályos hatszögű szimmetriáját, amit nagyító alatt, de néha szabad szemmel is megcsodálhatunk (I.42d ábra).

A **folyékony** víz szerkezetének leírására többféle modell használatos. Ezek többsége a jég hatszöges szerkezetéből kiindulva (I.42c ábra) elemzi a szilárd és folyékony fázis közötti különbségeket. A különbségek közül ki kell emelnünk azt, hogy a kristályos állapot hosszú távú **rendezettsége** itt **rövid távúvá** válik, azaz a rendezettséget jelentő mikrokristályok kiterjedése nem haladja meg az 1 nm-t. A szerkezetet úgy is jellemezhetjük, hogy a jég eredetileg szabályos láncolatát itt sok kristályhibát tartalmazó tartományok szakítják meg. A szilárd fázishoz képest a folyadékban intersticiális molekulákat is találunk, azaz néhány vízmolekula a hatszöget kialakító molekulák által bezárt térben foglal helyet. Mivel ez a szoros pakolás nem alakul ki azonnal az olvadáskor, így a fokozatosan belépő intersticiális helyzetű vízmolekulákkal jól értelmezhető az a jelenség, hogy a 4 °C-os víznek a legnagyobb a sűrűsége.



I.42. ábra. a) A szilárd halmazállapotú víz kristályszerkezete a gyémántéra (b) hasonlít. A tetraédes, illetve hatszöges struktúra jól kivehető. A szürke gömb az üres teret reprezentálja. c) Speciális nézőpontból (itt például felülnézetből) a hatszöges szerkezet még szembeütőbb. d) A hópehely hatszöges szimmetriája.

A folyékony állapotú víz molekuláit szintén H-kötések kapcsolják össze (I.43. ábra). Az összekapcsolódó molekulák többsége a jég szerkezetéhez hasonlóan tetraédesen szerveződik, de igen gyakori az az eset, hogy egy-egy molekulának több szomszédja is hiányzik. A nagyobb méretű molekulacsoportok közötti tartományokat magányos, illetve kettesével, hármassával összeálló, esetleg hatos gyűrűbe kapcsolódó molekulák töltik ki véletlenszerűen. A víz szerkezetét azonban nem szabad statikusnak képzelnünk. Már 0 °C fölött egy-egy kötés másodpercenként átlagosan 10^{10} -szer felbomlik, majd újjáalakul, így a molekulacsoportok is állandó változásban vannak. A különböző hőmérsékleteken a kötések átlagos számát a Boltzmann-eloszlás adja meg. Egy molekulára még 100 °C-on is átlagosan 1,2 H-kötés jut (a maximálisan lehetséges 2 helyett), tehát a molekulák többsége még ezen a hőmérsékleten is csoportokba szerveződve található.



4.1.3. I/4.1.3. A víz szerepe az élő struktúrákban

A (folyékony halmazállapotú) víz mint közeg különleges fizikai tulajdonságai (például nagy hőkapacitása) igen jelentős szerepet játszanak az élővilág jelenségeiben. A sejtek, szövetek víztartalma azonban a biokémiai folyamatokban molekuláris szinten is meghatározó.

A makromolekuláris rendszerek, például fehérjemolekulák vizes közegben olyan szerkezetet alakítanak ki, amelyben a hidrofób csoportok a molekula belseje felé fordulnak, míg a felszínén található **hidrofil csoportok hatására hidrátburok** alakul ki a fehérjemolekula körül, ez az ún. **kötött víz**. A legújabb vizsgálatok szerint a hidrátburok átlagos vastagsága 0,4-0,5 nm-re tehető. A hidrátburok tömege elérheti a fehérjemolekula tömegének 30%-át is. A fehérjék szerkezetében nemcsak a felülethez kötött vízrétegnek, hanem a szerkezet belsejében, az oldalláncokhoz kötött vízmolekuláknak is jelentős szerepe van. Különösen azoknak, amelyek például az enzimek reakciócentrumainak szerkezeti feltételeihez járulnak hozzá, vagy az alegységek kapcsolatát biztosító határfelületek, vagy szubsztrátok molekulán belüli mozgását segítő „csatornák” szerkezetét alakítják ki H-hidas szerkezet révén. A nukleinsavak konformációja szintén erősen függ a kötött vízmolekulák jelenlététől.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

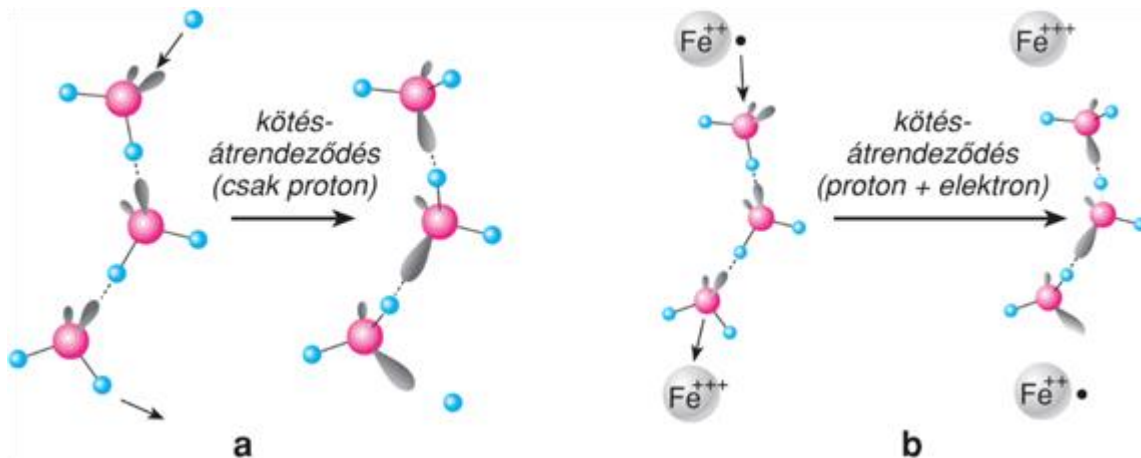
B-szerkezetben (lásd I/4.2.2.) például bázispáronként ~10 vízmolekula található pontosan meghatározott kötési viszonyok között. A sejtmembrán lipidkomponenseihez szintén kapcsolódnak vízmolekulák 3-4 molekulányi rétegben. Ez a kötött vízréteg igen szoros pakolású rendezett szerkezetet alakít ki, amelyeknek sűrűsége nagyobb, mint a folyadék állapoté. Biológiai szempontból a membránszerkezet stabilizálásán kívül igen fontos szerepet tölt be mindenféle membránfelületi kötődésben, ionok diffúziójában és transzportjában.

Transzportmechanizmusok vízben

A folyékony víz hidrogénkötések által összetartott szerkezetéből következnek olyan speciális transzportmechanizmusok, amelyek kiugró értékű fizikai paraméterekhez vezetnek. Ezért vizsgáljuk meg a proton és az elektron „elmozdulásának” mechanizmusát vízmolekulák láncolatán keresztül.

Az ábra a) része mutatja a protonok transzportjának a mechanizmusát. A hidrogénkötéseket pontozott vonalakkal jelöltük. Látható, hogy a modellkísérletben a proton a feltüntetett lánc bal oldali felső vízmolekuláját közelíti meg, és ahhoz hozzákapcsolódik. Ezzel a vízmolekulával kovalens kötést képez, és a szomszédos hidrogén, amely előzőleg kovalens kötéssel kapcsolódott az oxigénhez, tovább lép és kiszorítja a szomszédos oxigén egy hidrogénkötés által megkötött hidrogénjét, és új kovalens kötést képez. E mechanizmusnak megfelelően egyetlen proton belépése egy egész reakciósort indít meg, aminek eredményeképpen a lánc végén, az ábra alján, a jobb oldalon egy hidrogénion léphet ki.

Ezek alapján érthető a hidrogénion rendkívüli gyors mozgása a vízben, ami nem a hidrogénion gyors vándorlását jelenti, hanem az előbbi, gyors kötésátrendeződésekből álló láncreakció lefolyását.



I.43. ábra. A folyékony víz szerkezete, a jelölt területek a H-híd által összekötött vízmolekulákat jelölik.

Hasonló a mechanizmus akkor is, ha nem proton, hanem egy elektron transzportjáról van szó. Az ábra b) része mutatja, hogy a kétértékű, oldott állapotban lévő Fe²⁺ elektronja a víz közbeiktatásával hogyan lép át egy Fe³⁺ ionra, miközben saját maga Fe³⁺ ionná oxidálódik. (Ez a jelenség radioaktív Fe-ionok segítségével kísérleti úton is igazolható). Ilyenkor a lánc mentén az átrendeződéskor nemcsak proton, hanem proton és elektron együtt mozog. (A jelenség nagyon hasonlít a fémekben történő elektromos vezetéshez, ahol az elektromos jel sebessége sokszorosa az elektronok mozgási sebességének.)

Ilyen protonmozgások a fehérjék vagy még általánosabban a makromolekulák hidrátburkában is lejátszódnak. Ezek a gyors töltésmozgások változó elektromos terekben jelentékenyen hozzájárulnak a makromolekulák flexibilis viselkedéséhez.

A kísérleti adatok meghatározásában nagy szerepe volt a Manfred Eigen (1927–) és munkatársai által kidolgozott módszernek, melyet a kémiai egyensúly igen rövid energiaimpulzussokkal való megzavarásával létrehozott rendkívül gyors kémiai reakciók vizsgálatára dolgoztak ki (Nobel-díj, 1967).

Élő anyagok „lefagyasztásának” problémái

Ha a biológiai rendszerekben, sejtekben, szövetekben lévő víz alacsony hőmérsékleten megfagy, sűrűsége csökken, azaz térfogata nő. A lokális kristályképződések térfogat-növekedése az élő anyag szerkezetét

szétroncsolhatja. Minél lassúbb a fagyasztás folyamata, azaz minél több idő van a jégkristályok kialakulására és növekedésére, annál nagyobb a struktúra károsodása.

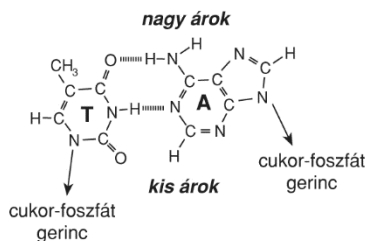
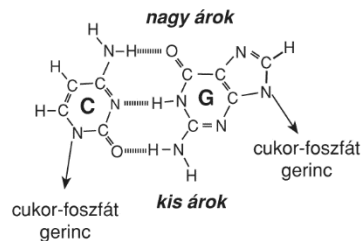
Ha alacsony hőmérsékleten csökkentett nyomáson tartunk vizes oldatokat vagy akár sejteket, akkor a jég anélkül, hogy megolvadna, gőz halmazállapotba megy át, szublimál. Ennél az eljárásnál a biológiai objektumot olyan gyorsan hűtik le, hogy nincs idő a struktúrát roncsoló jégkristályok kialakulására. A biológiai tartósítási technikák egyik leghasználhatóbb formája ez a fagyasztva szárítási technika, mivel az életfolyamatok megszűnnek, de a rendszer struktúráját nem éri túl nagy károsodás, és így hosszú ideig helyreállítható a funkció. Szövettenyésztetben tartott sejtklónok ilyen módon nem fagyaszthatók le. Ha azonban a fagyasztást megfelelő összetételű védőoldatban, kis térfogatban és kellő gyorsasággal végezzük, a sejtek bizonyos százaléka feléled, ami elegendő lehet a sejtvonal további tenyésztéséhez. A magasabb rendű emlősök teste a ma rendelkezésre álló technikai eljárásokkal nem hűthető le annyira, hogy hosszabb ideig a felélesztés reményével tárolni lehessen.

4.2. I/4.2. Nukleinsavak

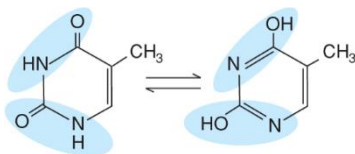
A dezoxiribonukleinsav (DNS) és a ribonukleinsav (RNS) lineáris polimerek minden sejt alapvető komponensei. Funkciójuk a genetikai információ tárolása és átadása. A nukleinsavak szerkezetének és a szerkezet számos változatának megértéséhez tekintsük át előbb a felépítő elemeiket és azok szerkezetét.

4.2.1. I/4.2.1. A nukleinsavak építőkövei és elsődleges szerkezete

A nukleinsavak a legyesei a dezoxiribonukleotidok, illetve ribonukleotidok, vagyis nukleozidok foszforsavval képzett észterei. Minden nukleozid egy nitrogén-tartalmú heterociklusos bázist, valamint egy pentóz (dezoxiribózt vagy ribózt) tartalmaz. A nukleozidokat felépítő bázisok pirimidin- vagy purin-származékok (I.44. ábra). Az előbbi csoportba tartozik a timin, a citozin és az uracil, az utóbbiba az adenin és a guanin. A bázisok enol-oxo tautomériát mutatnak, ennek egy példáját szemléltetjük az I.45. ábrán.



Proton- *a*) és elektron-transzport *b*) különleges mechanizmusa vízben



I.44. ábra. A nukleotidokat felépítő bázisok szerkezete és a közöttük kialakuló H-kötések. A bázisok planáris szerkezetű aromás vegyületek, pirimidin- vagy purin-származékok. Az előbbi csoportba tartozik a timin (T), a citozin (C) és az uracil (U), az utóbbiba az adenin (A) és a guanin (G).

A polinukleotid láncban a ribóz-, illetve dezoxiribóz egységek kapcsolódnak egymáshoz foszfodiészter kötéssel, amely az egyik cukor 3'-OH csoportja és a másik cukor 5'-OH csoportja között alakul ki. (I.46. ábra) A polinukleotidlánc vázát tehát cukor-foszfát egységek ismétlődése alkotja. A szerkezet változó eleme a

szomszédos nukleotidok bázisainak sorrendje. Ez a bázissorrend határozza meg a nukleinsavak elsődleges szerkezetét.

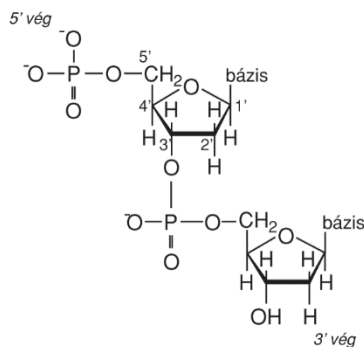
A cukorkomponens a nukleinsavak legflexibilisebb alkotóeleme. Szerkezetét és a nukleinsav másodlagos szerkezetét befolyásoló konformációit az I.47. ábrán mutatjuk be.

A cukorrész és bázis közötti, úgynevezett glikozidos kötés körül a ribofuranóz és a bázis gyűrűjének szabad rotációja szterikus okokból gátolt. A gyűrűk egymáshoz viszonyított elhelyezkedése szerint így két – *syn* vagy *anti* – konformáció valósulhat meg (I.48. ábra).

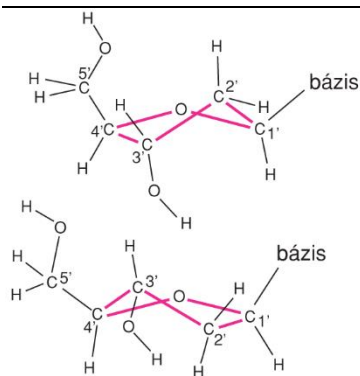
4.2.2. I/4.2.2. A nukleinsavak másodlagos szerkezete

Az 1950-es évek elejének tudományos megfigyelései alapozták meg a DNS kettős helikális szerkezetének felfedezését. A papírkromatográfia megjelenése lehetővé tette a nukleinsavak precíz analizését. Így derülhetett fény arra, hogy egy DNS-molekulában mindig azonos mennyiségű A és T, illetve G és C található. 1953-ban publikált röntgendiffrakciós vizsgálatok eredményei (Franklin, Wilkins) pedig egyértelműen a natív DNS helikális szerkezetére mutattak. A hélix átmérőjéből és a DNS sűrűségéből arra lehetett következtetni, hogy a hélixet két polinukleotidlánc alkotja, ahol a láncok közötti távolságot egy purin- és egy pirimidinbázis töltheti ki. Ezen ismeretek birtokában még ugyanabban az évben született meg Watson és Crick a DNS szerkezetét leíró, klasszikus kettős hélix modellje (Nobel-díj 1962.).

E szerint két önálló DNS-lánc alkot egy jobb menetes hélixet, amelyben a két lánc antiparallel orientációjú, vagyis az egyik 5'–3', a másik 3'–5' irányú (I.46. ábra). A foszfodiészterkötésekkel összekapcsolt dezoxi-ribóz lánc a kettős spirál külső részén fut végig, míg a bázisok befelé, a spirál tengelyére merőlegesen helyezkednek el. A foszfátcsoportok jelenléte miatt a molekula felszíne negatív töltésű. A spirális kialakításában a cukor-foszfát gerinc geometriájának van meghatározó szerepe. A két szálaban az adeninnel szemben mindig timin, míg a guaninnal szemben mindig citozin található. A komplementaritást egyrészt a bázisok térkitöltése, másrészt a H-kötések kialakításának lehetősége szabja meg (I.44. ábra). Vagyis egy purinbázissal szemben mindig pirimidin foglal helyet és viszont. Az adenin- és timin-bázisok között két, a citozin és guanin között három H-híd kialakítására van lehetőség, ha a már fent említett enol-oxo tautomerek közül az oxoforma van jelen. (I.45. ábra). Az így kialakuló H-híd-kötéseknek alapvető szerepe van a kettős spirál szerkezetének rögzítésében. A H-kötések mellett az elektrosztatikus, valamint az egymás fölött elhelyezkedő bázisok delokalizált elektronjai között kialakuló Van der Waals-kölcsönhatások stabilizálják a kettős spirál szerkezetét. A továbbiakban ezen kölcsönhatások összeségét **stackingnek** nevezzük. A H-kötések összes energiája egy DNS-molekula esetében elsősorban az AT/GC aránytól függ, míg a stacking összenergiáját a bázissorrend határozza meg. Az egymás fölötti bázisok között fellépő kölcsönhatások mellett tekintetbe kell vennünk a szemközti bázisok között kialakuló dipól-dipól kölcsönhatást is. A bázisok dipólusmomentuma miatt az adenin és timin között taszító, míg a guanin és citozin között vonzóerő lép fel. Ennek következtében az A-T bázispárokban gazdag DNS-szakaszok kevésbé stabilak, könnyebben denaturálódnak.



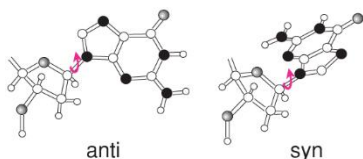
I.45. ábra. A timin enol-oxo tautomeriája. Fiziológias (neutrális) pH-n a bázisok oxo formája stabilabb, az enol előfordulási aránya kb. 0,01%. Funkcionális szempontból ugyanakkor a lehetséges tautomer átrendeződésnek nagy jelentősége van, mert az megváltoztatja a hidrogénkötések kialakításának lehetőségét, ami replikációs hibákat eredményezhet.



I.46. ábra. A polinukleotid lánc vázát alkotó cukor – foszfát lánc felépítése.

A DNS-spirál felszínén, a szemközti láncok glikozidos kötéseinek egymáshoz viszonyított elhelyezkedése miatt két jellegzetes vájat, az úgynevezett nagy árok és kis árok alakul ki. A bázispárok a nagy és kis árok felé jellegzetes orientációt mutatnak (I.44. és I.49. ábra). A hidrofil keto- és aminocsoportok az árkok felé néznek, ami lehetővé teszi az oldószer molekuláival, illetve a megfelelő ligandumokkal való kölcsönhatásukat. A ligandumfelismerési mechanizmusok alapját is sok esetben ezeknek a hidrofil csoportoknak az elhelyezkedése képezi.

A DNS-molekula helikális szerkezetét már korai röntgendiffrakciós vizsgálatok is bizonyították. A különböző természetes és szintetikus DNS-ek szerkezetének összehasonlításakor az is kiderült, hogy bár a DNS mindig helikális szerkezetű, különböző szimmetriájú és konformációjú spirálok fordulhatnak elő, például a DNS ionkörnyezetétől, bázisszekvenciájától függően. Az eddig megismert formák három csoportra oszthatók, amelyeket ma mint A-, B- és Z-DNS-eket azonosítunk.

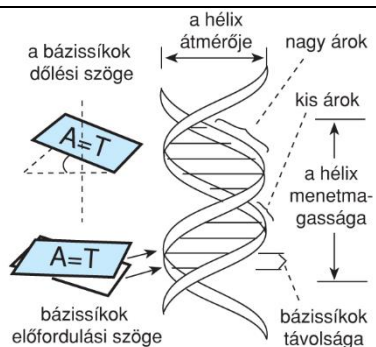


I.47. ábra. A DNS cukor komponensének szerkezete és konformációi. A cukorkomponens a nukleinsavak legflexibilisebb alkotóeleme. Az öttagú gyűrűnek két meghatározó konformációja fordul elő a polimerben. A ribofuranóz gyűrű három szénatomja és az oxigén atom egy síkban van, a negyedik szénatom kiemelkedik ebből a síkból. Így jön létre az úgynevezett boríték konformáció. A C2'-endo formában a C2' szénatom, a C3'-endo forma esetében a C3' szénatom emelkedik ki a gyűrű síkjából a bázisokkal azonos irányban. A C2'-endo és C3'-endo konformáció jelenléte alapvetően befolyásolja a polimer magasabb rendű szerkezeteinek kialakulását.

A polinukleotid másodlagos szerkezetét a cukor konformációs állapota és a bázisnak a cukorhoz viszonyított, a glikozidos kötés forgási lehetőségei révén kialakuló helyzete befolyásolja. A másodlagos szerkezet paramétereit az I.49. ábrán mutatjuk be. Az egyes másodlagos szerkezetekre jellemző értékeket az I.6. táblázatban foglaltuk össze.

Az A- és B-DNS jobb menetes spirált alkot. A B-DNS a leggyakrabban előforduló forma, szerkezete megfelel a Watson–Crick-modell által leírtaknak. A nedvességtartalom csökkentésével a DNS konformációja eltolódik az A-forma felé, de a DNS bizonyos szekvenciái, így a homopurin-homopirimidin szakaszok természetes körülmények között is kedveznek az A-konformáció kialakulásának. Az RNS kettős helikális szakaszai is A-típusú szerkezetet mutatnak.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



I.48. ábra. A cukor és a bázis gyűrűjének egymáshoz viszonyított elhelyezkedése. A *syn*konformációban a bázis és a cukor a kötés azonos, míg *antik*konformációban ellentétes oldalán helyezkedik el. Mind az egy-, mind a kétszálalás polinukleotidokban döntően az *antik*konformáció fordul elő, míg *syn*konformáció jelenik meg például a Z-DNS-ben.

1.8. táblázat - I.6. táblázat. DNS-hélix konformációinak jellemző paraméterei

Paraméter	A-DNS	B-DNS	Z-DNS
Hélix menete	jobb	jobb	bal
Bázispár/menet	11	10 (10,5)	12
Bázissíkok távolsága (nm)	0,25	0,34	0,37
Hélix menetmagassága (nm)	2,8	3,4	4,5
Bázissíkok dőlési szöge (°)	20	-6	7
Bázisok elfordulási szöge (°)	33	36	-30
Hélix átmérője (nm)	2,3	2	1,8

A legfontosabb, az egész szerkezetre kiható különbség az A- és B-DNS között az, hogy az A-DNS-ben C3'-endo, míg a B-DNS-ben C2'-endo a pentóz konformációja (I.47. ábra). Ez a konformációváltozás befolyásolja a cukor-foszfát lánc geometriáját, s így a bázisok távolságát, a bázisoknak a hélix tengelyével bezárt szögét (I.49. ábra). A B-DNS esetében a hélix képzeletbeli tengelye merőleges a bázisok síkjára, a purinbázis N1 atomjának közelében dőli azt át (I.50. ábra). Az A-DNS tengelye a bázisokon kívül, a nagy árokban fut végig.

A B-DNS felszínén a két árok világosan elkülönül, a nagy árok 1,2 nm, a kis árok 0,6 nm széles. Az A-DNS-ben a két árok kevésbé kifejezett, mint a B-DNS esetében, mélységük kisebb és szélességük közel azonos.

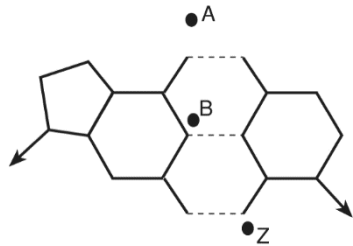
Annak felfedezése, hogy a DNS váltakozó purin-pirimidin szekvenciái bal menetes hélixet is képezhetnek, nagy tudományos jelentőséggel bírt. Az ilyen, bal menetes Z-DNS jelenlétét kimutatták több bakteriális DNS-ben, a humán DNS számos szakasza is képes ilyen szerkezet kialakítására. A Z-DNS kialakulását okozhatja például nagy sókoncentráció – pl. 3 M NaCl – is. A Z-DNS-hez specifikusan kötődő és azt stabilizáló fehérjék számos sejtben megtalálhatók, ami a szerkezet biológiai jelentőségét támasztja alá.

A Z-DNS-nek a B-DNS-sel közös vonása, hogy kettős szálú, a szálak antiparallel lefutásúak és a bázisok a Watson–Crick modell szerinti hidrogénhidakkal kapcsolódnak egymáshoz. Ugyanakkor a Z-DNS-ben a cukor-foszfát gerinc cikcakkos lefutású, a hélix átmérője kisebb, menetmagassága nagyobb, mint a B-DNS esetében. A nagy árok itt szinte teljesen eltűnik, a meglévő keskeny és mély árok a kis árok analógiájának tekinthető. A szerkezetre vonatkozó konkrét adatokat az I.6. és I.7. táblázatban tüntettük fel. A szerkezeti eltérések fő oka az,

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

hogyan a Z-DNS-ben a cukor C3'-endo C2'-endo, valamint a glikozidos kötés *anti*- és *syn*konformációja váltakozik, ahol a a C3'-endo-helyzet mindig *syn*konformációval párosul és viszont. Ennek következtében megváltozik a bázispárokhoz viszonyított elhelyezkedése (I.50. ábra) és a bázisok közötti stacking kölcsönhatások is módosulnak.

Ahol egy láncon belül B- és Z-szakaszok felváltva fordulnak elő, ott az átmeneti régióban 3-4 bázisra kiterjedő párosítatlan régiók teszik lehetővé a kettős közötti átmenetet.



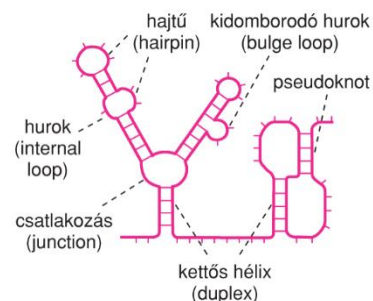
I.50. ábra. A hélix tengelyének bázisok síkjához viszonyított helyzete a különböző konformációjú kettős hélixek esetében.

1.9. táblázat - I.7. táblázat. A poli-nukleotid alegységeinek a kettős hélix szerkezetét befolyásoló konformációi

	nukleotidok	A-DNS	B-DNS	Z-DNS
a cukor és bázis közötti kötés konformációja	A, T, C	anti	anti	anti
	G	anti	anti	syn
dezoxiribóz konformációja	A, T, C	C3'-endo	C2'-endo	C2'-endo
	G	C3'-endo	C2'-endo	C3'-endo

4.2.3. /4.2.3. Az RNS másodlagos szerkezetének sajátosságai

Az RNS kettős szálú, helikális formában előfordul ugyan egyes vírusokban, de jellemzően egyszálú lineáris polimer, ami ugyanakkor jellegzetes másodrendű szerkezettel rendelkezhet. Az egyszálú láncon belül előfordulhatnak egymással komplementer bázisszekvenciák. A lánc visszahajlásakor a komplementer szakaszok kapcsolódásával antiparallel, kettős szálú helikális szerkezet alakulhat ki. A kettős szálú szakaszok között az egyszálú polimer mintegy hurkot képez. Az így kialakuló tipikus szerkezeti variációkat – amelyeknek az RNS működésében is fontos szerepük lehet – mutatjuk be az I.51. ábrán.



I.51. ábra. Az RNS másodlagos szerkezetének tipikus szerkezeti elemei.

4.2.4. /4.2.4. A DNS harmadlagos szerkezete, szuperhelicitás

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

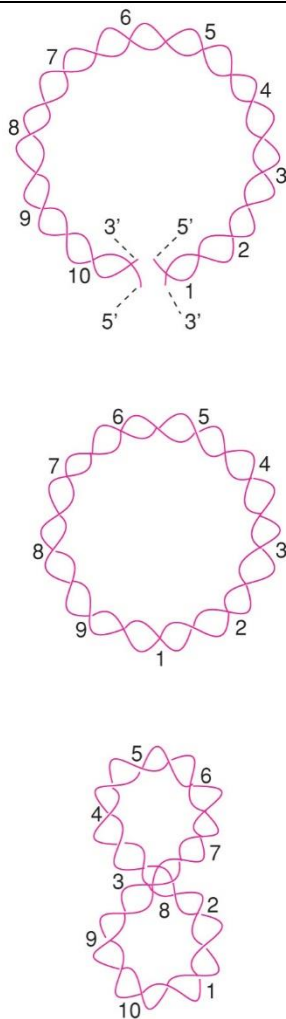
Ennek megértéséhez végezzünk el egy gondolat kísérletet. Vegyünk egy n bázispárból álló, szabályos B konformációjú kettős hélixet. Tekintve, hogy egy teljes csavarulatra 10,5 bázispár jut, a menetek száma $n/10,5$. Most fogjuk meg a hélix egyik végét és kezdjük el széttekerni a szálakat. Ekkor a hélixben torzulást idézünk elő, hiszen megváltoztattuk az egy menetre jutó bázisok számát. Ha a kettős hélixünk végei szabadok, akkor a teljes hélix forgásával kompenzálhatja a menetszám megváltoztatását, és rekonstruálhatja az eredeti állapotot. Ha azonban a lánc végei rögzítettek, például úgy, hogy a lánc két végét gyűrűvé zárjuk, akkor a lácban feszülés lép fel. Ezt kompenzáló rögzített végű kettős hélixünk felcsavarodhat egy hengeres test körül vagy feltekeredhet saját tengelye körül. Az így kialakuló szerkezetet nevezzük szuperhélixnek. A hengerre feltekeredett kettős hélix jól modellezi például az eukariótasejtek kromatinállományában kialakuló struktúrát, ahol a DNS protein magra tekerődhet. Saját tengelye körül tekereselt szuperhelikális cirkuláris DNS fordul elő például prokariótasejtekben, plazmidokban vagy átmenetileg a replikáció, transzkripció során.

A fent leírt gondolati kísérletet az ellenkező irányban is elvégezhetjük, vagyis szupertekercs tekerelésének iránya lehet azonos a kettős hélixével, vagy lehet azzal ellentétes. (I.52. ábra) Az úgynevezett negatív szupertekercs „alultekert”, mert abban kevesebb a hélix menetszáma, mint a relaxált formában. A pozitív szupertekercsben éppen ellenkezőjét látjuk, nő az ugyanannyi bázisra jutó menetek száma, vagyis „túltékertté” válik a szerkezet. Azokat a szerkezeteket, amelyek csak a szupertekercs szerkezetében különböznek, egymás **topológiai izomerjeinek** nevezzük.

A pozitív szupertekercs a hélixet még zártabbá, szorosabbá teszi. Az így kialakuló szerkezet savakkal és melegítéssel szemben sokkal ellenállóbb. Feltételezések szerint szerepük lehet a genom denaturáció elleni védelmében, természetes előfordulásukra azonban eddig még kevés példát találtak.

Negatív szupertekercs az eddig vizsgált valamennyi genomban fellelhető volt. A negatív szupertekercselés lazítja a kettős hélix szerkezetét, ami akár a bázispárok képzés néhány bázisra kiterjedő megszűnéséhez is vezethet. Ezeknek a rövid szakaszokra kiterjedő szerkezetváltozásoknak nagy jelentősége lehet a replikáció vagy transzkripció során.

Energetikailag a relaxált állapot a legkedvezőbb. A szuperhelikális struktúra létrehozása mindig energiabefektetéssel jár, vagyis a szupertekercselt szerkezet mintegy energiát tárol.



I.52. ábra. A negatív szupertekercs kialakulása és szerkezete.

4.3. I/4.3. Fehérjék

A makromolekulák másik nagy és szintén igen fontos csoportját a fehérjék alkotják. A DNS molekula adja tovább az információt és irányítja a sejt működését, a fehérjék pedig egyrészt kialakítják a működéshez szükséges struktúrát, másrészt „végrehajtják az utasításokat”, gondoskodnak a sejtek anyagcseréjéről, életfunkcióiról. Az élőlények, illetve az őket alkotó sejtek, szövetek minden lényeges funkciójában kitüntetett szerepük van.

Léteznek ún. strukturális fehérjék (pl. kollagénrostokat alkotó molekulák), amelyeknek a szerkezet kialakításában van jelentős szerepük. Az enzimek az anyagcsere folyamatában vesznek részt és teszik lehetővé azokat a kémiai folyamatokat, amelyek az élet alapját képezik. A fehérjetermészetű hormonok az irányításban, szabályozásban játszanak döntő szerepet. De fehérjék kölcsönhatása hozza létre az izommozgást is (aktin-miozin és kölcsönhatásuk, szerkezeti változásuk az alapja az állati és emberi mozgásoknak).

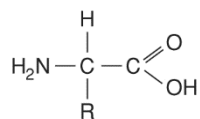
Fehérjék közvetítésével zajlik az immunrendszer működése is (pl. az immunglobulinok, amelyek felismerik az antigént). Szintén fontos szerepet töltenek be a membránban, mint a membránon keresztül megvalósuló transzportot elősegítő alkotók (pl. a különböző ionszűrőket létrehozó fehérjék) és még sorolhatnánk a példákat. Ebben a részben áttekintjük a jelenleg rendelkezésre álló általános szerkezeti ismereteket.

4.3.1. I/4.3.1. A fehérjék elsődleges szerkezete, aminosavak

Mint minden makromolekula, a fehérjék is elemi egységekből, vagyis monomerekből épülnek fel. A monomerek közös sajátossága az ún. α -szénatomhoz kapcsolódó aminos- (NH_2 -), valamint karboxil- (COOH -)

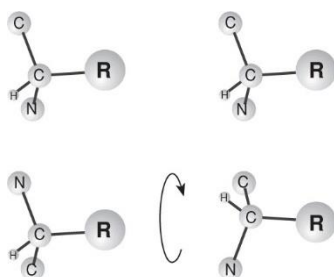
I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

csoport (I.53. ábra). A molekuláris váz alapján nevezték el ezeket a molekulákat aminosavaknak. Ehhez az atomhoz kötődő különböző csoportok (az ábrán *R* betűvel jelölt) ún. oldalláncok különböztetik meg az egyes monomereket. A legegyszerűbb aminosav, a glicin esetében ez pl. egy H-atom.



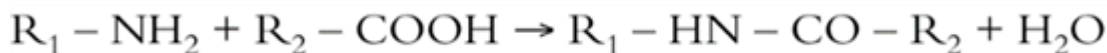
I.53. ábra. Az aminosavak felépítése.

Az α -szénatom minden egyes vegyértékéhez különböző atom vagy atomcsoport kapcsolódik (kivéve a glicint) és így aszimmetrikus tulajdonságú, vagyis létezik két egymásnak tükörképi szerkezeti izomerje, amelyek forgatás révén nem hozhatók azonos helyzetbe (I.54. ábra). Az élővilágban, a fehérjékben a két forma közül, jelenleg nem kielégítően megmagyarázható okoknál fogva, csak az egyik, mégpedig az ún. L-változat fordul elő.

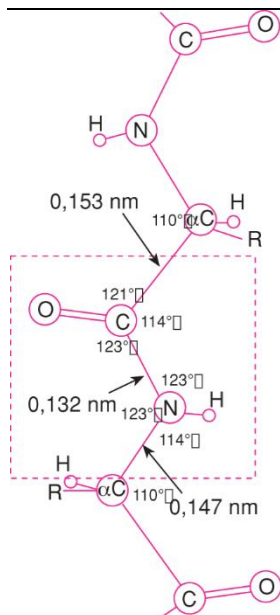


I.54. ábra. Aszimmetrikus szénatom és az optikai izoméria jelensége. A felső ábra egy L-, az alsó pedig egy D-konformációt szemléltet. Az ábrából látható, hogy forgatással a két izomer nem hozható hasonló helyzetbe.

Mai ismereteink alapján 20 aminosav vesz részt a fehérjék polimerláncának kialakításában, ami nagyszámú változatot tesz lehetővé még kis monomerszám esetében is. A monomerek víz leadása közben kialakuló kovalens kötéssel ún. peptidkötéssel kapcsolódnak egymáshoz:



Az egymás után következő aminosavak alkotják a polipeptidláncot. A méretük néhány aminosavtól a több száz monomert tartalmazó nagy fehérjemolekuláig terjed. A peptidkötésben részt vevő C- és N- valamint a hozzájuk kapcsolódó H- és O-atomok egy síkban helyezkednek el (I.55. ábra). Ennek az elrendezésnek fontos szerepe van a térszerkezet kialakításában.



I.55. ábra. A peptidkötés.

A polipeptidlánc változatossága

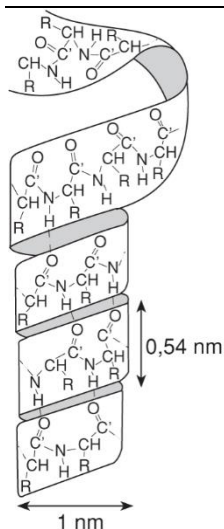
A 20-féle aminosav igen sokféle fehérjeszerkezet tesz lehetővé. Ha egy molekula 50 monomerből épül fel, a kombinatorika szabályai szerint 20^{50} a lehetséges változatok száma. A következő összehasonlítás talán segít megérteni, hogy ez mekkora szám. Az Univerzum életkora kb. 12 milliárd év, ami $\sim 4 \cdot 10^{17}$ másodperc. Ha ezt az értéket összevetjük a $20^{50} \sim 10^{65}$ -kel, láthatjuk, hogy ha minden másodpercben történik egy mutáció, akkor is csak a lehetséges variációk egy kis hányada képes megvalósulni. Tehát még mindig igen sok fehérjeszekvencia rejtőzködik és vár a felbukkanásra. Természetesen ezek jelentős része valószínűleg nem hordoz hasznos információt. Másrészt egy adott funkció sok lehetséges szerkezet esetében hasonló vagy éppen azonos. Ezek a latens mutációk csak a DNS-szekvenciában jelennek meg, az élőlény megfigyelhető tulajdonságaiban nem.

4.3.2. I/4.3.2. A fehérjék másodlagos szerkezete

A polipeptidlánc aminosavsorrendje által meghatározott szerkezetet elsődleges szerkezetnek nevezzük. Ez a fehérjeszintézis során, a gének által meghatározott módon, a riboszómák felületén alakul ki. A fehérjéket a XIX. század második felében azonosították. A fehérjék azonban nem egyszerűen aminosav- láncok. Csak a XX. század közepe táján tisztázódott, hogy ezek a láncok bonyolult térbeli szerkezetet, makromolekuláris konformációt alakítanak ki, amely fontos feltétele működőképességüknek (pl. enzimek aktív centrumának kialakítása). A fehérjék konformációjának tulajdonságait, kialakulását mind a mai napig intenzíven vizsgálják.

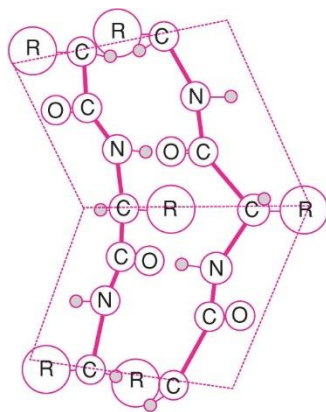
Elsőként a mioglobin szerkezetét sikerült meghatározni. A röntgendiffrakció módszerével, kristályosított mintán kimutatták, hogy a lánc jelentős hányada ún. α -hélix formákat vesz fel, vagyis egy képzeletbeli henger mentén feltekeredik (I.56. ábra). Az ábrán egy hélix szerkezete látható; a hélix jobb menetes, a menetemelkedés 0,54 nm. Két egymást követő monomer közötti elfordulás szöge 100° . Ebből az adatból kiszámolható, hogy 3,6 monomer jut egy menetemelkedésre, valamint az, hogy 5 menetemelkedés után kerül egy aminosav azonos pozícióba a láncon belül. A szerkezet stabilizálásában H-hidak vesznek részt, amelyek párhuzamosak a hélix tengelyével, és egy aminosav, valamint a láncon utána következő negyedik monomer között képződnek (az ábrán szaggatott vonal jelzi a H-hidakat).

Amint azt az I.56. ábra is szemlélteti, az α -helikális szerkezet a polipeptidlánc egy bizonyos (általában több) szakaszára jellemző, az ilyen szekunder szerkezeti elemeket rendezetlen vagy más formában rendezett tartományok választják el egymástól. A mioglobin szerkezetében a monomereknek kb. 75%-a található α -hélix elrendezésben. Ebből következően a fenti szerkezeti jellemzők csupán a rendezett tartomány belső magjára érvényesek.



I.56. ábra Az α -helikális struktúra vázlata.

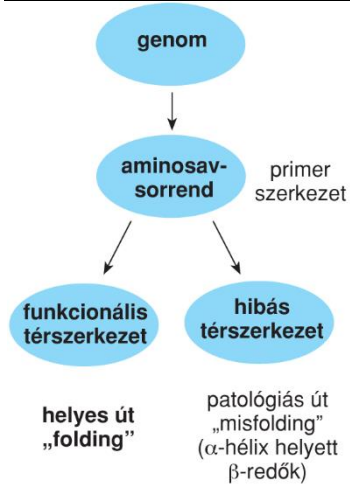
Egy másik fontos szerkezeti forma a β -lemez, amelyet az I.57. ábrán mutatunk be. Ezt a struktúrát két párhuzamosan futó lánc vagy láncdarab hozza létre. A láncok egymáshoz viszonyított helyzete lehet párhuzamos vagy ellentétes (parallel vagy antiparallel). A β -lemezes szerkezet gyakran a polipeptidlánc visszakanyarodásával alakul ki antiparallel formában. Ilyenkor a visszaforduló szakasz is jellegzetes szerkezeti vonásokat mutat (β -fordulat). Antiparallel β -típusú rendezett kapcsolat két fehérje között is létrejöhet. Ennek az összekapcsolódásnak igen nagy szerepe van a fehérjék aggregációs jelenségeiben. Ilyen típusú kölcsönhatások hozzák létre az amyloid típusú fehérjeplakkokat is, amelyek kialakulását több idegrendszeri megbetegedés, így pl. az Alzheimer-kór kiváltásával hozzák kapcsolatba. Ezért ez a fajta rendeződési forma különösen a kutatások előterében áll. (I.58. ábra).



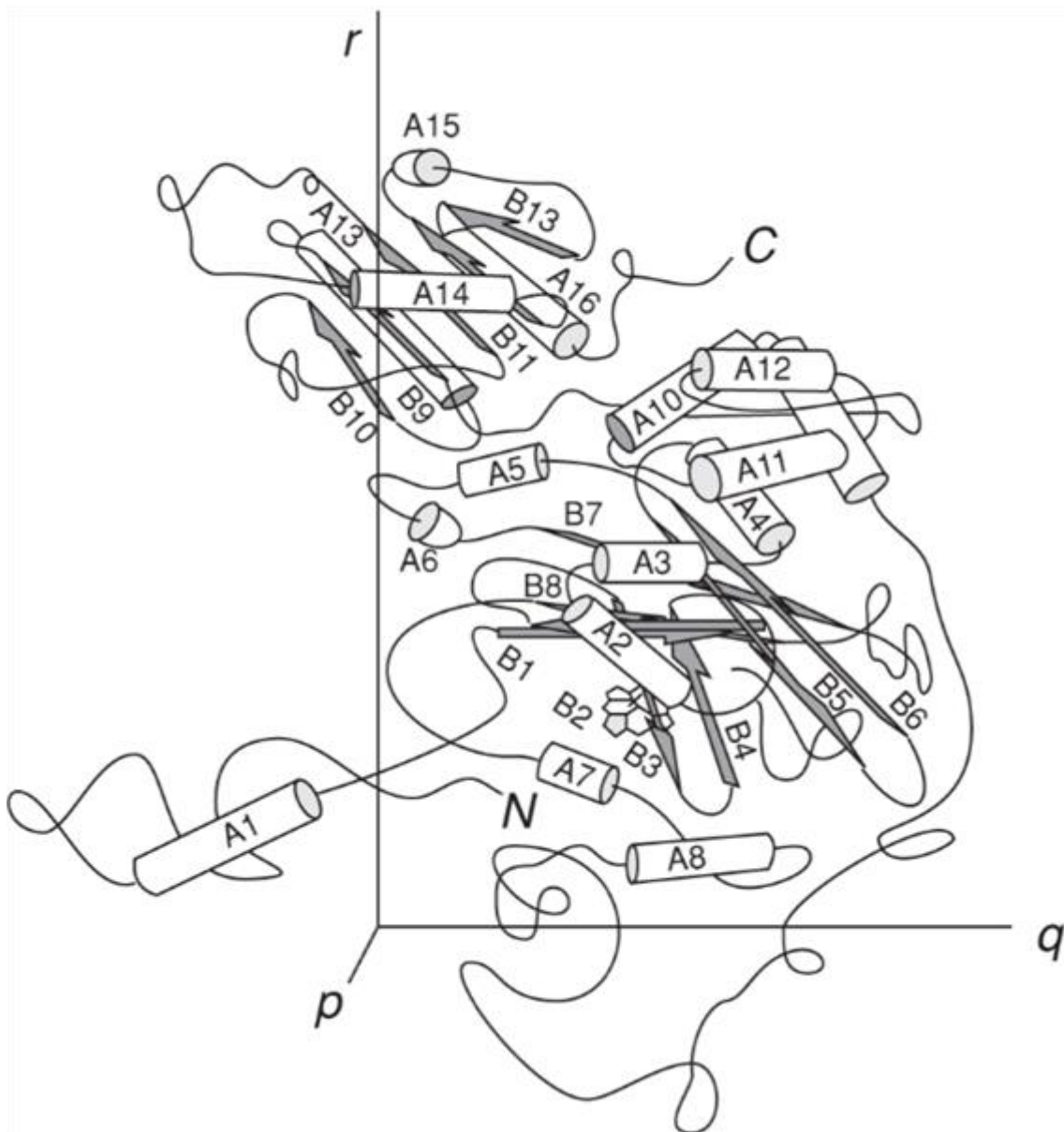
I.57. ábra. A β -lemez szerkezete (antiparallel változat).

Az I.59. ábra a kataláz enzim térbeli szerkezetét mutatja be. Látható, hogy mind az α -helikális, mind a β -lemezes szerkezet megjelenik a molekula bizonyos részein. Ezeket a másodlagos struktúrákat egyszerű polipeptidlánc-részletek kapcsolják össze. Az ábráról az is leolvasható, hogy a másodlagos szerkezetek feltárása nem elegendő egy fehérje térbeli szerkezetének tisztázásához és így működésének megértéséhez.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



I.58. ábra. A térszerkezet helyes és helytelen kialakulásának útja.



I.59. ábra. A katalázenzim térbeli szerkezete. A hengerek α -helikális részleteket, a nyilak β -lemezeket jelölnek. Az egyéb helyeken másodlagos szerkezet nélküli láncdarabok láthatók.

4.3.3. I/4.3.3. A harmadlagos szerkezet és kialakulása

A szintézis közben és közvetlenül utána a fehérjemolekula másodlagos szerkezetet alakít ki, azonban ez nem azonos a működőképes (natív) térszerkezettel, amely kialakításának folyamata, a kialakulást befolyásoló tényezők szerepe jelenleg még nem tisztázott. A térbeli szerkezet kialakulásának (angolul „folding”) mechanizmusa nagy erővel kutatott terület, hiszen a fehérjeszintézis ma már rutinszerűen megoldható feladatok után ez a jelenség szabja meg a szintézissel előállított polimer működőképességét.

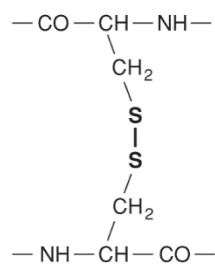
Bizonyos fehérjék vizsgálata arra utal, hogy három lépésben történik a végleges szerkezet kialakulása. Először egy gyors hajtogatódás következtében kialakul egy közelítő alakzat. A második, lassúbb fázisban egy átrendeződés megy végbe, míg végül egy szintén gyors folyamat során a molekula elnyeri végső alakját.

Az elsődleges szerkezet megállapítására ma már léteznek automata berendezések (ún. szekvenátorok), de a másodlagos, illetve harmadlagos szerkezet kiderítése bonyolult, időt igénylő és drága eljárás (pl. röntgendiffrakció és NMR-spektroszkópia, amelyek működését és alkalmazásuk alapjait később tárgyaljuk; lásd a X/4., X/6. részeket). Ma már több ezer vízdékony fehérje szerkezetét ismerjük atomi részletességgel. Ezek az adatok mindenki által elérhetők és ingyenesen felhasználhatók számítógépes hálózatokon keresztül.

A kísérleti eredmények alapján lehetőség van ismert fehérjék módosításának szerkezeti vonatkozásait, ill. szekvenciális hasonlóságok alapján újonnan szintetizált fehérjék térszerkezetét számítógépes módszerekkel meghatározni, illetve megbecsülni. A számítások alapját a szerkezet meghatározásánál az energiaminimum-elv, a szerkezeti becsléseknél pedig statisztikai módszerek képezik.

4.3.4. I/4.3.4. A térbeli szerkezet kialakításában szerepet játszó kölcsönhatások

A harmadlagos szerkezet kialakításában H-hidak, poláris és hidrofób kölcsönhatások vesznek részt. Mindezek mellett megjelenik egy kovalens kötés is, amely két SH-csoportot tartalmazó aminosav (pl. cisztein) között jön létre. Az így kialakuló ún. diszulfidhidak, jelentős kötési energiájuk révén, nagymértékben stabilizálják a kialakuló térbeli szerkezetet (I.60. ábra). Az irreverzibilis denaturációban is fontos szerep jut a folyamat során kialakuló új diszulfid- hidaknak azokban a fehérjékben, amelyek natív állapotukban szabad SH-csoportokkal rendelkeznek.



I.60. ábra. Diszulfid híd két kéntartalmú aminosav között.

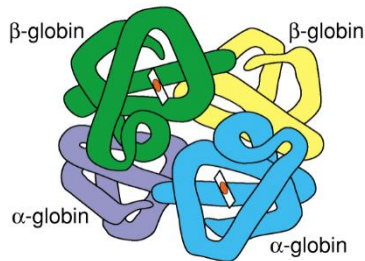
Hidrogénhíd képzésében szerepet játszó legfontosabb csoportok a peptidkötésben részt vevő $\text{C}=\text{O}$ és $\text{N}-\text{H}$ csoportok. Az előbbi akceptorként, az utóbbi donorként szerepel a kölcsönhatásban. Jelentőségükre utal az a tény, hogy általában a csoportoknak mintegy 90%-a részt vesz ilyen kapcsolatok kialakításában. Semleges pH-n az aminosavak közül az aszparagin és a glutamin akceptorként, a lizin és az arginin donorként viselkedik. A szerin és a tirozín lehet mindkettő, de főleg donorként vesznek részt H-hidak kialakításában. Itt kell megemlíteni a víz szerepét a fehérjék strukturájának stabilizálásában. A fehérjemolekulához kívülről kötődő vízmolekulák hidrátburkot formálnak és részt vesznek a szerkezet stabilizálásában. Fontos szerep jut azonban a fehérjemolekula belsejében elhelyezkedő molekuláknak is. A víz donor és akceptor szerepet is betölthet (lásd I/4.1.). Egy vagy több vízmolekula két hidrogén-híd révén összeköthet egymástól távolabb fekvő csoportokat is, amelyek egyébként nem lennének képesek a nagy távolság miatt ilyen kapcsolat kialakítására. Ez a jelenség még kis fehérjemolekulák esetében is előfordul.

Elektrosztatikus kölcsönhatások alakulhatnak ki a töltéssel rendelkező oldalláncok között. Pozitív töltéssel rendelkező oldalláncot hordoznak pl. az aminocsoportot tartalmazó aminosavak (arginin, lizin) míg negatív töltéssel rendelkezhetnek a karboxilcsoportot tartalmazó aminosavak (aszparaginsav, glutaminsav).

A harmadlagos szerkezet kialakulásában és stabilitásában fontos szerepet tölt be a hidrofób kölcsönhatás. A hajtogatódás előfázisában a fő hajtóerőt ez szolgáltatja, mivel az egyéb kölcsönhatások kialakulása a viszonylag nagy intramolekuláris távolságok miatt jelentősen korlátozott. Később viszont már a fent említett egyéb kölcsönhatások kerülnek előtérbe és biztosítják a szerkezet stabilitását.

4.3.5. I/4.3.5. Negyedleges szerkezet

A fenti struktúrák mellett szokás még egy szerveződési szintet megemlíteni a fehérjék esetében. Ez abból adódik, hogy vannak olyan fehérjék, amelyek nem egy aminosavláncból, hanem kettő vagy több ún. alegységből épülnek fel. Az így kialakuló szerkezetet tekintjük negyedleges szerkezetnek. Például ilyen szerkezet jellemző a közismert hemoglobinnra, amelynek fehérjérsze négy alegységből épül fel (I.61. ábra). Az alegységek összetartásában szintén a gyenge kölcsönhatásoknak, ill. a vízmolekulák H-kötéseinek van nagy szerepe. A határfelületen kialakuló kölcsönhatások kulcsszerepet tölthetnek be a több alegységből álló fehérjék alloszterikus viselkedésében, mint pl. a hemoglobin ligandumkötési reakciójában.



I.61. ábra. A hemoglobin vázlatos alegységszerkezete.

4.4. I/4.4. Rend és rendezetlenség makromolekuláris rendszerekben

Az előző, makromolekuláris rendszerek szerkezetéről szóló szakaszokban láthattuk, hogy ezeket a szerkezeteket natív formájukban igen sokfajta kölcsönhatás együttesen stabilizálja. Ha egy-egy nukleinsavrészletet (pl. kromatinban) vagy fehérjét (pl. működő enzimet, membránba épült jelátvivő rendszert) megvizsgálunk a kötéseerőségek szempontjából, azok hierarchikus rendje ismerhető fel. Érdekes megvizsgálni a legerősebb kovalens kötésektől elindulva a gyengébb kötések irányában haladva, hogy mi az egyes kötéstípusok szerepe a natív szerkezet fenntartásában, és van-e lehetőség a kötések felszakadására testhőmérsékleten, termikus fluktuáció (Boltzmann-eloszlás) révén.

Kovalens kötések. A kötési energiát a 2-10 eV tartománnyal jellemeztük. A Boltzmann-eloszlás formulája alapján (lásd I/3.1.1.) – durván – megbecsülhető, hogy a kovalens kötések hány %-a lehet testhőmérsékleten felszakadva ($kT = 0,026$ eV). A kötési energia ~ 5 eV-os értéke esetén pl. az n_f és n_e felszakadt és ép kötőhelyek számának hányadosára $\sim e^{-200}$, azaz igen jó közelítéssel 0% adódik. Ezek a kötések azok, amelyek a makromolekulák polimerláncát egyben tartják, amelyek kialakítják a felépítő alpmolekulák kémiai szerkezetét, amelyek az anyagcsere-folyamatok kisebb molekuláit (ATP, NADH stb.) stabilizálják. Megnyugtató információ, hogy ezek a kötések testhőmérsékleten épek. A kötési energia nagyságrendjébe eső vagy azt meghaladó energiaadagok (pl. UV fény, röntgensugárzás, γ -sugárzás fotonjai vagy enzimreakciók energiafelszabadulása) lokálisan, egy kötés környezetében elnyelődve viszont annak felszakadását eredményezhetik (l. DNS-lánc törések γ -sugárzás hatására, vagy genetikai kód másolása DNS-ről).

H-hidak. A kötési energia itt – a lehetséges legszélesebb tartományt tekintve – 0,05-0,3 eV. A vízmolekulák kötési energiájához képest valamivel kisebb, 0,1 eV-os értéket véve példaként, az n_f és n_e kötőhelyek számának hányadosa – durva becsléssel – testhőmérsékleten $\sim 2,5\%$ (a két szélső határnak 16% ill. 0,005% felel meg – de akármelyik értékkel is számolunk, nem szabad elfelejtenünk, hogy egy erősen leegyszerűsített modell alapján végeztük a becslést). Ez már igen jelentős hányadot jelenthet a konkrét makromolekuláris szerkezetekben. A közelítés alapján becslést adhatunk pl. a DNS kettős hélixét összetartó H-hidak felszakadására. A T7 bakteriofág nukleinsavában ~ 40000 bázispárt tartanak össze H-hidak, azaz kb. 100000 H-híd stabilizálja a szerkezetet.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

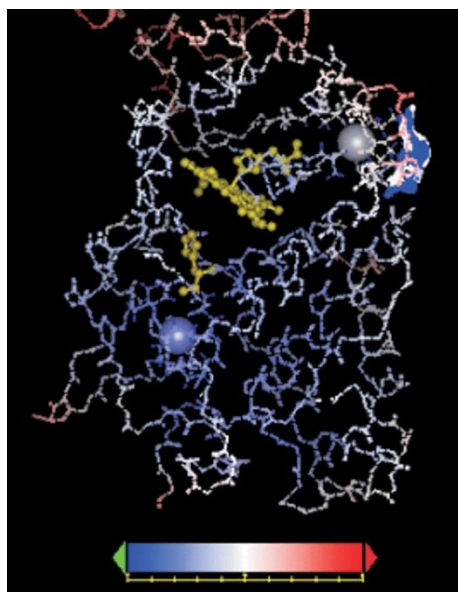
Ebből a fentiek szerint kb. 2000 van minden pillanatban felszakadt állapotban. Természetesen ezek helye nem rögzített; a fenti megközelítésben véletlenszerűen alakul ki a felszakadás és újraépülés. A valóságban azonban a nukleinsavak magasabb rendű szerkezete és kölcsönhatásai fehérjékkel lokálisan megváltoztatják a H-hidak kötéseit, és célzott helyeken (egyszerre több H-hidat is érintve) tartós felszakadáshoz – azaz pl. a kettős lánc szétnyílásához vezethetnek. Ilyen jelenségeknek lehet pl. szerepe a genetikai kód átírásakor lezajló kezdeti lépésekben.

A hidrofób kölcsönhatás a H-hidas kölcsönhatásokhoz képest kisebb energiatarományt jelent, tehát a jelentős számú felszakadást eredményező gyengébb kölcsönhatások közé tartozik.

Gyenge dipólkölcsönhatások, diszperziós kölcsönhatás. Ha a kötési energia még az előző kategóriánál is kisebb, összemérhető a termikus energiaadaggal, akkor még jelentősebb a kötések folyamatos felszakadása és újraépülése. Különösen ennek a leggyengébb fajta kötéscsaládnak van nagy jelentősége abban a makromolekuláris szerkezeti tulajdonságban, amelyet konformációs dinamikaként említenek.

Konformációs dinamika

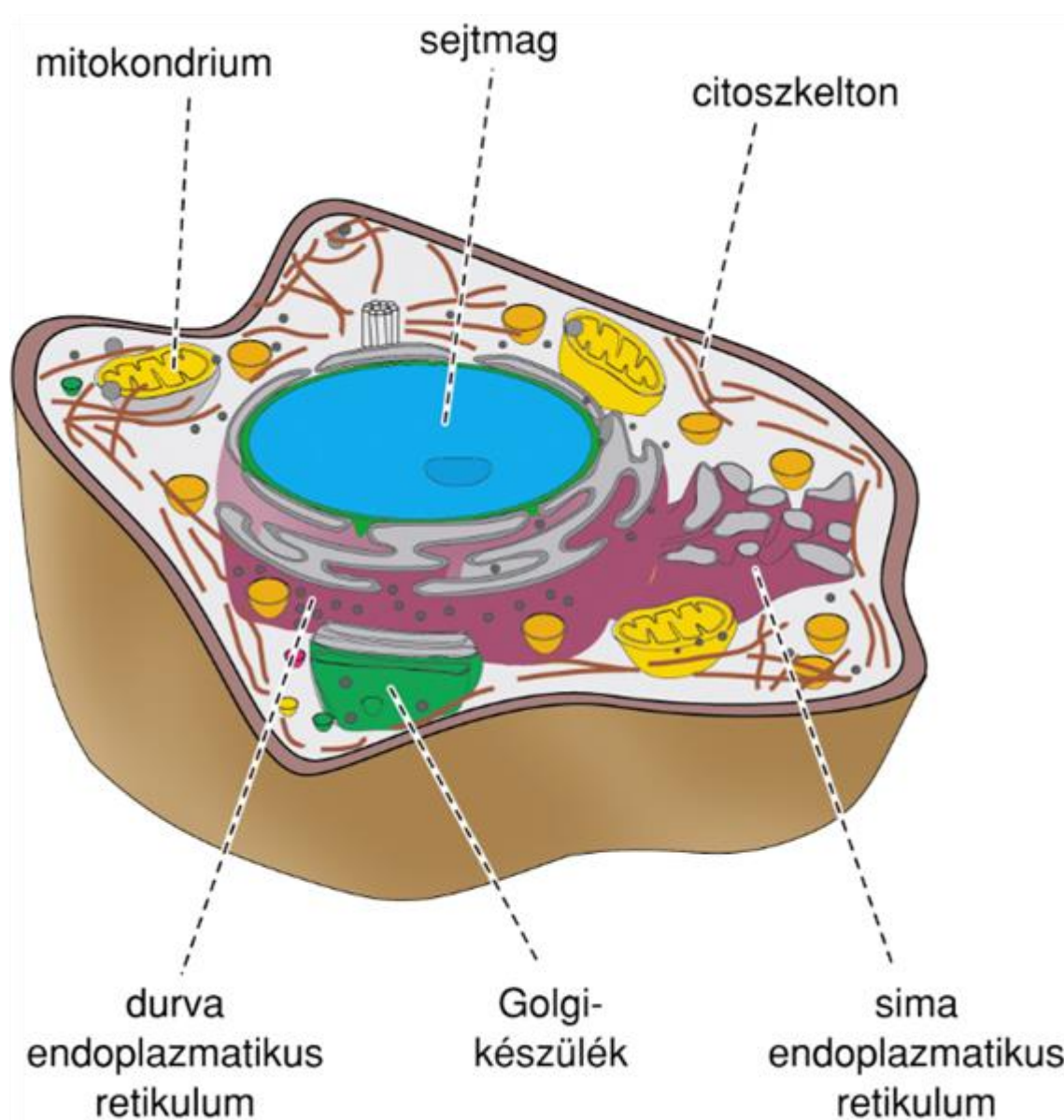
Elsőként Martin Karplus (1986) volt az, aki a mioglobinmolekula kristályos állapotában végzett röntgendiffrakciós mérések eredményeit részletesen elemezve fontosságot tulajdonított annak, hogy az atomi részletességgel meghatározott molekuláris szerkezetben a felületi atomok helye csak elég jelentős bizonytalansággal (kötéstávolság 10%-a) volt meghatározható, és ez a bizonytalanság a molekula belseje felé haladva csökken. Az atomi kötéstávolságok ismeretében megpróbálta a szerkezet alapján modellezni az O₂-molekula megkötését a molekula belsejében elhelyezkedő hemcsoport Fe-ionjánál, és megállapította, hogy a ligandum nélkül meghatározott szerkezetbe „nem fér be” az O₂-molekula. Statikus kép alapján tehát a mioglobin ismert oxigéntranszporter-funkciója nem lenne lehetséges. A fenti felismerések alapján feltételezte, hogy az említett mérési eredményben a molekulát alkotó atomok egymáshoz viszonyított állandó mozgása tükröződik, amely a felületen a legnagyobb amplitúdójú. Karplus észrevételének igazsága azóta számos formában bizonyítást nyert, tehát általánosan megállapítható, hogy a makromolekulák szerkezetében folyamatos konformációs átmenetek – szerkezeti fluktuációk - zajlanak. Ezek segítik a ligandumok transzportját az aktív centrumokba vagy a sejtmembránon keresztül, és ezek nélkül a biokémiai folyamatok nem jöhetnének létre. Ez a felismerés forradalmasította a makromolekulák szerkezete és a biológiai funkció kapcsolatáról alkotott képet. Ma már a szerkezet alapján számítógépes módszerekkel lehetőség van a szerkezet konformációs fluktuációinak meghatározására. Egyre inkább nyilvánvalóvá válik, hogy a gyógyszerhatóanyag-tervezés sikeréhez alapvetően fontos annak ellenőrzése, hogy a hatás alapjául szolgáló molekuláris kölcsönhatások hogyan alakulnak a konformációs mozgások következtében. A szerkezeti dinamika mind a molekuláris orvostudomány, mind a gyógyszerhatóanyag-területen belül egyre nyilvánvalóbb jelentőséggel bír.



Tormaperoxidáz fehérje térbeli szerkezete. Az ábrán színskálával szemléltettük a molekulában kötött két Ca-ion környezetében a polipeptidlánc konformációs fluktuációjának különbözőségét. A színkód a fluktuációs amplitúdónak felel meg.

5. I/5. Szupramolekuláris szerveződés az élő anyagban

Az előző részben néhány, az élőlények életfunkcióiban fontos szerepet betöltő molekula szerkezeti vonatkozásaival foglalkoztunk. Ezek a molekulák és még sok más molekula építi fel az élővilág egyik legfontosabb szerkezeti egységét, a sejtet. Az I.62. ábrán egy állati sejt vázlatos felépítése látható. A sejt azonban nem egyszerűen csak molekulák halma. A bonyolult életműködések bonyolult és igen jól szervezett struktúrákat igényelnek. Ez a fajta szupramolekuláris szerveződés általánosan jellemző a sejtekre. A lipidmolekulák változatos és az egész sejtet szinte kitéltő membránszerkezeteket alkotnak. Ilyen membrán választja el és köti össze a sejtet a külvilággal, így valósítva meg a szelektív kommunikációt és anyagcserét a sejt és környezete között. Membránstruktúrák tagolják, osztják fel kisebb részekre a sejt belső terét (sejtmagmembrán, endoplazmatikus retikulum, mitokondrium stb.). A sejtmagban a DNS szintén nem egyszerűen csak ott van, hanem más molekulákkal, főleg fehérjékkel bonyolult alakzatokat, szerkezeteket hoz létre a szabályozott működés megvalósítása érdekében. Más alkotórészek pedig a sejt vázát hozzák létre. Néhány ezzel kapcsolatos alapvető sejtalkotóról, sejtstruktúráról lesz szó ebben a részben.

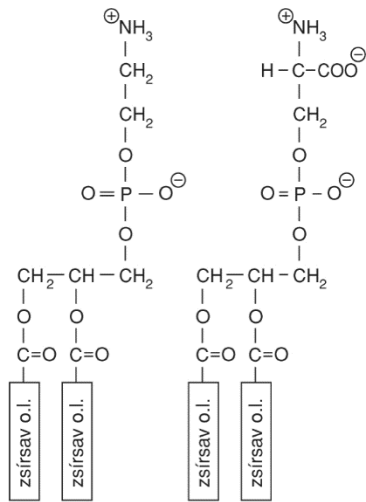


I.62. ábra. Egy állati sejt vázlatos felépítése. Természetesen a különböző funkciót ellátó sejtek között vannak eltérések, de a főbb sejtalkotó organelumok mindegyikben megtalálhatók.

5.1. I/5.1. Biológiai membránok

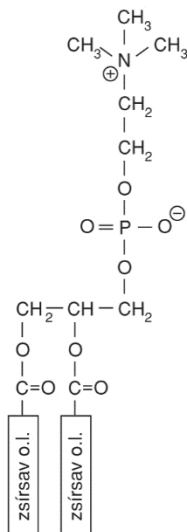
5.1.1. I/5.1.1. A lipid kettős réteg

Minden biológiai membrán – beleértve a citoplazma-membránt, valamint a sejten belüli membránfészeségeket – közös vonása, hogy nem kovalens kötésekkel összetartott lipidekből és fehérjékből felépülő struktúra. Az esetek többségében a membránok szárazanyag-tartalmának 40–60%-a lipid, 30–50%-a fehérje, 10%-a pedig szénhidrát. A sejtmembránt alkotó lipidek amfipatikus molekulák, azaz hidrofil és hidrofób molekularészeket egyaránt tartalmaznak. A foszfolipidek többségének apoláros részét a glicerinnel észterkötéssel kapcsolódó két, egyenként 14–22 szénatomot tartalmazó zsírsavdallanc alkotja. A glicerinváz harmadik szénatomjához egy negatív töltésű foszfátcsoporton keresztül egy rövidebb, néhány szénatomot tartalmazó, további töltéssel rendelkező poláros atomcsoport kapcsolódik. Ez utóbbi poláros „feji rész” lehet például etanol-amin, szerin vagy kolin; a megfelelő lipidek: foszfatidil-etanolamin, foszfatidil-szerin és foszfatidil-kolin (I.63. ábra). Ezek a poláros csoportok általában nettó töltéssel nem rendelkeznek, kivétel a foszfatidil-szerin feji része, amely egységnyi negatív töltést hordoz. Ugyancsak jelentős mennyiségben fordulnak elő a membránokban olyan foszfolipidek, amelyek a glicerinváz helyett egy amino-alkoholt tartalmaznak (szfingolipidek: például szfingomielin).



foszfatidil-
etanol-amin

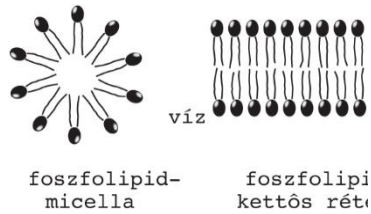
foszfatidil-
szerin



foszfatidil-
kolin

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

Amfipatikus molekulák vizes környezetben spontán aggregációra hajlamosak. Az aggregátumokat a hidrofób kölcsönhatás tartja össze, amely a hidrofób részek egymás mellé rendezésével csökkenti a poláros környezetben az apoláros részek energetikailag kedvezőtlen exponáltságát. Az apoláros oldalláncok maszkírozásának egyik igen effektív módja az ún. micellák kialakulása (I.64. ábra). Emellett a lipidek könnyen képeznek ún. kettős réteget is, amelyben a poláros feji részek a vizes fázis felé (citoplazma, illetve extracelluláris tér) fordulnak, a zsírsavoldalláncok pedig a kettős réteg belseje felé. Az így kialakult kettős réteg vastagsága kb. 5 nm.

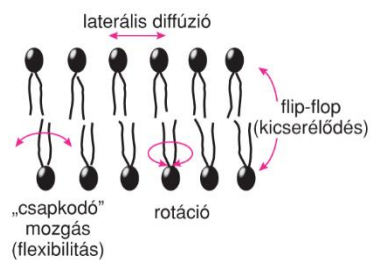


I.63. ábra. Néhány fontos, a membránok felépítésében részt vevő foszfolipid.

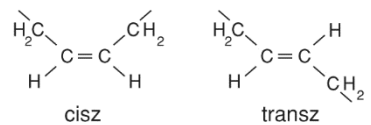
Az amfifil molekulákból spontán szerveződő lipid kettős rétegekkel szemben a sejteket határoló membrán lipid kettős rétege aszimmetrikus. A foszfatidil-etanolamin, valamint a nettó negatív töltéssel rendelkező foszfatidil-szerin szinte kizárólag a citoplazma felőli rétegben, a kolint tartalmazó lipidek pedig elsősorban a külső rétegben fordulnak elő. Az oligoszacharidokat tartalmazó lipidek (glikolipidek) a citoplazma felőli rétegben egyáltalán nem fordulnak elő. Ezeknek poláros feji része változó számú semleges cukorgyűrűt (galaktóz, glükóz, N-acetil-galaktóz-amin) és negatív töltést hordozó szíalsavat (N-acetil neuraminsav) tartalmaz. Az aszimmetrikus lipidösszetétel az endoplazmatikus retikulumon való membránszintézis közben alakul ki. Az aszimmetria egyebek közt abban is megnyilvánul, hogy a transzmembrán jelátvitelben részt vevő egyik inozitollipid (inozitol 4,5-difoszfát) elsősorban a lipid kettős réteg citoplazmatikus oldalán helyezkedik el.

A membránlipidek hidrofób oldalláncai közötti kölcsönhatások erőssége a lipidösszetételtől függ. Ha a hómórgás intenzitása nem kompenzálja a gyenge kölcsönhatások vonzóerőinek rendező hatását, a hidrofób részek rendezettsége fokozódik, és egy karakterisztikus, „fázisátalakulási” hőmérséklet alatt rigid, gélszerű struktúra alakul ki. A fázisátmenethez tartozó hőmérséklet felett a lipidmolekulák mobilisak, különböző mozgásformákkal rendelkezhetnek (I.65. ábra).

A biológiai membránok lipidkomponensei általában egy telített zsírsavoldalláncot, valamint egy vagy több kettős kötéssel rendelkező telítetlen zsírsav-oldalláncot tartalmaznak. A telített zsírsav oldalláncok flexibilisebbek, mint a kettős kötést tartalmazók, ezért az utóbbiakat tartalmazó membránokban a hidrofób molekularészek közötti kölcsönhatás gyengébb, hiszen a cisz kettős kötések eredményezte „törések” (eltérések a lineáris láncalaktól) miatt közöttük nagyobb az átlagos szeparálási távolság (I.66. ábra). Ez a tény azt eredményezi, hogy a telítetlen jelleg növelésével csökken a fázisátmeneti hőmérséklet. Hasonlóan csökken a „gél-folyadék” átmenet hőmérséklete a zsírsavoldalláncok hosszának csökkenésével, ugyanis a rövidebb szénláncok közötti kölcsönhatás gyengébb.



I.64. ábra. Foszfolipidekből kialakult szerkezetek.



I.65. ábra. A sejtmembrán lipidmolekuláinak különböző mozgásformái.

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

A biológiai membránok fiziológiás hőmérsékleten, „folyékony” fázisban vannak, ami a lipidmolekuláknak az I.65. ábrán demonstrált mozgásformáit lehetővé teszi. A kettős réteg két fele közötti ún. flip-flop típusú kicserélődés igen ritka jelenség. Jelentős azonban a lipidmolekuláknak a tengely körüli forgómozgása, sőt a lipidek helyváltoztató mozgása (laterális diffúzió, lásd III/2.2.3.). Ez utóbbi mozgás mértékét a laterális diffúziós állandóval szokás jellemezni, amelynek értéke biológiai membránokban 10^{-8} - 10^{-9} cm²/s nagyságrendű. Minél nagyobb mértékű a lipidek mozgékonyasága, annál kevésbé akadályozott a lipid fázisban való (rotációs vagy síkbeli, translációs) mozgás, annál kisebb a membrán viszkozitása, illetve annál nagyobb a fluiditás (a viszkozitással inverz viszonyban álló fenomenologikus paraméter).

A lipid kettős réteg rendezettségének, fluiditásának vizsgálatára lipidoldékony, fluoreszcenciás sajátosságokkal rendelkező molekulák (fluoreszcenciás lipidpróbák – ezek lehetnek például fluoreszcenciás markerekkel konjugált lipidek) emissziós anizotrópiája ad felvilágosítást (lásd X/1.1.3.). A laterális mobilitás vizsgálatára ugyancsak alkalmaznak fluoreszcenciás lipidpróbákat.

Koleszterin a membránban

Természetesnek tűnik, hogy egy membrán annál kevésbé viszkózus adott hőmérsékleten, minél alacsonyabb a fázisátmeneti hőmérséklete. Ezt a gyakorlat számos esetben igazolta, de az összefüggés mégsem általános érvényű. Kivétel például ebből a szempontból a koleszterin, amelynek hidrofób része egy planáris gyűrűből álló merev szteránvázból, valamint egy rövidebb szénhidrogénláncból áll (lásd ábra). A planáris rész és az egyik oldali lipid-zsírsvadallanc között erős a kölcsönhatás, de a szénhidrogénlánc a rigid planáris struktúra miatt csak a másik oldali lipid hidrofób részével képes kölcsönhatásba lépni. Emiatt a lipidréteg (át)rendeződését a koleszterin lokálisan akadályozza, ily módon gátolja a hőmérséklet csökkenését kísérő folyadék → gél fázisátmenetet. Ugyanakkor a merev planáris részek igen erős kölcsönhatásai és a szomszédos lipidmolekulák poláros fejcsoportjaival kialakított hidrogénhid-kötések miatt a membrán mechanikai szilárdságát növeli, és egyúttal a membrán fluiditását a szteroidgyűrűk „mélységében” csökkenti.



I.66. ábra. Cisz-transz izoméria.

5.1.2. I/5.1.2. Membránfehérjék

A membrán struktúráját a lipidek határozzák meg, a biológiai membránok változatos funkcióit azonban a fehérjekomponensek biztosítják. Számos fehérje vesz részt a transzmembrán-jelátvitelben és a sejtmembránon át lejátszódó transzportfolyamatokban. A membránhoz kötött enzimeknél a reakciók térbeli elválasztása, az egyes lépések sorrendje a fehérjék membránban való elhelyezkedése által meghatározott.

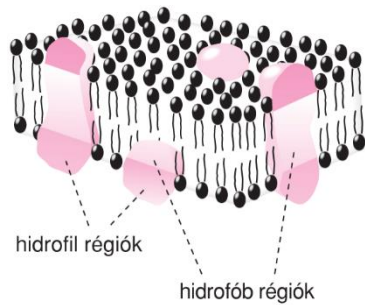
A biológiai membránok fehérjéit az alapján osztályozzuk, hogy milyen kölcsönhatás tartja fenn a membrán és a fehérje közötti kapcsolatot (I.67. ábra, I.68. ábra). Az integrális membránfehérjék kölcsönhatásban vannak a sejtmembrán lipid kettős rétegének hidrofób „magjával”. Azokat az integrális fehérjéket, amelyek átívelik az egész lipid kettős réteget, transzmembrán-fehérjéknek nevezzük. Ezek a fehérjék a membrán mindkét oldalán tartalmaznak hidrofíl régiókat, hidrofób régióit pedig a lipid kettős réteg apoláris részével állnak kapcsolatban. Az integrális fehérjék vízben oldhatatlanok, csak detergenssek segítségével távolíthatók el a sejtmembránból.

A perifériális (vagy „extrinsic”) fehérjék nincsenek közvetlen kapcsolatban a membrán hidrofób régiójával. A membránhoz kapcsolásukat általában integrális fehérjékkel való kölcsönhatásuk biztosítja, vagy a foszfolipidek poláros feji csoportjaival állnak elektrosztatikus kapcsolatban. E fehérjék legtöbbje az ionerősség változtatásával vagy kétértékű kationokat megkötő vegyületek segítségével eltávolítható a sejtmembránból.

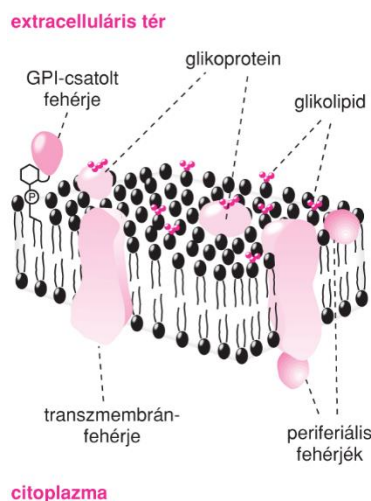
I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

Néhány membránfehérjéhez az extracelluláris oldalon oligoszacharidok kapcsolódnak. Ezeket a molekulákat glikoproteineknek hívjuk. Vannak olyan membránfehérjék is, amelyek kovalensen kötődnek membránlipidekhez. E nemrég felfedezett fehérjecsoportot a fehérjét membránhoz horgonyzó lipid alapján glikozil-foszfatidil-inozitol (GPI) kapcsolt fehérjéknek nevezzük (lásd I.68. ábra).

A citoplazmamembrán fehérjéinek vizsgálatát nagymértékben megnehezíti az a tény, hogy a legtöbb emlőssejtben számos membránféleség létezik. Ebből a szempontból kivételt képez a vörösvérsejt, amelynek egyetlen membránja a citoplazmamembrán. Ez magyarázza, hogy a humán vörösvértest plazmamembránja a legjobban tanulmányozott membránféleség.



A koleszterin szerkezete és elhelyezkedése a plazmamembránban.



I.67. ábra. Transzmembrán, endo- és ektoproteinek.

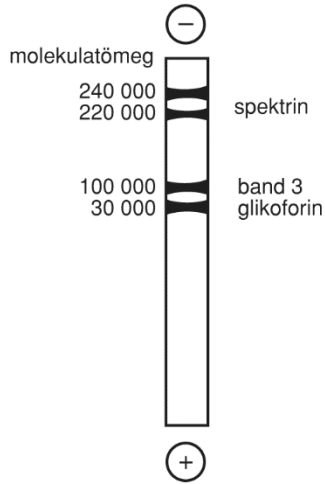
Membránfehérjék izolálása

Az integráns membránfehérjék izolálása megköveteli a membránstruktúra megbontását. Ezt általában detergensekkel szokás végezni, amelyek lehetővé teszik az egyébként poláros oldószerben oldhatatlan membránfehérjék oldatba vitelét. A detergensek szerkezeti vonásai a lipidek hasonló tulajdonságaira emlékeztetnek. Egy poláros „feji” részhez (ami lehet ionos, mint a nátrium-dodecil-szulfát – SDS – vagy csupán poláris, mint a Triton X-100 esetén) hosszabb hidrofób jellegű lánc kapcsolódik. Az amfipatikus sajátságok miatt a detergensek vizes közegben ún. micellákat alkotnak, és a detergensmolekulák poláris részei a gömbszerű képződmények külső felszínén helyezkednek el. A detergens megfelelő koncentráció esetén a membrán szerkezeti egységét megbontják, és a strukturális elemeket fehérje-lipid-detergens komplexekbe, micellákba viszik. Kedvező esetben a szolubilizált fehérjék natív sajátságai legfeljebb reverzibilisen károsodnak, és megfelelő szeparálási, illetve tisztítási manipulációk után mesterséges membránokba beépítve (rekonstruált rendszerek) funkcióik is vizsgálhatók.

Speciális membránfehérjék

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

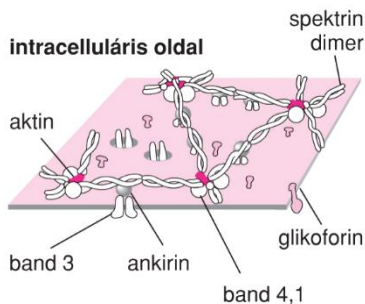
A membránfehérjék nagyságának, molekulatömegének meghatározása poliakrilamid gél-elektroforézises vizsgálatok segítségével történik. Ilyen esetekben detergensként SDS-t alkalmazva a fehérjék móltömeg szerint szétválaszthatók. (A gél-elektroforetogramok általában igen sok komponenst tartalmaznak. A humán vörösvértest legnagyobb mennyiségben előforduló fehérjekomponensei közül az 1. ábrán néhányat móltömeggel és megnevezéssel együtt tüntettünk fel (band = sáv).



I.68. ábra. Integrális és perifériás fehérjék elhelyezkedése a membránban.

A membrán két oldala közötti aszimmetria nemcsak a lipidek, hanem a fehérjék megoszlásában is kifejezésre jut. A spektrin (molekulatömege 220-240 kD) a membránhoz a citoplazma felőli oldalon gyengén kötődő fibrilláris fehérje, amely az ankirin (molekulatömege 210 kD) nevű fehérje közvetítésével a transzportfolyamatokban szereplő band 3-mal kölcsönhatásban áll. A gyenge kölcsönhatásra utal az, hogy a hálószerű spektrinstruktúra (2. ábra) igen kis ionerősségű oldatok hatására leválik a membránról. Az utóbbi időben speciális szöveti sejtekben több spektrinszerű fehérjét mutattak ki. A glikoforin (molekulatömege 30 kD) funkciójáról ma még nagyon kevés információ áll rendelkezésre. A band 3-ról (molekulatömege 100 kD) bebizonyosodott, hogy transzmembrán-fehérje, általában dimer formában található, és a vörösvértest-funkciókhoz szükséges $\text{HCO}_3^-/\text{Cl}^-$ anioncserében van szerepe. Elképzelhető, hogy ez a fehérje például dimer formában olyan csatornát formál a membrán lipid kettős rétegén keresztül, amely lehetővé teszi megfelelő méretű hidrofíli ionok passzív áthaladását.

Az aszimmetria tanulmányozására módot ad az, hogy a vörösvértestek hipotóniás közegben lizálhatók. A citoplazma eltávolítása után átluggatott membránú, citoplazmájuktól megfosztott „kísértetsejtek” (ghostok) maradnak a preparátumban. Megfelelő kezelés eredményeként a ghostsejtekből membránfragmentumok nyerhetők, amelyek ismét lezáródnak. Ez a lezáródás irányítható úgy is, hogy a membrán eredetileg belső rétege képezze a kapott vezikulák külső membránrétegét (kifordított vagy „inside-out” vezikulák).



1. ábra. A vörösvértest membránjában legnagyobb mennyiségben előforduló fehérjekomponensek gél-elektroforetogramja.

Membránfehérjék membránban való lokalizációja

Ezt az ún. vektoriális jelölés segítségével lehet vizsgálni. Fluoreszcenciás vagy radioaktív atomcsoportokat tartalmazó, fehérje funkció csoportokkal kovalens kötést kialakító reagensek segítségével a reagensek számára

elérhető fehérjék megjelölhetők. Ha a membrán a reagensre nézve nem permeábilis, akkor a jelölés után a szolubilizált membránfehérjék vizsgálatával eldönthető, hogy a jelölt fehérjekomponensek közül melyek azok, amelyek a citoplazma vagy az extracelluláris tér felől, illetve mindkét irányból elérhetők. Hasonló lehetőséget kínálnak a proteolitikus enzimek. Ha ilyen enzimek hatásának tesszük ki a sejtmembrán belső, illetve külső oldalát, akkor a szolubilizált minták elektroforézise révén eldönthető, hogy melyik fehérje emészthető a megfelelő (külső, illetve belső) oldalról.

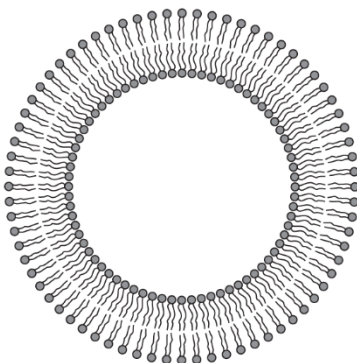
A lipidek és a proteinek szerveződésének egyik nem túl régen ismert formája a lipid-„tutaj” vagy nemzetközi terminológiával lipid-„raft”. Ezek a tutajok detergensekkel szemben rezisztensek (DIG = detergens inszolúbilis glikolipid). Szfingolipidek és koleszterin a fő alkotórészüik. Ezekben glikozil-foszfatidil-inozitol molekulákhoz kihorgonyozott, a membránon át nem érő (ún. GPI-horgonyozott) és a membrán teljes vastagságán átérő integrális membránfehérjék egyaránt találhatóak. Ezek a tutajok bizonyos membránfehérjéket a szintézis helyéről a plazmamembránba eljuttatnak, és ott biztosítják azok laterális szervezetségét, esetenként kompartmentalizációját. A lipidtutajok létezésének a biokémiai bizonyítékokon kívül élő sejtek vizsgálatával szerzett bizonyítékai is vannak. A lipidtutajok szerkezeti integritását a koleszterinkomponens szelektív komplexálásával (és azt követő átrendezésével) (filipin antibiotikum segítségével) vagy a koleszterin membránból való kivonásával (metil- β -ciklodextrin segítségével) lehet mérhető módon megváltoztatni. A lipidtutajok direkt kimutatása és nagyságuk pontos mérése még a biofizika által megoldandó kérdések közé tartozik. A lipidtutajok a polarizált sejtek apikális és bazális membránjaiban található specifikus fehérjéket irányítottan képesek szállítani a szintézis helyéről.

Liposzómák

A biológiai membránok mellett gyakorlati szempontból lényegesek a mesterséges modellmembránok. Ezeket előállíthatják abból a célból, hogy modellezzék velük a biológiai membránokat, vagy azért, hogy segítségükkel egyes molekulákat a megfelelő szövetekhez, sejtekhez juttassanak a szervezetben.

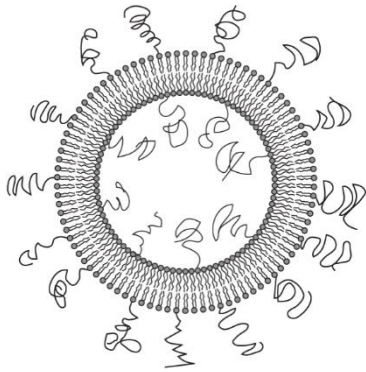
A modellmembránok közül a legfontosabbak a *liposzómák*. Ezek egy vagy több lipid kettős rétegből álló gömböcskék. A felépítésükben részt vevő lipidek tetszés szerint, a felhasználás céljának megfelelően választhatók ki, a döntő szerepet azonban – a biológiai membránokhoz hasonlóan – itt is általában a *foszfolipidek* (foszfatidil-kolinok, foszfatidil-szerinek és a foszfatidil-etanol-aminok) játsszák. Bizonyos esetekben a liposzómák felépítéséhez olyan, mesterségesen előállított lipideket is felhasználnak, amelyeket a biológiai membránokban nem találhatunk meg. Ilyenek azok a pozitív töltéssel rendelkező lipidek, amelyek főleg a génátvitel céljára készített liposzómák alkotórészei. A lipidek megválasztásánál figyelembe kell venni, hogy a liposzóma és a célsejt membránjának összetétele minél nagyobb mértékben legyen hasonló egymáshoz.

A liposzómákat többféle szempont szerint csoportosíthatjuk. A liposzómát alkotó lipid kettős rétegek száma alapján megkülönböztetünk multilamelláris és unilamelláris vezikulákat. A *multilamelláris vezikulákat (MLV)* több lipid kettős réteg alkotja. Ezek száma egy preparátumon belül is nagyon különböző lehet. Ennek az a gyakorlati jelentősége, hogy a liposzómába bezárt hatóanyag kiszabadulási ideje fordított arányban áll a liposzómát alkotó lipidrétegek számával. Így ha a rétegek száma az egyes liposzómák esetében különbözik, elhúzódo hatóanyag felszabadulás érhető el. Az egyetlen kettős rétegből álló *unilamelláris vezikulákat* átmérőjük alapján további két csoportba szokták osztani. A kisméretűek (*small unilamellar vesicle – SUV*) átmérője 100 nm alatti, míg a nagyméretűeké (*large unilamellar vesicle – LUV*) 100 nm feletti (1. ábra).



2. ábra. A vörösvértestmembrán fehérjeinek elhelyezkedése az intracelluláris oldal felől.

Feloszthatjuk a liposzómákat aszerint is, hogy a külső lipidréteghez milyen molekulák kapcsolódnak. Ennek alapján megkülönböztetünk konvencionális (C) liposzómákat, amelyek felszínén semmilyen speciális molekula nem található. Ezeket az immunrendszer idegenként ismeri fel és nagy részüket a makrofágok kebelezik be. A hosszú keringési életidejű (stabilizált, „lopakodó (stealth)” – S) liposzómák felszínén polimerláncok (pl. polietilén-glikol – PEG, glukuronsav, szialsav stb.) találhatók. Ezek mintegy elrejtik a liposzómát az immunsejtek elől. Az ilyen típusú liposzómákat sokkal kisebb mértékben kebelezik be a makrofágok, mint a konvencionálisakat, és így sokkal nagyobb eséllyel jutnak el a szervezet más területeire (2. ábra). Az immunliposzómák felszínéhez specifikus antitesteket kötnek. Ezáltal jó hatásfokkal lépnek kölcsönhatásba azokkal a sejtekkel, amelyek a megfelelő antitestkötő hellyel rendelkeznek. Így a megfelelő antitest kiválasztásával specifikus kapcsolódást érhetünk el az adott típusú kötőhellyel rendelkező célsejthez.



1. ábra. Unilamelláris liposzóma.

A liposzómák orvosi gyakorlatban történő felhasználása azon alapul, hogy ebbe a „burokba” különböző diagnosztikai készítmények (pl. röntgenkontrasztanyagok, radiofarmakonok), gyógyszerek, nukleinsavdarabok, fehérjék stb. zárhatók be. Ezzel a módszerrel lényegesen javítható a bezárt molekula eljuttatásának határfoka a célszervhez, vagy célsejtekhez. Ez azzal az előnyös következménnyel jár, hogy így kevesebb hatóanyag kerül más szövetekbe, szervekbe, ahol nemkívánatos mellékhatásokat tudna kifejteni. Ezért a gyógyszerek közül főleg azok liposzómába zárása célszerű, amelyek egyébként súlyos mellékhatásokat okoznak (pl. antibiotikumok, szteroidok, daganatellenes szerek). Fontos szempont még akár diagnosztikai, akár terápiás céllal történő alkalmazás során a keringési félélet-idő meghosszabbodása. Ezáltal pl. a terápiához szükséges koncentráció hosszabb ideig marad fenn a vérszérumban. A gének átviteléhez olyan liposzómákat használnak, amelyek kationos lipidet tartalmaznak. Az átvitel jobb hatásfokú lesz, mint más módszerekkel, de az eljárás meglehetősen drága.

Bizonyos különleges összetételű és így különleges tulajdonságokkal rendelkező liposzómák is előállíthatók. Ilyenek például a hőérzékeny liposzómák, amelyek egy bizonyos kritikus hőmérséklet elérésekor elvesztik stabilitásukat és a beléjük zárt hatóanyag szabaddá válik. Ez bekövetkezhet spontán módon, pl. a magasabb hőmérsékletű, gyulladt területeken, vagy pedig célzottan helyi hipertermia előidézésével. Az ilyen liposzómák összetevőit úgy célszerű megválasztani, hogy a kritikus hőmérséklet csak néhány fokkal haladja meg a testhőmérsékletet. A pH-érzékeny liposzómákból akkor válik szabaddá a bezárt molekula, ha a környezet pH-ja lecsökken. Ez is jellemző lehet pl. a gyulladással járó területekre. A fényérzékeny liposzómák olyan lipideket tartalmaznak, amelyek fény hatására polimerizálódnak és ezáltal megnő a membrán permeabilitása. A szükséges fényt optikai szál segítségével lehet a szervezet megfelelő helyére juttatni.

A liposzómák gyakorlati jelentősége az elmúlt évtizedben egyre nyilvánvalóbbá vált, alkalmazásuk egyre szélesebb területre terjedt ki. Többféle, liposzómába zárt hatóanyag került gyógyszerként törzskönyvezésre a világ több országában, egy-kettő már hazánkban is. Számos további készítmény klinikai kipróbálás alatt áll. Várható, hogy az elkövetkező években ez a tendencia tovább folytatódik.

5.2. I/5.2. Az örökítőanyag szerveződése a sejtben

A DNS minden tekintetben a legnagyobb molekula a sejtben. Egyúttal a legkisebb számban van jelen. Egy normális emberi sejtben mindössze 46 szál található (46 kromoszóma mindegyike egy-egy szál tartalmaz). A méreteit jól szemlélteti a mellékelt I.3. példa.

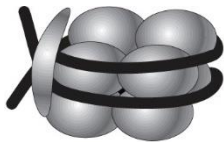
I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

Ezt a nagyméretű molekulát kell a sejtmagba bepakolni, úgy, hogy közben alapvető feladatát ellássa. A sejt két alapvető állapotában más és más követelményeknek kell eleget tenni. A nyugalmi állapotban levő, azaz nem osztódó sejtben egyrészt rendezetten kell elhelyezkedni, másrészt biztosítani kell a sejt működéséhez szükséges információ átírását. A sejt másik fontos állapotában, az osztódás során, egy másik feltételnek kell teljesülnie. Ezt a nagy molekulát olyan tömör, kompakt állapotba kell hozni, hogy a megkettőződött géállomány akadálytalanul és szabályosan kettéosztódjon a két utódsejtbe.

A sejtmag a DNS mellett nagy mennyiségben tartalmaz fehérjéket is, mennyiségük mintegy kétszerese a DNS-ének. Ezek a fehérjék egy jelentős része a bázikus kémhatású hisztonok csoportjába tartozik. Bázikus jellegük magas arginin- és lizin-tartalmuknak köszönhető. Mindkét aminosav bázikus karakterű oldallánccokat tartalmaz, és ez eredményezi a bázikus sajátosságot. Egy másik jellegzetes fehérjetípus, amely előfordul néhány sejtípus magjában, a szintén bázikus tulajdonságú (főleg arginin-tartalmának köszönhetően) és magas ciszteintartalmú protaminok. A bázikus kémhatású fehérjék mellett kb. ugyanannyi egyéb, nem hiszton jellegű fehérjét is találunk. Ezeknek a fehérjéknek fontos szerep jut a sejtmagban a genetikai anyag struktúrájának szerveződésében és működőképességének megőrzésében. A DNS és a fehérje a sejtmagban bonyolult komplexet alkot, amit *kromatinállománynak* nevezünk.

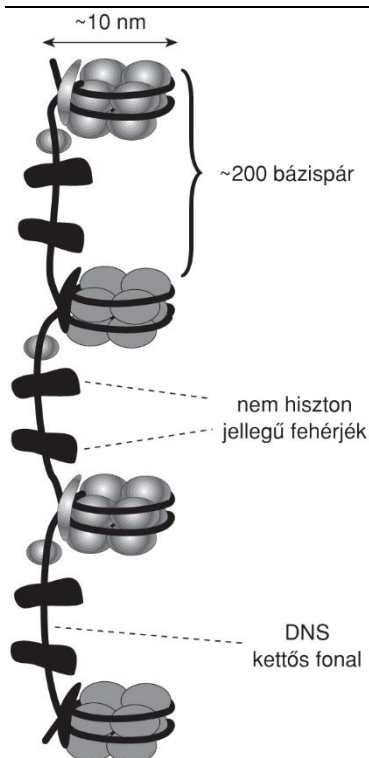
Egy átlagos, nem osztódó sejtben fénymikroszkóppal alig figyelhető meg a DNS jelenléte, mert részben kondenzálatlan állapotban van. Egyes részei szinte teljesen kitekeredett formában található, ez az ún. *eukromatin*, más részek viszonylag kondenzált állapotban vannak, ezek a *heterokromatin*nak nevezett szakaszai a teljes DNS-láncnak. Az előzőek részben a DNS aktív szakaszai, amelyekben mRNS-szintézis folyik. Minden sejt hordozza mindazt a genetikai információt, amellyel az egyed rendelkezik, azonban a már specializálódott sejtekben csak az információ egy részére van szükség. Ezek a szakaszok jelennek meg az eukromatin régióban. Természetesen a sejt működésének egyes állapotaiban sincs szükség minden olyan funkcióra, amely egy adott sejtet jellemez, ezért még ezekben a szakaszokban is szabályozni kell az egyes gének működését.

Elektronmikroszkópos felvételeken a DNS-láncokon kis csomócskák figyelhetők meg, amiket *nukleoszómáknak* neveznek. Az I.69. ábrán látható, hogy a nukleoszómák a DNS egy szakasza és a hisztonok alkotta komplexek. Az ábrán látható nukleoszómát négy pár különböző hisztonból felépülő mag, a körje tekeredő DNS-fonal és egy lezáró ötödik fehérje alkotja. Mivel a hisztonok bázikus jellegű fehérjék, elektrosztatikus kölcsönhatás révén kapcsolódnak a DNS foszfátcsoportjához.



2. ábra „Stealth” liposzóma.

A még teljesebb pakoltság elérése érdekében a nukleoszómák és az azokat összekötő DNS-szakaszok feltekerednek az I.70. ábrán látható módon tömörebb struktúrába. Ez a kb. 10 nm átmérőjű fonál további felcsavarodás útján még tömöttebb állapotot vesz fel és mintegy 30 nm átmérőjű rövidebb szerkezet alakul ki (I.71. ábra). A heterokromatin rész még jobban tömörödött, de ennek felépítése még nem eléggé tisztázott.



I.69. ábra. A nukleoszóma felépítése



I.70. ábra. A kromatin szerkezete nukleoszómákkal.

A kromatinállomány ilyen elrendeződése természetesen gátolja a genetikai információ átírását mRNS-be. Ezért a szintézis első lépéseként a hisztonfehérjéket eltávolítja egy fehérje a DNS-szárról, azon a ponton, ahol a szintézis megindul. Azok a területek pedig, amelyek kondenzáltabbak maradnak, inaktívak, tehát nem vesznek részt az adott sejt működésében. Ez azt is jelenti, hogy a különböző típusú sejtekben, mint az előzőekben már említettük, a DNS különböző részei aktívak, nagyon pontosan szabályozott működésre van szükség.

Ez az elrendeződés azonban nem alkalmas arra, hogy osztódó sejtekben a DNS-állomány szabályozott formában, gyakorlatilag hiba nélkül megkettőződjön és szétválva megjelenjen az utódsejtekben. A mitózis során jelenik meg az a struktúra, amelyet általában kromoszómának neveznek. Ebben az állapotban a kromatinállomány teljesen kompakt formában rendeződik el. Olyan mértékű a kondenzáció, hogy közönséges fénymikroszkópban is jól láthatók megfelelő festési eljárás után. Ilyenkor természetesen egyetlen gén sem képes ellátni feladatát, de erre nincs is szükség. Ez a tömör állapot lehetővé teszi a DNS mozgását és szabályos megoszlását a két sejt között.

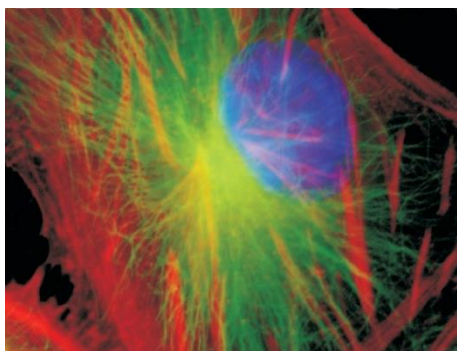
Az alapvetően eltérő struktúra sokkal nagyobb fokú tömörítést jelent. A kromoszóma hossza mintegy 10000-szer rövidebb az előző állapotnál. Ennek az állapotnak a kialakításában is fontos szerepet töltenek be a fehérjék és a fehérjék egymás közötti, ill. a DNS-sel kialakított kölcsönhatásai. Erről a struktúráról jelenleg még kevesebbet tudunk, mint a nem osztódó sejtben jelen levő kromatinról. Egyes spermiumsejtek vizsgálata esetében fontos szerepet tulajdoníthatunk a bázikus fehérjék másik csoportjának, a protaminoknak. Ezek nagyobb mértékben bázikusak, mint a hisztonok, így erősebb kölcsönhatásra képesek a DNS foszfátcsoportjával. Az erősebb kölcsönhatás a komplex nagyobb stabilitását eredményezi, ami a struktúra állandósága szempontjából fontos. Másik jellegzetességük, hogy gazdag ciszteintartalommal (bizonyos esetekben > 20%) rendelkeznek. Ezek az aminosavak alkalmasak a fehérjék közötti, ill. fehérjén belüli diszulfidhidak kialakítására. A sok diszulfidkötés kovalens jellegénél fogva szintén fontos szerepet játszhat a kromoszómaszerkezet kialakításában és szigorú rendjének fenntartásában.

I.3. példa: A DNS mérete. Az emberi genom mintegy 3 milliárd bázispárból épül fel. A teljes hossza kb. 2 m. Ez 23 molekulát jelent (a humán genom 23 pár kromoszómából áll). Tehát egy molekula hossza kb. 10 cm. Ezeket a molekulákat kell bepakolni a sejtmagba, amelynek a mérete mintegy 5-10 mm. A feladat megértéséhez nézzük, mit jelentenek ezek a méretek. Ha a sejtmag egy teniszlabda lenne, akkor egy DNS-fonal hossza mintegy 1 km. Ennek a fonalnak az átmérője csupán néhány mikrométer. Ezt a pókfonalat kellene a teniszlabdába bepakolni úgy hogy közben képes legyen feladatát ellátni, minden probléma nélkül megkettőződni és szétválni az utódsejtekbe az osztódás során.

5.3. I/5.3. A citoszkeleton

Az élő sejt sajátos jellemvonása, hogy a felépítésében részt vevő molekulák jellegzetes szupramolekuláris szerkezetekbe szerveződnek. Ilyen szupramolekuláris asszociátumok például a fehérje alegységekből felépülő citoskeletális rendszer illetve a magmátrix, a fehérjékből és lipidekből kialakuló membránvázrendszer (membránszkeleton) és a DNS-ből és fehérjékből álló kromatin (kromoszóma). A sejt élete és változatos funkciói kivitelezése során mindig kapcsolatba kerül a szupramolekuláris asszociátumokkal. Úgy is fogalmazhatnánk, hogy a sejt létezése elválaszthatatlan ezektől a rendszerektől. A különböző biológiai szupramolekuláris rendszerek sajátos fizikai, fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, továbbá jelenlétük az élő sejt számára meghatározott fizikai, fizikai-kémiai következményekkel jár. Ebben a fejezetben a talán legjobban jellemzett, eukariótasejtekben található citoszkeletonon keresztül mutatjuk be a biológiai szupramolekuláris rendszerekre általánosan jellemző fizikai tulajdonságokat, a bennük zajló fizikai-kémiai folyamatokat, utalva a tankönyv specifikus fejezeteire.

A biológiai szupramolekuláris rendszerek jól jellemezhető **biomolekuláris összetevőkből** állnak. A citoskeletális rendszeren belül megkülönböztetünk vékony filamentumokat, intermedier filamentumokat és mikrotubulusokat. A vékony filamentumok az aktinfehérjéből, az intermedier filamentumok szövetspecifikus fehérjealegységekből és a mikrotubulusok a tubulinfehérjéből épülnek fel. A vékony filamentumok és mikrotubulusok intracelluláris elhelyezkedését az I.72. ábra mutatja.



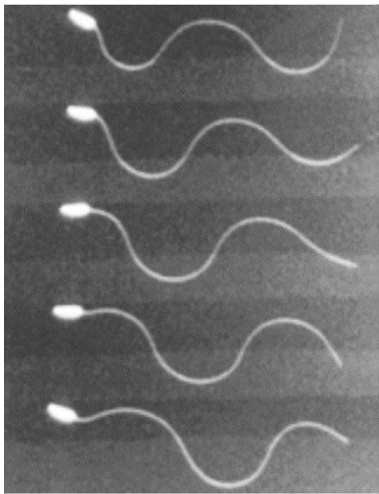
I.71. ábra. A kromatinállomány feltekeredése magasabb rendű szerkezetbe. A korongok a nukleoszómákat szimbolizálják.

A citoskeletális rendszer, és általában a szupramolekuláris biológiai rendszerek, specifikus alkodóelemei **polimer** filamentumokat alakítanak ki. A polimerfilamentumok globuláris fehérje alegységekből állnak. Egy-egy filamentumot sok (poli-) hasonló alegység (méra) épít fel. A citoskeletális filamentumok alegységeit nem kovalens, másodlagos kötőerők tartják össze. Ebben a tulajdonságukban a citoskeletális polimerek különböznek a biológiai alpmolekuláktól (fehérjék, nukleinsavak, poliszacharidok, lipidek), amelyeken belül

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban

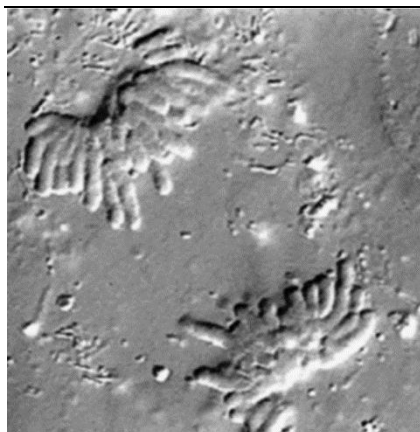
az alegységeket nagy energiájú kovalens kötések kapcsolják össze. A polimer filamentumok kialakulásának folyamata a **polimerizáció**. A polimerizáció során a specifikus fehérjealegységek egymás után fűződnek, ezáltal növelve a filamentum hosszát. A polimerizációval ellentétes irányú folyamat a **depolimerizáció**, mely a filamentum rövidülésével jár. Mivel a fehérjealegységek másodlagos, aránylag alacsony energiájú kötőerőkkel kapcsolódnak egymáshoz, a **citoszkeletális rendszer dinamikus**. Ez azt jelenti, hogy a citoszkeletális rendszer állandó mozgásban, változásban van, a polimerizáció és depolimerizáció folyamatai állandóan zajlanak. Az ellentétes irányú folyamatok aktuális sebességét érzékenyen befolyásolják a környezeti tényezők, például a szabad alegységkoncentráció, asszociált fehérjék jelenléte, és még számos egyéb – köztük néhány ma még nem pontosan – ismert körülmény. Azonos sebességű polimerizáció és depolimerizáció esetén dinamikus egyensúlyi állapotok alakulhatnak ki.

A citoszkeletális rendszer alkotóelemeit, mint fent említettük, **másodlagos kötőerők** kapcsolják össze. A citoszkeletális filamentumokhoz számos fehérje kapcsolódhat. Ezeket általában „**asszociált fehérjéknek**” nevezzük aszerint, hogy mely filamentális rendszerhez kapcsolódnak (pl. aktinasszociált fehérjék). Az asszociált fehérjék ugyancsak másodlagos kötőerőkkel kapcsolódnak, és így dinamikus rendszer részét képezik. Az asszociált fehérjék jelentőségét szinte nem lehet túlbecsülni. Általában elmondható, hogy az asszociált fehérjék határozzák meg a citoszkeletális rendszer, és az egyéb szupramolekuláris rendszerek változatos funkcionalitását azáltal, hogy kötőhelyeket biztosítanak sejtalkotók számára, befolyásolják a filamentumok polimerizációs dinamikáját és mechanikáját (lásd alább), illetve a filamentumok mentén specializálódott feladatokat végeznek el (pl. motorfehérjék, lásd V/1.2.). A citoszkeletális rendszert összetartó másodlagos kötőerők jellegét és nagyságát a kölcsönható molekulák kötőfelszínei, és ezáltal a molekulák szerkezete határozza meg. Mivel a citoszkeletális fehérjék bonyolult szerkezetűek, az asszociációikban részt vevő kölcsönhatások száma, jellege, ereje ritkán ismert pontosan. Számos különböző asszociált fehérje segítségével speciális biológiai struktúrák alakulhatnak ki. Ilyen például a mikrotubulusokból és asszociált fehérjékből álló flagellum, mely különleges mozgási mechanizmussal ruhazza fel a spermaticitát (I.73. ábra), vagy a húzóórsó, mely a duplikálódott kromoszómakészletet választja ketté sejtosztódás során (I.74. ábra).



I.72. ábra. Tenyésztett hámsejtben elhelyezkedő vékony (aktin) filamentumok (vörös), mikrotubulusok (zöld) és a sejtmag (kék) fluoreszcencia mikroszkópos képe. Steve Rogers felvétele (Imaging Technology Group, University of Illinois at Urbana-Champaign).

I. rész – Az „élő” anyag
legfontosabb szerkezeti
tulajdonságai és szerepük a biológiai
funkciókban



I.73. ábra. Flagellumával ostorszerű csapkodómozgást végző spermocita.

Az asszociált fehérjék látványosan befolyásolhatják a citoskeletális rendszer működését, dinamikáját, tulajdonságait. Egyes baktériumok, például *Listeria* vagy *Shigella*, bizonyos asszociált fehérjék segítségével becsaphatják a vékony filamentális rendszert abból a célból, hogy saját intracelluláris mozgásukat elősegítsék (I.75. ábra).

A citoskeletális rendszer **sajátos mechanikai tulajdonságokkal** rendelkezik. A polimerfilamentumok, leegyszerűsítve, rudakként foghatók fel, melyek hajlításához, nyújtásához mechanikai erőre van szükség. Ez a leegyszerűsítés lehetővé teszi, hogy a filamentumokat mint egyszerű fizikai objektumokat jellemezzük. A polimer filamentumok fontos mechanikai paramétere a hajlítási merevség. Minél merevebb egy filamentum, annál nagyobb erőre van szükség egységnyi meghajlításához. A hajlítási merevség függvényében megkülönböztetünk **hajlékony** (ilyen például az egyszálú DNS-molekula), **félmerev** (szemiflexibilis, például aktinfilamentum) és **merev**(például mikrotubulus) filamentumokat. A citoskeletális rendszer képes a polimerizációs dinamikáját is felhasználni erőkifejtésre, azaz egy polimerizálódó filamentum képes maga előtt tolni organellumokat. Valójában az intracelluláris paraziták (lásd I.75. ábra) motilitása is ilyen mechanizmusokra vezethető vissza. A polimerizáció segítségével történő erőkifejtés mechanizmusait később tárgyaljuk (lásd V/1.1.2.).



I.74. ábra. Mitotikus osztódás során anafázisban levő sejt interferencia mikroszkópos felvétele.

A citoskeletális rendszer mint sajátos mechanikai tulajdonságokkal rendelkező rendkívül dinamikus rendszer jelenléte fizikai, fizikai-kémiai következményekkel jár a sejtre nézve. A polimerfilamentumok és hozzájuk kapcsolódott molekulák hatalmas fehérjekoncentrációt jelentenek, amely nagy **lokális viszkozitást** eredményez. Ez behatárolja az intracelluláris transzportfolyamatok lokális sebességét. Ugyanakkor a citoskeletális filamentumok **transzportútvonalakat** biztosítanak a sejt számára. A citoskeletális filamentumok mentén különleges, úgynevezett motorfehérjék közlekednek, intracelluláris organellumokat, transzportvezikulumokat cipelve magukkal. A citoskeletális rendszer egyúttal térbelileg organizált kötőhelyeket biztosít egyéb molekulák számára. Egyre több enzimatis kaszkádrendszerről (pl. glikolitikus enzimek) derül ki, hogy a citoskeletonhoz kapcsolódik. A térben sorba kapcsolt enzimek egyfajta virtuális csatornába terelik a szekvenciálisan sorba kapcsolt biokémiai reakciókat („channeling”).

2. fejezet - II. rész – Sugárzások és kölcsönhatásuk az „élő” anyaggal

1. II/1. A sugárzásokról általában

A különféle sugárzásoknak vannak közös tulajdonságaik. Ebben az általános részben ezeket foglaljuk össze. A legfontosabb közös tulajdonság az, hogy **minden sugárzásban energia terjed**. Az ezzel kapcsolatos mennyiségekkel foglalkozik a radiometria.

1.1. II/1.1. Radiometriai alapok

1.1.1. II/1.1.1. Kisugárzott teljesítmény, felületi teljesítmény, energiaáram-erősség, energiaáram-sűrűség vagy intenzitás

Induljunk ki abból, hogy a sugárzás többnyire valamilyen sugárforrásból, kisugárzó testből ered, majd hosszabb-rövidebb terjedés után eléri a besugárzott testet (II.1. ábra). Ennek megfelelően a terjedő energiát jellemző fizikai mennyiségek nagyon hasonlóak. A különbségek elsősorban abból erednek, hogy mire (melyik „szereplőre”) akarjuk vonatkoztatni őket.

Kezdjük a sort a sugárforrással (II.1a. ábra). A legegyszerűbb **sugárforráspontszerű és izotrop** sugárzó, azaz mérete a tőle mért távolságokhoz képest elhanyagolható és minden irányban egyformán sugároz (II.2a. ábra). Ez utóbbit úgy is kifejezhetjük, hogy a sugárzás a teljes 4π szteradian térszögben, az iránytól függetlenül történik (lásd „*A térszög*” magyarázatát).



sugárforrás sugárzás besugárzott
test

Mindennapi életünkben a „sugárzás” szó meglehetősen tág jelentéstartalommal bír. A napsugárzás, hangsugárzás, rádiósugárzás, radioaktív sugárzás naponta használt fogalmak, de gyakran átvitt értelemben is használjuk, hogy például egy személynek van valamilyen kisugárzása. Azt különösebb előtanulmányok nélkül is megállapíthatjuk, hogy igen sokféle sugárzás létezik, de nagyon sok esetben, még ha az átvitt értelmű jelentésektől el is tekintünk, a sugárzással kapcsolatos legegyszerűbb kérdésekre is nehéz válaszolni: valójában mit is sugároznak a sugárzó testek; miben hasonlítanak, miben különböznek az egyes sugárzások; hogyan keletkeznek; hol fordulnak elő; hogyan szerzünk róluk tudomást; hogyan rendszerezzük őket? És ami orvosi szempontból a legérdekesebb: hogyan hatnak az emberi szervezetre; használhatók-e a diagnosztikus felállításában, illetve a betegségek megelőzésében, gyógyításában?

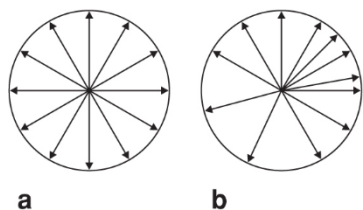
Ilyenkor a sugárforrás „erősségét” úgy jellemezhetjük, hogy egyszerűen megadjuk a kibocsátott összes teljesítményt, az ún. **kisugárzott teljesítményt**:

$$P = \frac{\Delta E}{\Delta t}, \quad (\text{II.1})$$

ami számértékében megegyezik az időegység alatt kisugárzott energiával (mértékegysége $\text{J/s} = \text{W}$). A sugárforrást elhagyó, kiáramló és tovaterjedő energiát áramvonalakkal szemléltethetjük (II.2. ábra). A kilépő áramvonalak száma azt mutatja meg, hogy milyen „erősen” sugároz a sugárforrás.

Amennyiben a sugárforrás pontszerű, de **nem izotrop** sugárzó (II.2b. ábra) (azaz a különböző irányokban az iránytól függően különböző „erősséggel” sugároz), a kisugárzott teljesítményt az (1a) definíció szerint ilyenkor is megadhatjuk, de ez a mennyiség értelemszerűen az iránytól való függést nem tudja visszaadni. Az ilyen

sugárforrás pontosabb jellemzéséhez azt kell megadnunk, hogy **adott irányban** (ez általánosan két szög ismeretét jelenti) **egységnyi térszögben** mekkora a **kisugárzott teljesítmény**.

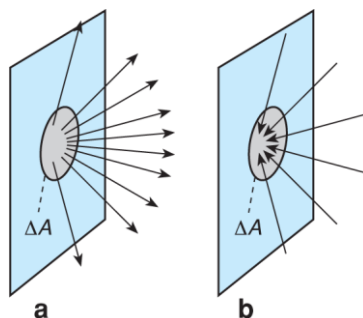


II.1. ábra. A sugárzási folyamatok „szereplői”

A pontszerű sugárforrások után rátérünk a legegyszerűbb **nem pontszerű** sugárforrásra (II.3a. ábra). Egy sík felület ΔA nagyságú felületeleme mindkét féltérben 2π térszögben sugározhat. Mivel a síknak van kitüntetett iránya (amit például a síkra merőleges egységvektor, a normálvektor határoz meg), ezért a sík felület izotrop módon eleve nem képes sugározni. Egyszerű szemlélet alapján is belátható, hogy az ilyen felületelem a normálvektorra merőleges irányban, tehát a síkkal párhuzamosan nem fog sugározni. (Elég, ha csak arra gondolunk, hogy a kisugárzott teljesítmény ΔA „méretével” lehet kapcsolatban, de a felületelem „látszólagos” területe az említett irányból 0.) Amennyiben az irányokat mégsem akarjuk figyelembe venni, akkor a sugárzás jellemzésére a **kisugárzott felületi teljesítményt használjuk**:

$$M = \frac{\Delta P}{\Delta A} \quad (\text{II.2})$$

Ennek a mennyiségnek a számértéke azt adja meg, hogy egységnyi felület által, 2π térszögben mekkora a kisugárzott teljesítmény (mértékegysége W/m^2).



II.2. ábra. A pontszerű izotrop a) és anizotrop b) sugárzó sugárforrásból származó energiaáram szemléltetése két dimenzióban. A valóságban (három dimenzióban) a kisugárzás nem 2π radián (360°) szögben történik, hanem 4π szteradian térszögben. (Magyarázatképpen, ahogy 2π az egységnyi sugarú kör kerülete, úgy 4π az egységnyi sugarú gömb felszíne.) Az ábrán az a) és a b) esetben ugyanannyi áramvonal lép ki a sugárforrásból, ezért azok egyforma „erősen” sugároznak.

A **besugárzott test** (II.1c. ábra) jellemzésére az előzőhöz igen hasonló mennyiséget (II.3b. ábra) a **besugárzott felületi teljesítményt használjuk**:

$$E_{be} = \frac{\Delta P}{\Delta A} \quad (\text{II.3})$$

Ennek számértéke azt adja meg, hogy mekkora az egységnyi felületre eső teljesítmény, ha az **minden irányból**, azaz 2π térszögből érkezik (mértékegysége szintén W/m^2). (Fontos megjegyeznünk azt a sajnálatos tényt, hogy a besugárzott felületi teljesítményre használt, nemzetközileg is elfogadott jelölés (E) azonos az energia szokásos szimbólumával. A keveredések elkerülése érdekében könyvünkben E helyett az E_{be} jelölést használjuk. Ilyen és ehhez hasonló esetekben még a mértékegységeket hívhatjuk segítségül.)

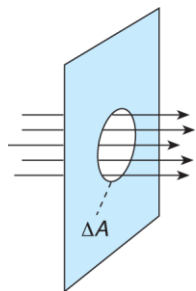
A **sugárzás** (II.1b. ábra), azaz az energiaáram jellemzésére használhatjuk az **energiaáram-erősséget**:

$$I_E = \frac{\Delta E}{\Delta t} \quad (\text{II.4})$$

Ez a definíció látszólag nem különbözik (II.1)-től. A különbség valóban csak annyi, hogy P a sugárforrás jellemző adata, I_E pedig a sugárzásra jellemző mennyiség (lásd II.1a. és II.1b. ábra). Amennyiben a sugárzás nemcsak egy szűk térrészben (például egy vonal mentén) terjed, az ilyen globális jellemzés nem kielégítő. Ezért magát a sugárzást inkább az **energiaáram-sűrűséggel**, más néven a **sugárzás intenzitásával** szokás jellemezni (II.4. ábra):

$$J_E = \frac{\Delta I_E}{\Delta A} \quad (\text{II.5})$$

Ez a mennyiség azt fejezi ki, hogy a **sugárzásra merőleges irányban**, egységnyi felületen egységnyi idő alatt mennyi energia áramlik át (mértékegysége ennek is W/m^2). A szemléltetés szerint, ahol sűrűn vannak az áramvonalak, ott nagy a sugárzás intenzitása.



II.3. ábra. Szemléltetés a kisugárzott a) és a besugárzott b) felületi teljesítmény (M és E_{be}) definíciójához

Látható, hogy a (II.2, II.3, II.4, II.5) definíciók összefüggések valóban nagyon hasonlóak, így megkülönböztetésükre különösen ügyelnünk kell.

A térszög



II.4. ábra. Szemléltetés az energiaáram-sűrűségnek, azaz a sugárzás intenzitásának (J_E) definíciójához

A szteradián a térszög (Ω) „mértékegysége”: ahogyan a radiánt a körből kimetszett ív hosszának és a kör sugarának hányadosa adja meg, úgy a szteradiánt a gömbfelszínből egy kúp által kimetszett felület és a sugárnégyzet hányadosa definiálja.

1.1.2. II/1.1.2. Egyszerű törvények; a szimmetria, a távolságok és a szögek szerepe

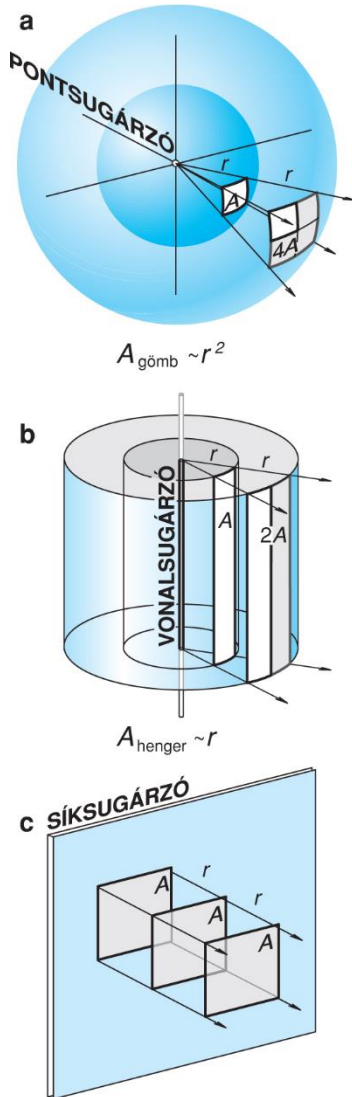
A mindennapi életben is gyakran felmerül az a kérdés, hogy egy sugárforrástól adott távolságra elhelyezkedő felületre mennyi „sugárzás” jut. Ilyen példákra gondolhatunk, hogy van-e elég „fény” az olvasáshoz az íróasztalunknál, milyen távolságba ülünk az otthoni szolárium elé, vagy hogy hova helyezük a hangfalakat a lakásban. A sort folytathatjuk a szőlősgazdák dilemmájával, nevezetesen hogy az új szőlőfajtát, melyik lejtőre telepítsék ahhoz, hogy még elég „napot” kapjon, de az izotóplaboratóriumban dolgozó laboránsnak sem mindegy, hogy munka közben milyen távolságra van az izotóptól.

Az előző részben bevezettük a besugárzott felületi teljesítményt, amivel épp a besugárzott testre jutó „sugárzás mennyiségét” jellemezhetjük. Így amennyiben a sugárforrás pontszerűnek tekinthető és izotrop sugárzó (ilyen nagyjából egy izzólámpa bura nélkül), akkor a kisugárzott összes teljesítmény (P) a forrástól távolodva egyre nagyobb gömbfelületen oszlik szét, ezért

$E_{be} = P/4r^2\pi$, ahol r a gömb sugara. Ha tehát a sugárzás irányára merőlegesen a forrástól r távolságra elhelyezünk egy kis felületet, akkor azon a besugárzott felületi teljesítmény éppen ekkora lesz.
Gömbszimmetrikus esetben tehát

$$E_{be} \sim \frac{1}{r^2}, \quad (\text{II.6})$$

azaz a **besugárzott felületi teljesítmény a távolság négyzetével fordítottan arányos** (II.5a. ábra).



II.5. ábra. A besugárzott felületi teljesítmény ($E_{be} = P/A$) meghatározása a) gömbszimmetrikus, b) hengersizimmetrikus, valamint c) síkszimmetrikus esetben.

Ha a sugárforrás vonalszerű (ilyenek például jó közelítéssel a fénycsövek), akkor a kisugárzott összes teljesítmény (P) a forrástól merőleges irányban távolodva egyre nagyobb hengerfelületen oszlik szét, ezért $E_{be} = P/2r\pi l$, ahol r a henger sugara, l pedig a henger hossza. Így **hengersizimmetrikus esetre**

$$E_{be} \sim \frac{1}{r}, \quad (\text{II.7})$$

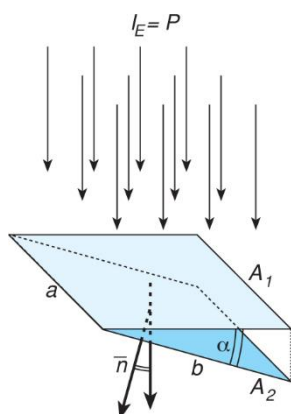
azaz a **besugárzott felületi teljesítmény a távolsággal fordítottan arányos** (II.5b. ábra).

Ha a sugárforrás **nagyméretű sík felület**, akkor attól **merőlegesen távolodva** azt tapasztaljuk, hogy a sugárzás irányára merőlegesen elhelyezett felületen a **besugárzott felületi teljesítmény nem változik** (legalábbis amíg a távolság nem nagyobb, mint a felület lineáris mérete) (II.5c. ábra).

Természetesen az imént vázolt esetekben azt mindig feltesszük, hogy a sugárforrás és a besugárzott test közötti közegben a sugárzás energiája nem „tűnik” el. (Nem alakul át más formába, vagy nem térül el eredeti irányától a közeggel való kölsönhatás miatt.)

Még egy egyszerű törvényt megfogalmazhatunk a besugárzott felületi teljesítményre vonatkozóan, nevezetesen ha a vizsgált felület nem merőleges az adott sugárzás irányára, akkor ezt hogyan vegyük figyelembe E_{be} kiszámításánál (II.6. ábra). Legyen $E_{be,max}$ a merőleges esetre vonatkozó besugárzott felületi teljesítmény. Amennyiben a felület normálvektora (\vec{n}) α szöget zár be a sugárzás irányával akkor:

$$E_{be} = E_{be,max} \cos\alpha. \quad (II.8)$$

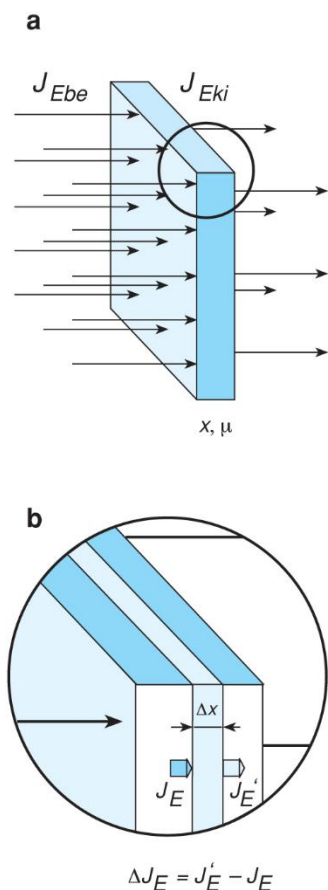


II.6. ábra. A besugárzott felületi teljesítmény meghatározása ferdén beeső sugárzás esetén: $E_{be} = P/A_2$, $E_{be,max} = P/A_1$; $A_2 = ab$, $A_1 = abc\cos\alpha$; $E_{be}/E_{be,max} = A_1/A_2 = \cos\alpha$. $E_{be} = E_{be,max} \cos\alpha$.

1.1.3. II/1.1.3. A sugárzás intenzitásának gyengülése közegen való áthaladáskor

Az előző részben külön kiemeltük, hogy a fenti törvények csak abban az esetben érvényesek, ha mindig feltesszük, hogy a sugárforrás és a besugárzott test közötti közegben energia nem „tűnik” el, azaz nincs energiavesztés. A legtöbb esetben azonban számolnunk kell olyan jelenségekkel, amelyek az adott irányban (például a megfigyelés irányában) terjedő energia mennyiségét befolyásolják. Így természetesen a sugárzástól és a közegtől függően különböző mértékű **energiaelnyelődés** (abszorpció), **visszaverődés** (reflexió) valamint **szóródás** is bekövetkezhet, ezért ennek általános törvényszerűségeit is érdemes megismernünk.

Induljunk ki abból, hogy valamilyen sugárzás intenzitása valamilyen közegen áthaladva csökken, de egyelőre nem törődünk azzal, hogy az energiavesztés a lehetséges kölsönhatások közül melyek idézik elő. Az egyszerűség kedvéért válasszunk egy x vastagságú párhuzamos síkokkal határolt réteget, és a sugárzás erre merőlegesen érkezzon (II.7a. ábra).



II.7. ábra. A sugárzás intenzitásának gyengülése. (Az áramvonalak számának változását J_E illetve J_E' esetében a kék árnyalat változásával érzékeltetjük.)

Legyen $J_{E_{be}}$ a rétegbe belépő, $J_{E_{ki}}$ pedig az onnan kilépő intenzitás. Ésszerű feltételezésnek tűnik, hogy **a kilépő intenzitás biztosan függ attól, hogy mennyi és milyen anyagon halad keresztül a sugárzás, továbbá attól is, hogy mekkora a belépő intenzitás.** Az anyag mennyiségét itt a réteg vastagságával (x) tudjuk jellemezni, az anyag minőségének jellemzésére pedig használjuk az egyelőre nem sokat mondó ún. gyengítési együtthatót, μ -t. A kérdés az, hogy adott anyagi minőségű (μ -jú) réteg esetén **hogyan függ a kilépő intenzitás ($J_{E_{ki}}$) a réteg vastagságától (x -től) és a belépő intenzitástól ($J_{E_{be}}$ -től).**

A kérdés megválaszolásához a $J_{E_{ki}}(x, J_{E_{be}})$ ismeretlen függvényt kellene meghatároznunk (ebben paraméterként természetesen μ is szerepel). Ennek érdekében képzeletben hatoljunk az anyag belsejébe, és nézzük meg azt, hogy a sugárzás nagyon kis Δx előrehaladása esetén mennyit változik az intenzitás, ΔJ_E (II.7b. ábra). Élünk a legegyszerűbb feltételezéssel, nevezetesen azzal, hogy ezen a **kis távolságon** bizonyára **az arányosság érvényes**, azaz:

$$\Delta J_E \sim \Delta x, \quad \text{és} \quad \Delta J_E \sim J_E, \quad (\text{II.9})$$

ahol J_E most a Δx előrehaladást megelőző intenzitást jelöli. A μ gyengítési együttható felhasználásával felírhatjuk a következő egyenlőséget:

$$\Delta J_E = -\mu \Delta x J_E, \quad (\text{II.10})$$

ahol a negatív előjel az intenzitás csökkenését fejezi ki.

A (II.10) összefüggés egy olyan egyenlet (lásd „A gyengülési törvény származtatása”), aminek megoldása a keresett $J_{E_{ki}}(x, J_{E_{be}})$ függvényt adja meg, amennyiben felhasználjuk azt a nyilvánvaló feltételt, hogy $x = 0$ esetén az intenzitás nem változik, tehát $J_{E_{ki}} = J_{E_{be}}$.

A fentiek ismeretében most már felírhatjuk a sugárzás intenzitásának gyengülését a rétegvastagság függvényében (gyengülési törvény):

$$J_{Eki} = J_{Ebe} e^{-\mu x} \quad (\text{II.11})$$

A gyengülési törvény származtatása

$$\Delta J_E = -\mu \Delta x J_E$$

Ilyen típusú, ezzel matematikailag ekvivalens egyenlettel már találkozhattunk az I/3.1.2. részben, nevezetesen ahol egy mennyiség és annak megváltozása arányosak egymással. Általánosán:

$$\frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = -\text{konst.} \cdot f(x)$$

Mivel ez a fajta egyenlet még sokszor előfordul tankönyvünkben, itt megmutatjuk a megoldáshoz vezető utat is.

A megoldáshoz gondolatban osszuk fel az eredeti x vastagságú réteget Δx vastagságú „alrétegekre” és alkalmazzuk a (1) összefüggést (1. ábra). Legyen J_{Ebe} ? J_{E0} az első „alrétegbe” belépő és J_{E1} az onnan kilépő intenzitás. Ez az intenzitás lép be a második rétegbe és J_{E2} lépjen ki ugyanonnan stb. Így az első „alrétegre”:

$$J_{E1} - J_{E0} = -\mu \Delta x J_{E0}, \text{ tehát}$$

$$J_{E1} = J_{E0} - \mu \Delta x J_{E0} = J_{E0}(1 - \mu \Delta x);$$

a

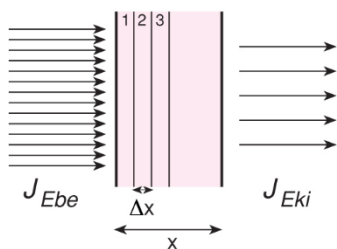
másodikra,

harmadikra:

$$J_{E2} = J_{E1}(1 - \mu \Delta x), \quad \text{és} \quad J_{E3} = J_{E2}(1 - \mu \Delta x).$$

J_{E2} , és J_{E1} visszahelyettesítése után: $J_{E3} = J_{E0}(1 - \mu \Delta x)^3$.

A sort folytatva... az utolsó, mondjuk k -edik réteg után: $J_{Eki} = J_{Ebe}(1 - \mu \Delta x)^k$.



1. ábra. A sugárzás intenzitásának gyengülése (egyszerűsített változat, az „alrétegek” feltüntetésével).

A $\mu \Delta x$ szorzat azt adja meg, hogy a sugárzás intenzitásának hányad része „tűnik el” egy „alrétegen” való áthaladás után. Jelöljük ezt a mennyiséget (a csökkenés mértékét) a továbbiakban $1/n$ -nel ($\mu \Delta x = 1/n$). Az „alrétegek” számát, k -t az $x/\Delta x$ hányados adja meg ($k = x/\Delta x$), amit szintén kifejezhetünk n -nel, így: $k = n\mu x$.

Írjuk vissza ezeket az újonnan kifejezett mennyiségeket ($\mu \Delta x$; k) a (2) összefüggésbe, akkor kis átalakítás után kapjuk:

$$J_{Eki} = J_{Ebe} \left(1 - \frac{1}{n}\right)^{n\mu x} = J_{Ebe} \left[\left(1 - \frac{1}{n}\right)^n\right]^{\mu x}.$$

Adott n esetén a szögletes zárójelben lévő kifejezés ($[1 - (1/n)]^n$) = a_n , ami nem függ sem μ -től, sem x -től, sem J_{Ebe} -től) mindig egy adott a_n számmal egyenlő, például: $n = 2$ esetén $a_2 = (1/2)^2 = 0,25$, $n = 3$ esetén $a_3 = (2/3)^3 \approx 0,296$, stb.

Ezek szerint: $J_{Eki} = J_{Ebe} (a_n)^{\mu x}$.

Emlékezzünk vissza, hogy a kiindulási összefüggés felírásánál feltettük, hogy Δx kicsi, ami azzal egyenértékű, hogy n nagy. Vizsgáljuk meg ezért, hogy hogyan változik a_n értéke egyre növekvő n -ek esetén.

Az előbbi sort folytatva, ha

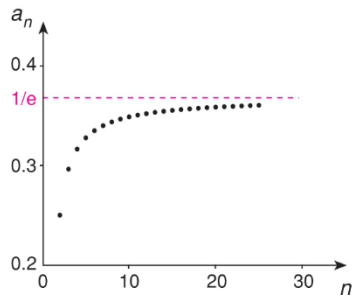
$$n = 100 \quad a_{100} \approx 0,366$$

$$n = 1000 \quad a_{1000} \approx 0,3677$$

$$n = \infty \quad a_{\infty} \approx 0,367879$$

A 2. ábra alapján az is látszik (ezt be is lehet bizonyítani), hogy a_n egy jól meghatározott számhoz közelít, amit praktikus okokból $a_{\infty} = 1/e$ -vel jelölünk (szaggatott vonal az ábrán).

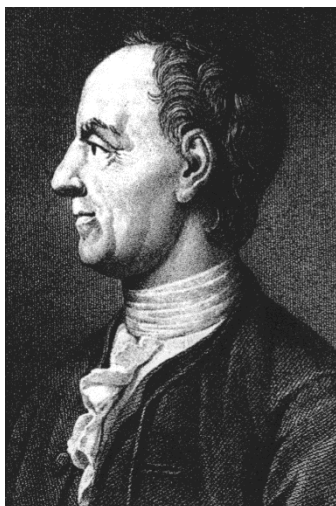
Így jutunk végül a $J_{Eki} = J_{Ebe} e^{-\mu x}$ összefüggéshez



2. ábra. a_n változása növekvő n -ek esetén.

Ez a törvény a tapasztalattal jó összhangban megadja, hogy **a sugárzás intenzitása** a rétegen áthaladva **a belépő intenzitással arányosan változik**, **a réteg vastagságával pedig exponenciálisan csökken** (II.8. ábra). **A törvény érvényessége a sugárzás és az anyag kölcsönhatásán múlik, de elmondhatjuk, hogy az esetek többségében nagyon jó közelítést ad.** A kivételeket a későbbiek során mindig megemlítjük.

A (II.11) összefüggés egy olyan exponenciális függvény, amelynek alapja (Leonhard Euler neve után) az ún. Euler-féle szám ($e \approx 2,7182\dots$, irracionális szám). Ez egyben a természetes logaritmus (logaritmus naturalis, \ln) alapszáma is. Az összefüggésből az anyagi minőségre jellemző gyengítési együttható (μ) pontos jelentése is kiderül. A kitevő ugyanis csak puszta szám lehet (mértékegysége nincs), ezért, ha x távolság dimenziójú (SI mértékegysége: m), akkor μ nem lehet más, mint $1/\text{távolság}$ dimenziójú (SI mértékegysége: $1/\text{m}$). Továbbá, ha $x = 1/\mu$, akkor a kitevő éppen -1 -gyel egyenlő, amiből az következik, hogy ilyenkor $J_{Eki} = J_{Ebe}/e$. Ezek szerint a **gyengítési együttható annak a rétegvastagságnak a reciprok értékével egyenlő, amely az intenzitást e-ed részére csökkenti.**



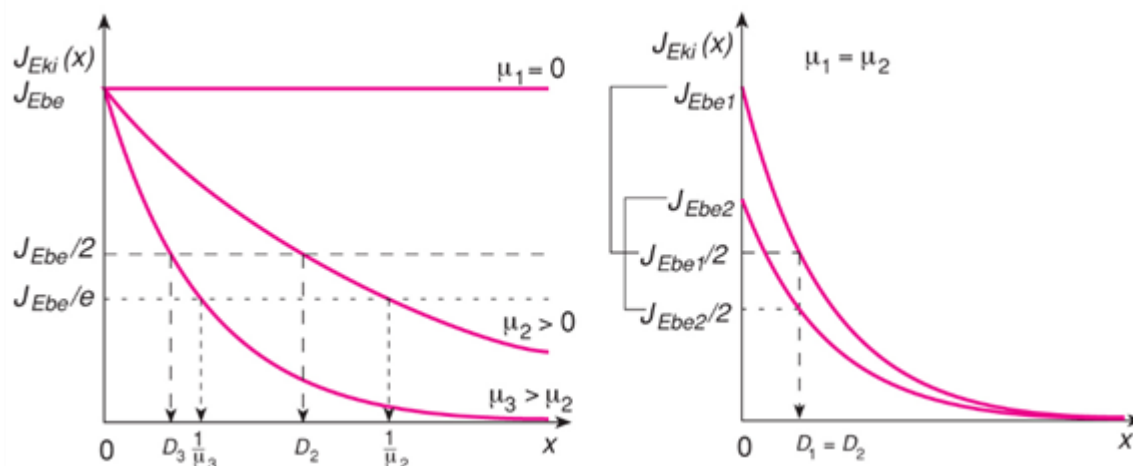
Leonhard Euler (1707-1783) svájci matematikus és fizikus

Mivel a különböző alapú exponenciális függvények egymásba átalakíthatók ezért a (II.11) összefüggés a következőképpen is felírható (lásd II.8. ábra):

$$J_{Eki} = J_{Ebe} 2^{-x/D}. \quad (\text{II.12})$$

Itt az exponenciális függvény alapja 2 és a gyengítési együttható (μ) helyett egy másik együttható (D) szerepel benne. Ennek jelentése az előbbieket mintájára most már egyszerűen megadható: D távolság dimenziójú, mert x/D csak így lehet dimenzió nélküli, továbbá, ha $x = D$, akkor a kitevő ismét -1 -gyel egyenlő, ami azt jelenti, hogy $J_{Eki} = J_{Ebe}/2$. Emiatt **D -t felező rétegvastagságnak nevezik, ugyanis ilyen vastagságú réteg alkalmazása esetén az intenzitás épp a felére csökken.** A μ és D közötti kapcsolatot például a (II.11) összefüggésből, D definíciója –alapján kaphatjuk meg (lásd a II.8. ábra szövegét):

$$\mu = \frac{\ln 2}{D}. \quad (\text{II.13})$$



II.8. ábra. A sugárzás intenzitásának változása különböző esetekben. Az e-edelő ($1/\mu$) és a felező (D) rétegvastagság szemléltetése. Ha $J_{Eki} = J_{Ebe}/2$, akkor a (II.11) összefüggés szerint: $J_{Ebe}/2 = J_{Ebe} e^{-\mu D}$; $\ln(1/2) = \ln e^{-\mu D}$; $-\ln 2 = -\mu D$; $(\ln 2)/D = \mu$

1.2. II/1.2. A sugárzások osztályozása

Céljainknak leginkább megfelelően a sugárzások csoportosításánál alapként a sugárzások fizikai természetét tekintettük, de emellett figyelembe vettük az orvosi szempontokat is. Így megkülönböztetünk elektromágneses sugárzásokat (ilyen például a fény és a gammasugárzás), mechanikai sugárzásokat (ilyen például a hangszugárzás

és természetesen az ultrahang is) és részecskesugárzásokat (ilyen például az alfa-, vagy a béta-sugárzás). Az orvosi szempontokat figyelembe véve az elektromágneses sugárzásokat ketté kellett osztanunk (elektromágneses sugárzások 1, 2). Az új csoportosítás szerint először a **nem ionizáló sugárzásokat** (elektromágneses sugárzások 1.: fény; mechanikai sugárzások: hang, ultrahang), majd az **ionizáló sugárzásokat** (elektromágneses sugárzások 2.: röntgensugárzás, gamma-sugárzás; részecskesugárzások: alfa-sugárzás, béta-sugárzás) fogjuk sorra venni.

2. II/2. Nem ionizáló sugárzások

2.1. II/2.1. A fény

II.1. idézet

Világos lesz a világ,

amikor fölkelysz az egek horizontján,

s izzol egész napon át, tűz-fényű korong.

Tovaűzöd az éjt, sugarad mindenfele árad.

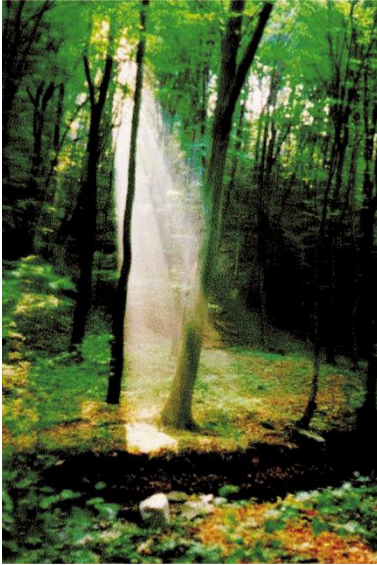
(Ehnaton fáraó Naphimnusz, fordította Molnár Imre)

Nyomós érv szól amellett, hogy az élőlények szempontjából a fény a legfontosabb sugárzás: az élet örök körforgásában ugyanis egymást követik a felépítő és lebontó folyamatok, amelyek elsődleges energiaforrása a napfény. Ez a sugárzás az emberi élet szempontjából is igen fontos. Elegendő, ha megemlítjük, hogy a környezetünkben származó információ jelentős részét vizuális úton, tehát fény közvetítésével nyerjük. A fény kiemelt jelentőségét már őseink is ismerték (lásd II.1. idézet).

Korábbi tanulmányainkból tudjuk, hogy a fény **látható elektromágneses sugárzás**. Ez a meghatározás kellően precíz, de önmagában elég keveset mond. A problémák sokasága ott kezdődik, hogy a fény egyrészt valami objektív dolog, tehát tőlünk, emberektől függetlenül létezik, másrészt viszont szubjektív olyan értelemben, hogy mi szemünk érzékelése révén szerzünk róla tudomást: a színtévesztők, gyengénlátók számára egészen más jelent, mint a tökéletes szeműeknek. Ebben a részben elsősorban az objektív megközelítéssel foglalkozunk, a szubjektív elemeket „Az érzékszervek biofizikája” című IV. fejezetben fogjuk tárgyalni. Az optika orvosi alkalmazásaira pedig egyrészt a „Mikroszkópos módszerek” (VI/2.), másrészt az „Endoszkópia” című (VIII/2.1.) részben térünk vissza. A felvetődő további problémák elkerülése végett tárgyalásunkat úgy kezdjük, hogy nem vizsgáljuk a fény mibenlétét, csak a vele kapcsolatos legegyszerűbb jelenségeket tanulmányozzuk. A durvább közelítések fokozatos finomításával végül visszajutunk az elektromágneses fényelméletig (azaz a látható elektromágneses sugárzásig), amit aztán kibővítünk a fény kvantum viselkedésével is.

2.1.1. II/2.1.1. A Fermat-elv mint a geometriai optika összegzése

Párás időben, sötét erdőbe betűző napfény láttán (II.9. ábra) azt a következtetést vonhatjuk le, hogy **a fény homogén közegben egyenes vonalban terjed**. Egy párhuzamos fénynyaláb átmérőjét csökkentve eljuthatunk a geometriai egyenessel ábrázolható fénysugárhoz. **Fénysugárnak** tehát az igen vékony párhuzamos fénynyalábot nevezzük.

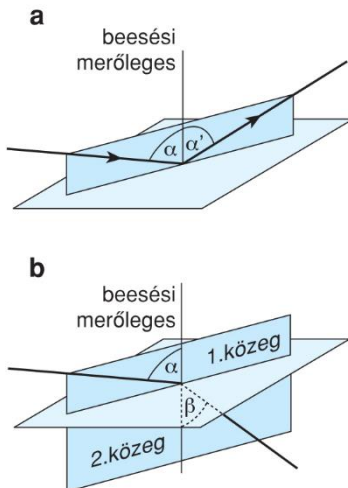


II.9. ábra. A fénynyaláb, bizonyíték az egyenes vonalú terjedésre

A fény sugarat modell használva az optikai jelenségek széles körének magyarázata egyszerű geometriai problémák megoldásaként adható meg. A geometriai optika az egyenes vonalú terjedés mellett választ ad arra a kérdésre, hogy két közeg határán hogyan verődik vissza és hogyan tör meg a fény.

A **fényvisszaverődés törvényét** (II.10a. ábra) Euklidész a híres görög matematikus már i. e. 300 körül megállapította.

- a) A beeső fény sugar, a beesési merőleges és a visszavert fény sugar egy síkban van.
- b) A visszaverődési szög (α') egyenlő a beesési szöggel (α).



II.10. ábra. A fényvisszaverődés a) és a fénytörés b) törvényének szemléltetése

A **fénytörés törvényének** (II.10b. ábra) kvantitatív megfogalmazása Willebrord van Roijen Snellius (1591–1626) holland csillagász és matematikus, valamint René Descartes (1596–1650) francia filozófus, matematikus és természettudós nevéhez fűződik.

- a) A beeső fény sugar, a beesési merőleges és a megtört fény sugar egy síkban van.
- b) A beesési szög (α) szinuszának és a törési szög (β) szinuszának aránya a közegekben mért terjedési sebességek (c_1, c_2) arányával egyenlő, ami megegyezik a két közeg relatív törésmutatójával (n_{21}) (lásd még II.0. megjegyzés):

$$\frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{c_1}{c_2} = n_{21} \quad (\text{II.14})$$

Snellius és Descartes kortársa, Pierre Fermat (1601-1665) francia matematikus és fizikus ezeket a törvényeket egyetlen közös elvre vezette vissza. A „**legrövidebb idő elve**” vagy **Fermat-elv** (1662) alap gondolata a következő: két pont között a geometriailag lehetséges (szomszédos) utak közül **a fény a valóságban azt a pályát követi, amelynek megtételéhez a legrövidebb időre van szüksége**. Ebből például a homogén közegben való egyenes vonalú terjedés (és a fényút megfordíthatóságának elve is) magától értetődően következik. Fermat elve azért tetszetős, mert a természet egyszerűségén kívül nem támaszkodik semmiféle mélyebb metafizikai megalapozásra, mégis a geometriai optika minden törvényszerűsége levezethető belőle (lásd „A fényvisszaverődés és a fénytörés törvényének származtatása a Fermat-elvből”).

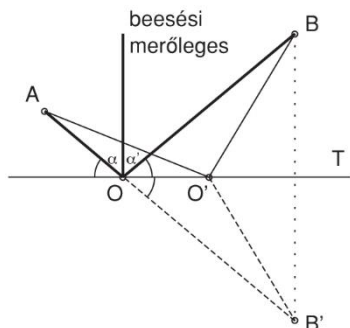
Míg a fényvisszaverődésre vonatkozó „legrövidebb út elvét” már Héron (i. e. 1.sz.) görög (alexandriai) matematikus és fizikus is ismerte, addig a „legrövidebb idő elve” és annak a fénytörésre való alkalmazása Fermat eredeti gondolata (lásd II.2. idézet).

II.0. megjegyzés

Teljes visszaverődés akkor történik, ha a fénysugár az optikailag sűrűbb közegből a határszögnél (α_n) nagyobb beesési szögben érkezik a felületre ($\alpha > \alpha_n$).

A fényvisszaverődés és a fénytörés törvényének származtatása a Fermat-elvből

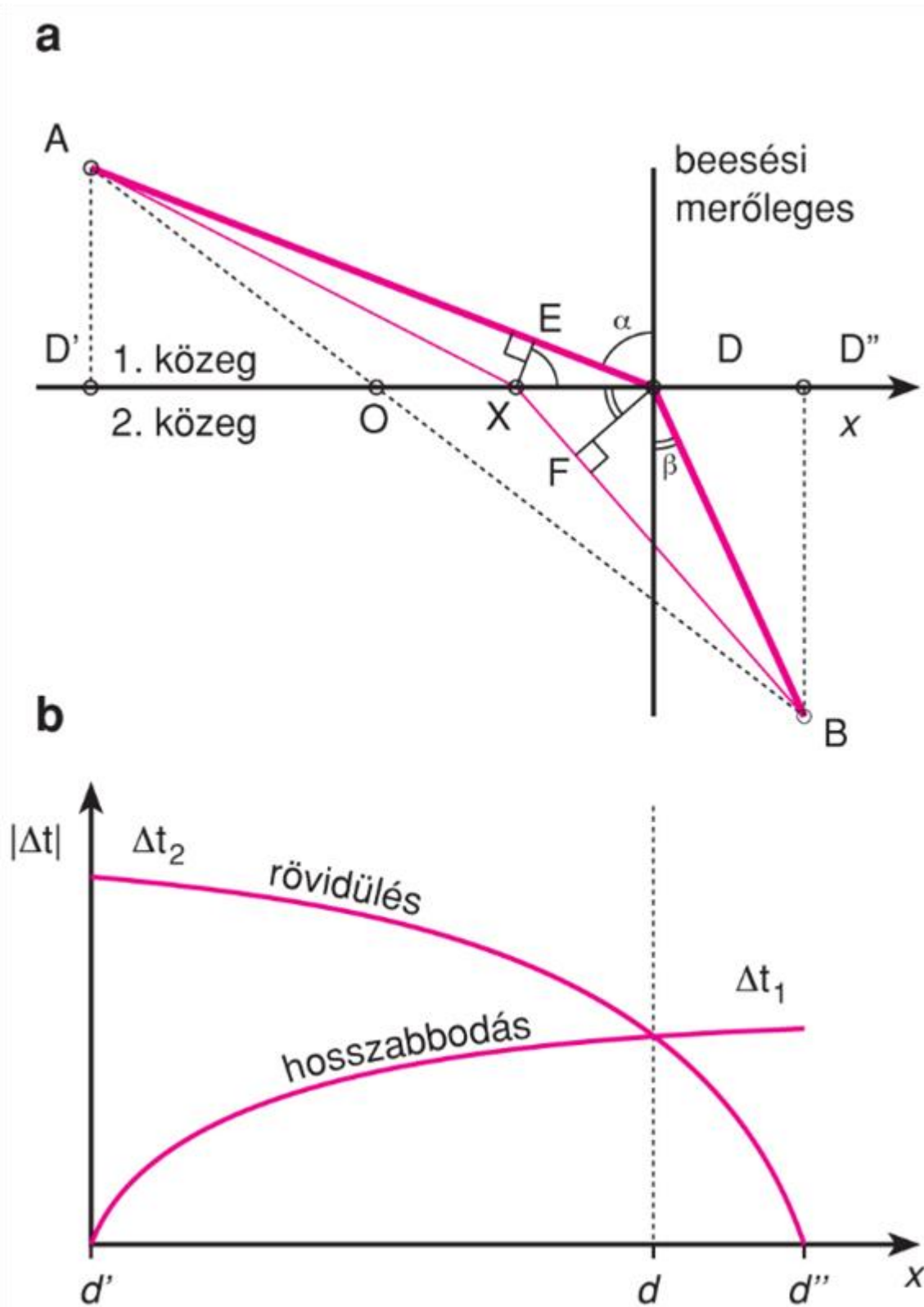
Példaként tekintsük az említett két törvényt. Mivel fényvisszaverődésnél a fény mindvégig ugyanabban a közegben halad, a terjedési sebesség (c) állandó, ezért a „legrövidebb idő (t) elve” a „legrövidebb út ($s = ct$) elvével” helyettesíthető. Az 1. ábra két lehetséges utat mutat be, ami A pontból B-be vezet a T egyenes egy-egy pontján (O-n valamint O'-n) keresztül. A B pontnak T egyenesre vonatkozó tükörképe B' pont. Az AB' egyenes metszi ki T-ből az O pontot. Minden más T-n elhelyezkedő O'-re a háromszög egyenlőtlenség: $AO' + O'B' > AB' = AO + OB'$. A tükrözés miatt $AO' + O'B > AO + OB$ is teljesül. Mivel a három egyíves szög egyenlő egymással (csúcsszögek, tükrözés) ezért $\alpha = \alpha'$.



1. ábra. A fényvisszaverődés törvénye a Fermat-elv alapján

A „legrövidebb út elve” szerint a fény a legrövidebb AOB úton halad és minden más AO'B út ennél hosszabb. Ebből viszont a fényvisszaverődésre vonatkozó törvény már következik (lásd 1. ábra). (Az eredeti megfogalmazásban azért tettük zárójelbe a „szomszédos” kifejezést, mert AOB csak a szomszédos utak közül a legrövidebb. Nyilvánvaló, hogy A-ból B-be egyébként a közvetlen egyenes út a legrövidebb.)

A fénytörés esetét a Fermat-elv tükrében a 2. ábra szemlélteti. Itt is A pontból kell B-be jutni, de most az 1. közegben (például levegőben) nagyobb a fény terjedési sebessége (c_1), mint a 2. közegben (például vízben, vagy üvegben) (c_2). Azt fogjuk megmutatni, hogy a fény a legrövidebb, egyenes út ($AB = AOB$) helyett most egy olyan ADB pályát követ, amelynek megtételéhez a legrövidebb idő szükséges.



2. ábra. A fénytörés törvénye a Fermat-elv tükrében

Legyen D az x tengely (a közegeket elválasztó határ) egy tetszőleges pontja, D' és D'' pontok pedig rendre A és B x -re eső merőleges vetületei. Jelöljük a D , D' és D'' pontok vízszintes koordinátáját rendre d , d' és d'' -vel. Legyen X a D -től kis Δx távolságra D' felé eső pont az x tengelyen. Ha az X pont elegendően közel van D -hez, akkor az AXE és a BFD háromszögek olyan „elfajult háromszögekhez” közelítenek, amelyeknek két 90° -os és egy 0° -os szögük van. Ilyenkor $AX = AE$ és $BF = BD$, továbbá az egyíves szögek egymással és a kitéves

szögek is egymással egyenlők (merőleges szárú szögek, az ábrán a derékszögeket kis négyzettel jelöltük). Ha $XD = \Delta x$ az XDE valamint az XDF derékszögű háromszögekből: $ED = \Delta x \sin \alpha$, továbbá $XF = \Delta x \sin \beta$.

A D pont valódi (a feltételt kielégítő) helyének megkereséséhez válasszunk két szomszédos utat (ADB-t, valamint AXB-t) és hasonlítsuk őket össze. A 2a. ábráról leolvasható, hogy az AD út ED-vel hosszabb, mint AX (az 1. közegben), de a DB út viszont XF-fel rövidebb, mint XB (a 2. közegben). Ez az állítás addig igaz, amíg Δx elég kicsi és amíg D a D' és D'' pontok között helyezkedik el. Haladjunk végig a közeli XD pontpárral az x tengely mentén D'-től D''-ig és kövessük nyomon, hogy a hosszabbodás (ED) és a rövidülés (XF) milyen mértékben változik, de ne az utakat, hanem a hozzájuk tartozó $\Delta t_1 = ED/c_1$ és $\Delta t_2 = XF/c_2$ időket hasonlítsuk össze. Ezt szemlélteti a 2b. ábra, melyen az látható, hogy egy darabig a rövidülés felülmúlja a hosszabbodást, de egy adott helyen ez a tendencia megfordul. Ahol ez a fordulat bekövetkezik, tehát ahol $\Delta t_1 = \Delta t_2$, ott van a D pont valódi helye. Az ED, XF távolságokat Δx -szel kifejezve (lásd 2a. ábra):

$$\Delta x(\sin \alpha)/c_1 = \Delta x(\sin \beta)/c_2, \text{ azaz}$$

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{c_1}{c_2},$$

tehát visszakaptuk a (II.14) összefüggésben szereplő Snellius–Descartes-törvényt.

2.1.2. II/2.1.2. Optikai leképezés, a Fermat-elv alkalmazása görbült felületekre

II.2. idézet

Munkám jutalma a legkülönlegesebb, a legváratlanabb és a legboldogítóbb volt, ami csak lehetett. ...azt találtam, hogy a törésre vonatkozó elvem pontosan azt az arányt szolgáltatta, mint amelyet Descartes úr is megállapított. ...jóllehet az én bizonyításom azt tételezi fel, hogy a fény sűrűbb közegben nehezebben halad, mint ritkábban, amit én egyedül igaznak és nélkülözhetetlennek tartok, de amiről Descartes úr az ellenkezőjét állítja.

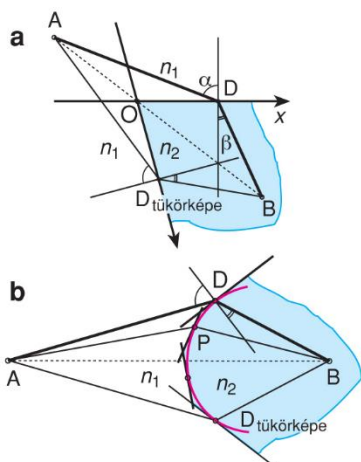
Oeuvres de Fermat (Simonyi Károly fordítása)

Optikai leképezésről akkor beszélünk, ha elég sok egy pontból kiinduló fénysugár újra egyesül egy másik pontban. Láthattuk az előző bekeretezett részben (2b. ábra), hogy ha a két közeg síkfelülettel határolt, akkor egy adott A pontból csak egyetlen legrövidebb idejű út vezet B-be. Joggal merül fel a kérdés: milyen felület esetén érhető el az, hogy több út is megfeleljen a legrövidebb időnek? A 2b. ábra felhasználásával egyszerűen alkothatunk egy másik legrövidebb idejű utat. Tükrözzük ugyanis a D pontot (és vele együtt a többi objektumot) az AB egyenesre, és máris kaptunk egy alternatív A-ból B-be vezető legrövidebb idejű utat (lásd II.11a. ábra).

A továbblépéshez bevezetjük az **optikai úthossz** fogalmát (s_0), ami azt adja meg, hogyha a fény n törésmutatójú közegben s utat tesz meg, akkor ugyanennyi idő alatt vákuumban mekkora utat tett volna meg (lásd II.1. megjegyzés). A II.1. megjegyzésből következik, hogy

$$ns = s_0 \quad (\text{II.15})$$

Így minden közeget a vákuumhoz viszonyíthatunk. A Fermat-elv megfogalmazása ennek segítségével úgy módosul, hogy a fény a minimális optikai úthosszakat követi. Élve ezzel az egyszerűsítéssel, a továbbiakban az idők helyett az optikai úthosszakat fogjuk összehasonlítani.



II.11. ábra. a) A D pont tükrözésével ($D_{\text{tükörképe}}$) egy újabb legrövidebb idejű utat nyertünk. b) Egy jól meghatározott elég bonyolult görbén (piros vonal) helyezkednek el azok a P pontok, amelyeken keresztül az A -ból B -be vezető út ugyanannyi ideig tart, mint ADB mentén. n_1 (a fehér területen) és n_2 (a kék területen) jelöli a két közeg törésmutatóját

Visszatérve az eredeti problémánkhoz, úgy kell megváltoztatnunk a fényutakat, hogy a felület bármely P pontjára nézve az $n_1AP + n_2PB$ optikai úthossz ugyanakkora legyen (minimális). Ebből a feltételtől meghatározható a felületet leíró elég bonyolult görbe (II.11b. ábra bíborvörös vonal). Így elvileg elérhető az, hogy minden A pontból jövő és a felület bármely P pontjára eső fénysugár a B pontba érkezzék.

Egy ilyen felületet nem könnyű elkészíteni. Ezért az ideális, bonyolult felület helyett egyszerű **gömbfelületet** alkalmazunk, amely viszont **csak az AB tengely közelében megfelelő görbületű** (a gömb sugarát r -rel jelöljük). Emiatt csak a tengelyhez elég közel eső fénysugarakat tudjuk összegyűjteni újra egy pontba, a távolabb esőket már egyre kevésbé. Ezeket a tengelyhez közeledő fénysugarakat **paraxiális (tengely menti) sugaraknak** nevezik. Lássuk tehát, hogy ilyen feltételek mellett, azaz két közeg elválasztó gömbfelület és paraxiális sugarak esetén hogy adhatjuk meg a **leképezés törvényét** [lásd „*A leképezési törvény (két közeg elválasztó gömbfelületre, paraxiális sugarak esetén)*”].

$$\frac{n_1}{s} + \frac{n_2}{s'} = \frac{(n_2 - n_1)}{r}. \quad (\text{II.16})$$

Bár s -t és s' -t nem az OO' tengely mentén mértük, ebben a közelítésben nem követünk el hibát, ha a tárgy illetve képtávolsággal azonosítjuk őket ($s \approx t$, $s' \approx k$). (Mivel a P pont nincs kitüntetve, az összefüggés nemcsak a P ponton átmenő fénysugárra, hanem az összes paraxiális sugárra érvényes.)

Az összefüggés jobb oldalán álló kifejezést nevezzük az adott felület (természetesen a közegektől is függő) **törőerősségének** (D) (a törőerő vagy törőképesség elnevezés szintén használatos),

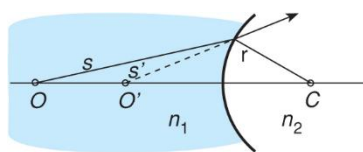
$$D = \frac{(n_2 - n_1)}{r}. \quad (\text{II.17})$$

Ennek szokásos egysége a m^{-1} vagy más néven **dioptria** ($1\text{dpt} = 1\text{m}^{-1}$).

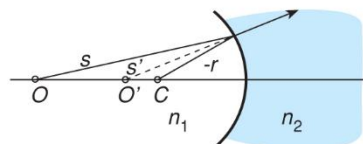
Érdeemes megfigyelni, hogy mi a jelentése a negatív törőerősségnek, és hogy hogyan valósítható meg (II.12. ábra). Ebben az esetben a (II.16) összefüggés szerint (amennyiben s pozitív) s' -nek negatívnak kell lennie. Ez azt jelenti, hogy a tárgypontból (O) kiinduló fénysugarak nem találkoznak össze a törő felület túloldalán egy képpontban, hanem szétartókká válnak, és csak (ellenkező irányban történő) meghosszabbításuk (szaggatott vonal) hoz létre közös metszéspontot (O'). Mivel ez a virtuális képpont a törőfelületnek a tárgyponttal megegyező oldalán található, ezért s' negatív. Tekintettel arra, hogy a fényút megfordítható, azt is mondhatjuk, hogy az O' virtuális tárgypontnak O lesz a képe.

Végül még azt nézzük meg, hogy mit kapunk több, egymás mögött elhelyezkedő törőfelület esetében. A korábbi eredményeinket felhasználva alkalmazzuk a (II.16) leképezési törvényt két közeli gömbfelület esetére. Az egyszerűség kedvéért a második felület görbülete legyen negatív ($-r_2$) és a harmadik közeg törésmutatója

egyezzen meg az első közegével ($n_3 = n_1$), így egy közismert eszközhöz, a mindkét oldalán domború ún. bikonvex lencséhez jutunk (II.13. ábra).

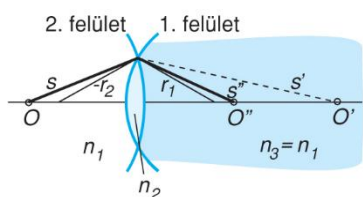


pozitív görbület, de $n_2 < n_1$



negatív görbület, de $n_2 > n_1$

II.12. ábra. Negatív törőerősség kétféleképpen valósítható meg



II.13. ábra. A bikonvex lencse, mint két gömbfelülettel határolt leképező rendszer. O pont képe csak az 1. felület megléte esetén O' lenne (az n_2 törésmutatójú közegben). Ezt virtuális tárgynak tekintve a 2. felület létrehozza az O'' képpontot (az $n_3 = n_1$ törésmutatójú közegben). A két felület tehát együttesen O -t O'' -be képezi le.

Az 1. felületre a leképezési törvény:

$$\frac{n_1}{s} + \frac{n_2}{s'} = \frac{(n_2 - n_1)}{r_1} \quad (= D_1). \quad (\text{II.18})$$

A 2. felületre a leképezési törvény, ha O' -t virtuális tárgypontnak tekintjük (negatív s'):

$$\frac{-n_2}{s'} + \frac{-n_1}{s''} = \frac{n_1 - n_2}{-r_2} \quad (= D_2). \quad (\text{II.19})$$

A két egyenletet (II.18, II.19) összeadva kapjuk a vékony (gömbfelületekkel határolt) **lencsékre vonatkozó leképezési törvényt**:

$$\frac{n_1}{s} + \frac{n_1}{s''} = (n_2 - n_1) \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}. \quad (\text{II.20})$$

Ezt a (II.16) és a (II.17) összefüggésekkel összevetve azt mondhatjuk, hogy a jobb oldalon álló kifejezés a lencse törőerősségével (D_{lencse}) egyenlő. Ezek szerint a **két gömbfelület együttes törőerősségét az egyes felületek törőerősségének összege adja meg**:

$$D_{\text{lencse}} = D_1 + D_2 \quad (\text{II.21})$$

Ilyen esetekben tehát a dioptriák összeadódnak. Mint később látni fogjuk ez az alapja a szem leképezésének és a látásélesség korrekcióinak is (lásd IV/2.2.1. és IV/2.2.2.).

Mindezt még azzal egészítjük ki, hogy amennyiben a (II.20) összefüggés mindkét oldalát elosztjuk n_1 -gyel:

$$\frac{1}{s} + \frac{1}{s''} = \left(\frac{n_2}{n_1} - 1 \right) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right),$$

továbbá mivel paraxiális sugarakra $s \approx t$, $s'' \approx k$, ahol t a tárgytávolság, k a képtávolság, akkor a törvény korábbi tanulmányokból ismert alakjához juthatunk:

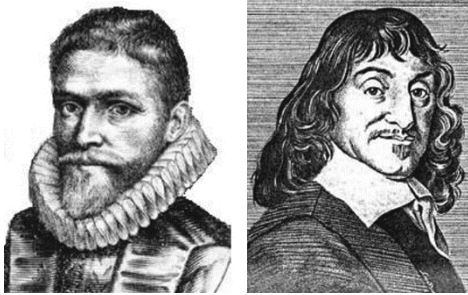
$$\frac{1}{t} + \frac{1}{k} = \frac{1}{f} \quad (\text{II.22})$$

Itt f a lencse fókusz távolsága, ami definíció szerint megegyezik a végtelen tárgytávolsághoz tartozó képtávolsággal, tehát amikor $1/t \approx 1/s = 0$, akkor $k = f$. Ez összhangban van azzal is, hogyha a fókusz távolságot méterben mérjük, akkor annak reciproka megadja a lencse dioptriában kifejezett törőerősségét, ami csak a lencse anyagának a környezetére vonatkozó relatív törésmutatójától ($n_2/n_1 = n$), valamint a két gömbfelület görbületi sugarától (r_1, r_2) függ:

$$D_{\text{lencse}} = \frac{1}{f} = (n - 1) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right). \quad (\text{II.23})$$

II.1. megjegyzés

Könnyű belátni, hogy ha a fény mondjuk egy $n = 1,2$ törésmutatójú közegben a vákuumhoz képest 1,2-szer lassabban terjed, akkor ugyanannyi idő alatt vákuumban 1,2-szer több utat tenne meg. Mivel $n = c_0/c = c_0 t/c t = s_0/s$, ezért $ns = s_0$. (A 0 index a vákuumbeli értékeket jelöli.)

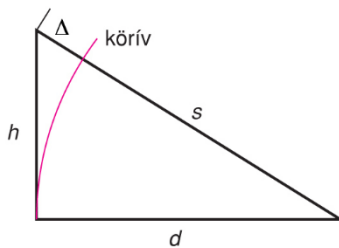


Snellius és Descartes



Fermat

A leképezési törvény (két közeg elválasztó gömbfelületre, paraxiális sugarak esetén)

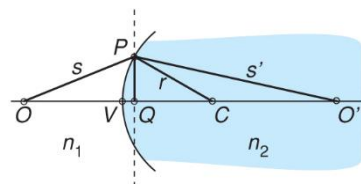


1. ábra. $\Delta = s - d$ meghatározásához, ha $h \ll s$, azaz ($s \approx d$)

Ehhez előbb szükségünk lesz egy geometriai összefüggésre, amely segítségével könnyen összehasonlíthatóvá válnak az útkülönbségek, illetve az optikai-úthosszkülönbségek. Az általánosan megfogalmazott kérdés az, hogy **mennyivel hosszabb egy derékszögű háromszög átfogója a hosszabbik befogójánál**, ha feltesszük, hogy ez az eltérés egyébként kicsi. A válasz az 1. ábrából kiolvasható (átfogó (s), hosszabbik befogó (d), Δ kicsi, azaz $h \ll s$). Pitagorasz tételéből következően $s^2 - d^2 = h^2$, vagy ami ezzel ekvivalens $(s - d)(s + d) = h^2$. Az ábra alapján $\Delta = s - d$ és a feltétel miatt ($s \approx d$), $s + d \approx 2s$. Ily módon azt kapjuk, hogy:

$$\Delta \approx \frac{h^2}{2s}. \quad (1)$$

Ezt a közelítést addig használhatjuk, amíg h sokkal kisebb, mint s , azaz éppen a paraxiális sugaraknak megfelelő esetekben.



2. ábra. Leképezés két közeget határoló gömbfelület esetén

Ezek után tekintsük a 2. ábrát. C a gömbfelület középpontja, r pedig a sugara. Feltételezésünk szerint O' pont az O pont képe. P a gömbfelületnek az OO' tengelyhez közel fekvő pontja, V pedig épp a tengelyen fekvő pont. Tehát OPO' (és természetesen OVO' is) paraxiális fénysugár. P -ből az OO' tengelyre bocsátott merőleges PQ hosszát jelöljük h -val.

Képzeljük most egy pillanatra azt, hogy a gömbfelületet levágtuk egy síkkal a PQ mentén (szaggatott vonal). Ekkor az OP távolság megtételéhez szükséges idő nagyobb lenne az OQ -nakmegfelelő időnél, és ugyanúgy a PO' -nekmegfelelő idő is nagyobb lenne a QO' -nekmegfelelőnél. Az üvegnek azonban éppen amiatt kell görbülnie, hogy ezt az időtöbbletet a VQ út során fellépő idővesztéssel kompenzálja.

Az optikai úthosszak többlete a fenti összefüggések felhasználásával az OPO' út mentén (OQO' -hez képest)

$$\frac{n_1 h^2}{2s} + \frac{n_2 h^2}{2s'}. \quad (2)$$

Ennek kell egyenlőnek lennie a VQ úton fellépő optikai úthossz növekedésével azáltal, hogy a törésmutatót n_1 -ről n_2 -re változtatjuk (azaz visszarakjuk a képzeletben levágott részt). Ismét a (1) összefüggést alkalmazzuk a QCP háromszögre, mivel $PC = VC$ ezért $VQ = h^2/2r$. A törésmutató csere miatt ez optikai úthosszban kifejezve:

$$\frac{(n_2 - n_1)h^2}{2r}. \quad (3)$$

Az utóbbi kifejezéseket egyenlővé téve jutunk a következő egyenlethez:

$$\frac{n_1 h^2}{2s} + \frac{n_2 h^2}{2s'} = \frac{(n_2 - n_1)h^2}{2r}. \quad (4)$$

Az egyenlet mindkét oldalát $h^2/2$ -vel osztva megkapjuk a keresett (két közeget elválasztó gömbfelületre, paraxiális sugarak esetén érvényes) leképezési törvényt.

2.1.3. II/2.1.3. A fizikai optika vagy hullámoptika alapjai

II.3. idézet

..., ha figyelembe vesszük azt a rendkívüli sebességet, amellyel a fény minden irányban kiterjed, és hogy - ha különböző oldalról jönnek esetleg éppen egymással szemben - a sugarak egymás akadályozása nélkül áthaladhatnak egymáson, jól megérthetjük, hogy ha mi egy fénylő tárgyat látunk, az nem lehet egy

anyagáramlás következménye, amely anyag a tárgyról felénk jön oly módon, mint ahogy a golyó vagy a nyíl halad a levegőben;... Így tehát a fény valahogy másként terjed; ami ennek megértéséhez vezet, az az ismeret, amely a hang terjedéséről birtokunkban van.

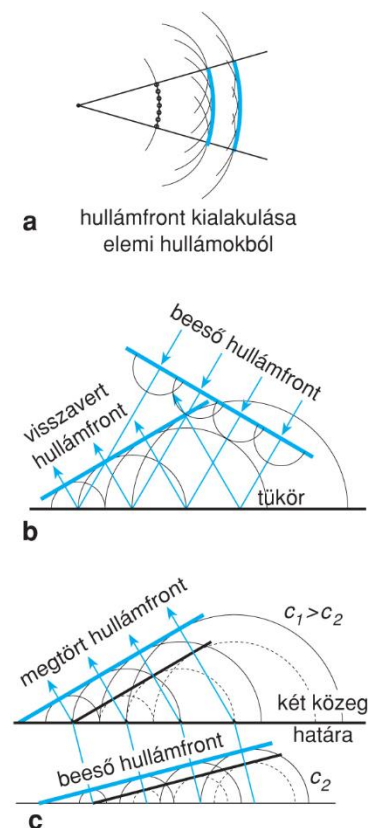
Huygens: Traité de la lumière, Bevezetés (Simonyi Károly fordítása)

Míg a **geometriai optika** a szem leképezésének és igen sok optikai eszköz működésének megértéséhez nyújt segítséget (IV/2.2 és VI/2.), **nem tud magyarázatot adni**, például olyan egyszerűnek tűnő kérdésre, **hogy bár amikroszkóp nagyítását elvileg korlátlanul fokozhatjuk, mégsem láthatunk meg akármilyen kisméretű tárgyat benne.**(A problémával részletesen majd a VI/2.2.2. részben foglalkozunk). Vagy azt sem lehet a geometriai optika alapján megmagyarázni, hogy a vízfelületen úszó vékony olajfoltot miért látjuk színesnek.

Az ok egyszerű: minden közelítésnek, így a geometriai optikának is van egy érvényességi köre, és ennek érünk a határára, illetve kívül kerülünk rajta a felvetett kérdések esetében. Ilyen kérdések megválaszolásához a fénysugár modell helyett egy jobb közelítésre van szükségünk.

A fény valamilyen hullámként való elképzelését Christian Huygens (1629– 1695) holland fizikus vetette fel először (lásd II.3. idézet), de a jelenségek teljes matematikai leírását csak több mint száz évvel később Jean Augustin Fresnel (1788–1827) francia fizikusnak sikerült megadnia. Ezért a hullámoptika alapelvét e két tudósról nevezték el (Huygens–Fresnel-elv). Ebben a közelítésben sem vizsgáljuk a fény mibenlétét, csak annyit tételezünk fel róla, hogy hullámként viselkedik.

A **Huygens-elv** szerint egy **hullámfelület minden egyes pontjából elemi hullámok indulnak ki, az új hullámfelület ezen elemi hullámok közös burkolófelülete** (lásd II.14. ábra). **Fresnel ezt azzal egészítette ki**, hogy az új burkolófelület létrejöttkor **érvényesül a szuperpozíció elve** is, ami nem más, mint annak a tapasztalati ténynek a kvantitatív megfogalmazása, hogy két hullám összetalálkozásakor zavartalanul keresztülhaladnak egymáson. Emiatt az eredő kitérést egy adott helyen és egy adott időpillanatban a két hullám pillanatnyi kitérés értékeinek nagyság és irány szerinti összege adja meg. (Hasonlóan ahhoz, ahogy egy folyón evezve a csónak valódi elmozdulása (a folyó és az evezős által előidézett) két, egyidejű elmozdulás eredőjeként fogható fel.)



II.14. ábra. A fényterjedés a) a fényvisszaverődés b) és a fénytörés c) szokásos magyarázata a Huygens-elv alapján. Látható, hogy ez, a Fermat-elvtől merőben különböző elképzelés szintén elvezet a fénytani alapok

megértéséhez. Mindezen túlmutatva azonban egy olyan jelenség magyarázatául is szolgál, amelyről a Fermat-elv semmit sem tud mondani. Ez a jelenség a kettős törés, amiről Erasmus Bartholinus (1625-1698) dán orvos és fizikus 1669-ben adott hírt először, nevezetesen, hogy az izlandi mézspát kristályon keresztül nézve a tárgyak megkettőzve látszanak. (Ennek részletes magyarázatát a II/2.1.7 részben tárgyaljuk.)

A legáltalánosabb megfogalmazás szerint akkor beszélünk hullámról, ha egy közegben valamilyen zavar tovaterjed, de ettől a közegben nem történik maradandó átrendeződés. Mivel a fény esetében a feltételezett közvetítő közeget „éternek” nevezték, Huygens ilyen értelemben beszél „éterzavarokról”. Thomas Young (1773–1829) angol orvos és fizikus volt az első, aki kísérleti tapasztalatai alapján leszögezte, hogy a fény periodikus hullámvonulatokból áll. Ez a hullámfogalom már **egy rezgési állapot** vagy más néven **fázis tovaterjedését** jelenti. A fázist a **fázisszöggel** (φ) **jellemezzük**, ami azt adja meg, hogy a teljes 2π periódusnak éppen melyik részénél tart a rezgés (lásd II.1. példa).

A legegyszerűbb rezgésnél a kitérés a fázis szinuszos függvénye, a fázis pedig az időnek lineáris függvénye, tehát:

$$y = A \sin(\varphi), \quad \varphi = \omega t + \varphi_0. \quad (\text{II.24})$$

Így jutunk az $y = A \sin(\omega t + \varphi_0)$ korábbról ismert összefüggéshez. Itt A a rezgés amplitúdója, $\omega = 2\pi/T$ a rezgés körfrekvenciája, ami azt fejezi ki, hogy a rezgés egy teljes periódusa (2π) éppen a T periódusideig tart (vagy $\omega = 2\pi f$, ahol $f = 1/T$ a frekvencia), φ_0 pedig az ún. kezdőfázis vagy fázisállandó.

Ha a fázis tovaterjed, akkor azt a (II.24) összefüggésben úgy vehetjük figyelembe, hogy φ nemcsak az időtől, hanem a helytől is függ (a legegyszerűbb esetben ez a kapcsolat is lineáris), azaz:

$$\varphi = \omega t + kx + \varphi_0. \quad (\text{II.25})$$

Itt $k = 2\pi/\lambda$ az ún. hullámszám, ami azt fejezi ki, hogy a 2π teljes periódus lezajlása alatt (ami T időtartamot vesz igénybe) például a hullámhegy vagy a hullámvölgy éppen egy λ periódushossznyt, vagy hullámhossznyt halad előre. (A hullámszám a körfrekvencia térbeli megfelelőjének is tekinthető (lásd II.2. megjegyzés)).

A hullámmozgás tehát térben és időben periodikus jelenség. Ez azt jelenti, hogyha csak egy adott helyen vizsgáljuk ($x = \text{állandó}$), akkor csak az időbeli periodicitást, azaz a rezgést észleljük, ha viszont egy adott időpontban vizsgáljuk ($t = \text{állandó}$, mondjuk pillanatfelvételt készítünk róla), akkor csak a térbeli periodicitást tudjuk megfigyelni.

A harmonikus (szinuszos) hullám terjedési sebességét vagy más néven a **fázissebességet** (c) úgy kapjuk meg, ha például a hullámhegy által megtett utat osztjuk a megtételéhez szükséges idővel. Az előbbieket szerint ezt legegyszerűbben úgy tehetjük meg, ha úthossznak a periódushosszat, (az ehhez tartozó) időnek pedig a periódusidőt használjuk:

$$c = \frac{\lambda}{T}, \quad \text{illetve} \quad c = \lambda f. \quad (\text{II.26})$$

Eddig csak arról beszéltünk, hogy a hullámban a fázis terjed. Tudjuk azonban, hogy minden rezgő test energiát tárol. Egy rugóra akasztott rezgő test energiája például $E = DA^2/2$, ahol A a rezgés amplitúdója, D pedig a rugóállandó. Mindebből csak azt használjuk fel a továbbiakban, hogy az energia arányos a rezgés amplitúdójának négyzetével: $E \sim A^2$. Ahogy egy **hullámban** a fázis, azaz a rezgési állapot előre halad, viszi magával a rezgési energiát is, tehát **a hullámállapot terjedésével együtt energia is terjed**. Ez az, amit sugárzási energiaként illetve fényintenzitásként észlelünk, szemünk is erre érzékeny. Így az előbbi arányosság a fényintenzitásra is teljesül:

$$J_E \sim A^2. \quad (\text{II.27})$$

II.1. példa

Általánosán minden periodikus mozgás, illetve változás előrehaladtát a fázissal jellemezhetjük. Például a Hold fényváltozásainál beszélünk újholdról, első negyedről, teliholdról és utolsó negyedről.

II.2. megjegyzés

A körfrekvencia és a hullámszám is arra szolgál, hogy az időt, illetve a helyet átszámítsuk valamilyen szöggé, hiszen a szinuszfüggvény argumentumában csak szög szerepelhet. A probléma új egységek választásával megoldható: az idő új egysége a periódusidő (T), a hosszúság új egysége a hullámhossz (λ). Ezekben az új egységekben mérve az idő mérőszáma t/T , a hosszúság mérőszáma x/λ . Ezeket 2π -vel még azért kell megszorozni, mert ekkora a szög „természetes” egysége (és nem 360°).



Huygens és Fresnel



Young

2.1.4. II/2.1.4. Fényinterferencia

Általában interferencia néven foglaljuk össze azokat a jelenségeket, amelyek akkor lépnek föl, ha **két vagy több hullám találkozik egymással**. Interferenciára csak a hullámok képesek. Így amikor 1801-ben Young-nak sikerült elsőként fényvel interferenciajelenséget produkálnia, az egyértelmű bizonyítékul szolgált arra, hogy a fény hullámjelenség.

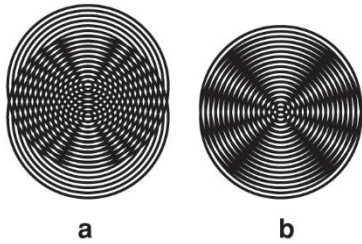
Fényinterferenciát a „legegyszerűbben” úgy figyelhetünk meg, ha két „megfelelő” fényforrás fényét „megfelelő” geometriai elrendezésben egy ernyőre vetítjük. (Arra, hogy mit jelent a „megfelelő” fényforrás és a „megfelelő” geometriai elrendezés, később még visszatérünk.) A sugárzásokról alkotott általános képünk alapján (II/1.1.1.) ilyenkor azt várnánk, hogy a két forrásból egy adott helyre érkező fényintenzitás (J_{E_1} és J_{E_2}) a megvilágított felületen mindenhol összeadódik, azaz $J_{E_1} + J_{E_2} = J_{E_{eredő}}$. Ehelyett épp azt figyelhetjük meg, hogy ez általában nem teljesül, tehát például **lesznek olyan helyek az ernyőn, ahova biztosan érkezik fény mindkét fényforrásból, és ott mégis sötét foltok láthatók** (lásd még a „Víz hullámok interferenciája és a fényinterferencia hasonlósága”). A fényinterferencia tényét általánosan az alábbi összefüggéssel adhatjuk meg:

$$J_{E_1} + J_{E_2} \neq J_{E_{eredő}}. \quad (\text{II.28})$$

A víz hullámokkal előidézett interferenciához hasonló fényinterferenciát évszázadokon át éppen azért nem tudták megfigyelhető módon megvalósítani, mert egy közös fényforrásban az elemi fény kibocsátási aktusok (ez felel meg a kavicsok vízbe érkezésének) térben és időben rendezetlenül, véletlenszerűen játszódnak le. Az ilyen fényforrás megfigyelhető interferencia létrehozására alkalmatlan ún. **inkohere**ns fényt produkál. Megfigyelhető fényinterferencia tehát csak **koherens** fény hullámokkal állítható elő. Általában akkor mondjuk, hogy két fény hullám koherens, ha **fáziskülönbségük állandó**, vagy ha szabályosan változik. Hagyományos fényforrás esetében ezt úgy érhetjük el, hogyha csak egy fényforrást használunk és annak egy igen kis felületéről kilépő fényét kettéosztjuk. Ezzel a térbeli és az időbeli inkohereciát is szűk határok közé szorítjuk.

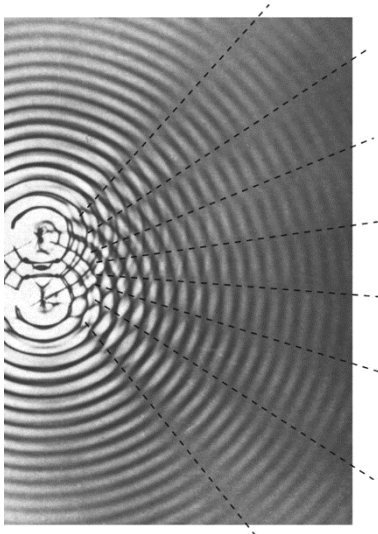
A megfigyelhetőség geometriai feltétele (a „megfelelő” geometriai elrendezés) a II.15. ábra alapján egyszerűen megérthető. Jelöljük a két forrás közötti távolságot d -vel. Ha a két forrás elég messze van egymástól (a hullámhosszhoz képest), azaz $d \gg \lambda$, akkor a kioltási (illetve a maximális erősítési) helyek csak a közeli, nagyjából λ -val összemérhető távolságokra lennének észlelhetők. Ez azonban a fény esetében nem teszi lehetővé a megfigyelhetőséget, ugyanis a fény hullámhossza sokszorta kisebb a víz hullámokénál. (Az elvileg létező sötét-világos helyek az emberi szem felbontásánál rövidebb távolságon belül változnak, így csak annak átlagát, tehát egyenletes megvilágítást észlelünk.)

Azt mondhatjuk, hogy amíg az optikai berendezések d -nek megfelelő méretei sokkal nagyobbak a hullámhossznál, addig a hullámtulajdonság nem figyelhető meg. A hullámoptikát tehát a λ -val összemérhető vagy annál kisebb távolság esetében kell csak alkalmaznunk. Az ennél nagyobb távolságokra a geometriai optika is tökéletes leírást biztosít. Ez az a határ, amit már a II/2.1.3. részben is említettünk. Így azt is mondhatjuk, hogy **a geometriai optika a fizikai optika** (vagy hullámoptika) $\lambda \rightarrow 0$ **határesetének felel meg.**



II.15. ábra. Az interferencia szemléltetése. a) távolabbi ($d = 6\lambda$) és b) közelebbi ($d = 2\lambda$) (izotrop) források esetén (d a két forrás közti távolság). A koncentrikus (fekete) körök az egy forrásból kiinduló hullámhegyeket jelentik. A legsötétebb részek a hullámhegyek, hullámvölgyekkel való találkozásánál jönnek létre. Egyre kisebb forrástávolság (d) esetén az ilyen helyek egyre távolabb esnek egymástól

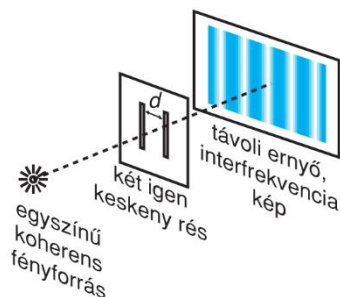
Víz hullámok interferenciája és a fényinterferencia hasonlósága



A jelenség megértéséhez a víz hullámok interferenciáját használjuk fel. Az ábra alapján arra is választ kapunk, hogy mikor „megfelelő” a forrás. Egy vízfelületen például úgy kelthetünk ilyen hullámokat, ha állandó időközönként egyszerre mindkét forrás helyére egy-egy kavicsot dobunk. Ha a szinkronizálás megszűnik, tehát ha a kavicsok nem azonos időközönként és nem mindig ugyanazokra a helyekre pottyannak, akkor a hullámok összevissza érkeznek egy adott helyre, és az interferencia nem ad ilyen szép szabályos mintázatot. Víz hullámok esetében, mivel magukat a hullámokat is direkt módon észleljük, könnyebben megérthetjük a jelenséget, hiszen, ha egy hullámhegy mindig ugyanakkora nagyságú hullámvölgygel találkozik, akkor a szuperpozíció miatt azok tökéletesen semlegesítik, más szóval kioltják egymást. A jól megfigyelhető kioltási helyeket szaggatott vonallal összekötöttük az ábrán. Ha fény hullámokkal végeznénk a kísérletet, akkor ezeknek a vonalaknak az ernyővel való találkozási helyein lennének a sötét foltok.

2.1.5. II/2.1.5. Fényelhajlás, diffrakció

Ez a jelenség a **fényinterferencia egyik megnyilvánulási formája**, melynek lényege az, hogy egy fénynyaláb irányát az útjába tett részleges akadályok úgy módosítják, hogy a megfigyelés helyén (például egy ernyőn) az egyszerű árnykép helyett ott is észlelünk megvilágítást, ahol a fény egyenes vonalú terjedése alapján nem várnánk. Young korábban említett kísérletében éppen ilyen **két résen történő fényelhajlást** valósított meg (II.16. ábra). Az egyszerűség kedvéért **egyszínű** (monokromatikus) **fényt** használt. Ily módon elvileg egyetlen hullámhosszal, illetve frekvenciával jellemezhető harmonikus (szinuszos) hullámok interferenciáját tanulmányozhatta. A fényelhajlás eredményeként a II.16. ábrán is látható (sötét-világos csikokból álló) interferencia-képet figyelhetett meg. Ezt az intenzitás- illetve besugárzott felületi teljesítményeloszlást, korábbi tanulmányaink alapján viszonylag egyszerűen megérthetjük.

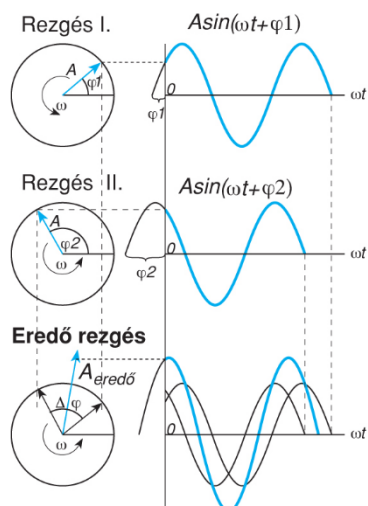


II.16. ábra. A Young-féle kísérlet kettős réssel. Az ernyőn a sötét és világos csíkok egyforma vastagok és közöttük nincs éles határ. A besugárzott felületi teljesítmény folytonosan változik a legsötétebb és a legvilágosabb helyek között.

A koherens fényforrásból a tőle azonos távolságra levő réseket azonos fázisban éri el a hullám. Így a Huygens-elv alapján **mindkét résből azonos fázisban indulnak ki az elemi hullámok is, melyek az ernyő különböző pontjaiban a megtett utaktól függően már különböző fázisokban találkoznak össze**. Amint ezt már a II/2.1.3. részben kifejtettük, egy hullám a terjedés egy adott helyén egyszerű rezgésként fogható fel. A feladat tehát annyi, hogy az elemi hullámok által előidézett rezgéseket az ernyőn helyről helyre összegezni kell. Az egyszínű fény használata miatt a rezgések azonos frekvenciájúak, a rések egyformasága miatt pedig azonos amplitúdójúak is. Így az eredő rezgés amplitúdója csak az összetevők amplitúdójától (A) és az adott helyen meglévő állandó fáziskülönbségüktől ($\Delta\varphi$) függ.

A szinuszfüggvény eredeti definícióját felhasználva, nevezetesen hogy az a forgó egységvektor második koordinátájával (azaz az y tengelyre eső vetületével) adható meg, képzeletben minden harmonikus rezgéshez hozzárendelhetünk egy egyenletesen forgó vektort. Ennek hossza a rezgés amplitúdójával egyenlő, a vízszintes tengellyel bezárt szöge a rezgés fázisát adja meg, a forgás szögsebessége pedig a rezgés körfrekvenciájával egyenlő ($\omega = 2\pi/T$, ahol T a periódusidő). Ilyen vektorok segítségével a rezgések összegzése igen egyszerűen elvégezhető (lásd II.17. ábra):

$$A_{\text{eredő}} = 2A \cos \frac{\Delta\varphi}{2} \quad (\text{II.29})$$



II.17. ábra. Két azonos frekvenciájú és amplitúdójú, de különböző fázisú harmonikus rezgés összegzése. (Szemléltetés forgó vektorokkal és függvényekkel.) Rezgés I + Rezgés II = Eredő rezgés. Az eredő rezgés amplitúdója ($A_{\text{eredő}}$) csak az összetevők amplitúdójától (A) és fáziskülönbségüktől ($\Delta\varphi$) függ

Mivel szemünk a fázisviszonyokat közvetlenül nem érzékeli, a rezgés frekvenciája pedig csak a fény színét határozza meg, ezért az eredő amplitúdón kívül másra nincs is szükségünk ahhoz, hogy a besugárzott felületi teljesítmény-eloszlást matematikai formában is megkapjuk. A (II.27) összefüggés szerint ugyanis az amplitúdó négyzete arányos az intenzitással, és a merőleges (illetve ahhoz közeli) beesési szögek miatt csak ez szabja meg a besugárzott felületi teljesítményeket az ernyőn:

$$J_E \sim A^2_{\text{eredő}} = 4A^2 \cos^2 \frac{\Delta\varphi}{2}. \quad (\text{II.30})$$

Kiseb átalakítások után kapjuk:

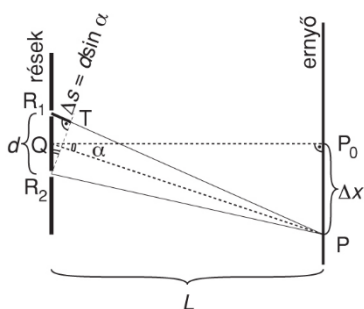
$$\begin{aligned} A^2_{\text{eredő}} &= 2A^2 \left[2\cos^2 \frac{\Delta\varphi}{2} + \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} - \sin^2 \frac{\Delta\varphi}{2} \right] = \\ &= 2A^2 [1 + \cos(\Delta\varphi)]. \end{aligned}$$

(II.31)

Ez a kifejezés áttekinthetőbb, mint (II.30), mert itt közvetlenül a fáziskülönbségtől való függés szerepel (lásd még a II.3. megjegyzést).

Már csak azt kell megmondanunk, hogy mekkora a fáziskülönbség az ernyő egyes pontjaiban. A függőleges rések és a merőlegeshez közeli beesési szögek miatt az ernyőn csak a vízszintes irány mentén van észlelhető útkülönbség- (Δs) változás, amely a fáziskülönbség- ($\Delta\varphi$) változások okozója. Ezt szemlélteti a II.18. ábra, ahol d a két rés közti távolság, L pedig a réseknek az ernyőtől mért távolsága. Ebben az esetben egy tetszőleges P pont helye az ernyőn a rések felőli Q pontból nézve egyetlen szöggel, az ernyőre merőleges QP_0 egyenestől való eltérés szögével (α -val) adható meg. Amennyiben a két rés elég közel van egymáshoz az ernyőtől mért távolságukhoz képest, azaz $L \gg d$, akkor az ábrán látható kétíves szögek jó közelítéssel merőleges szárúak, tehát megegyeznek egymással (tehát α -val). Ennek alapján az ernyő bármelyik P pontjához tartozó **útkülönbség** egyszerűen meghatározható:

$$\Delta s = d \sin \alpha. \quad (\text{II.32})$$



II.18. ábra. A Young-féle kísérlet felülnézetből. A számoláshoz csak azt használjuk föl, hogy $L \gg d$, azaz a két rés elég közel van egymáshoz az ernyőtől mért távolságukhoz képest. Ilyenkor a II/2.1.1. részben már alkalmazott közelítést használhatjuk, nevezetesen, hogy az R_2TP háromszög olyan „elfajult (egyenlő szárú) háromszöghöz” kezd hasonlítani, amelynek két 90° -os és egy 0° -os szöge van.

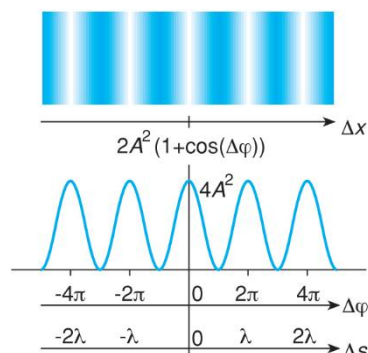
A P pont helye megadható az ernyő közepétől (P_0 -tól) mért távolsággal is: $\Delta x = L \tan \alpha$. Ezt a (II.32) összefüggéssel összevetve, látható, hogy kis α szögek esetén (amíg $\sin \alpha \approx \tan \alpha$) Δx és Δs arányosak egymással:

$$\Delta x \approx \Delta s \frac{L}{d}. \quad (\text{II.33})$$

A mindenkor fáziskülönbség meghatározásához figyelembe kell vennünk, hogy $\Delta\varphi$ és Δs is arányosak egymással és hogy 2π fáziskülönbségnek éppen λ útkülönbség felel meg. Így Δs útkülönbséghez a

$$\Delta\varphi = \Delta s \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \text{vagy} \quad \Delta\varphi = 2\pi \frac{\Delta s}{\lambda} \quad (\text{II.34})$$

fáziskülönbség tartozik, de azt is mondhatjuk, hogy a fáziskülönbség az útkülönbség és a hullámhossz arányát kifejező szög. A kapott eredményeket a II.19. ábrán foglaltuk össze.

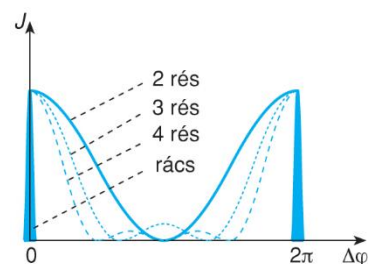


II.19. ábra. Két igen keskeny résen történő fényelhajlás jelenségének megfigyelt és számított intenzitáseloszlása. A legelső skálából az is kiderül, hogy rövidebb hullámhosszúságú megvilágító fénynél a maximumok közelebb kerülnek egymáshoz

2.1.6. II/2.1.6. A diffrakciós módszerek alapjai

Ebben a részben azt vizsgáljuk meg, hogy mi változik akkor, ha nemcsak kettő, hanem 3, 4, vagy nagyon sok (n) egymástól egyenlő távolságra (d) lévő párhuzamos keskeny résen, másként mondva **optikai rácson** történik a fényelhajlás (lásd „*Diffrakció optikai rácson*”). (Azt, hogy a rések nagyon keskenyek, a továbbiakban is igen fontos hangsúlyoznunk.)

Optikai rács esetében a $\Delta\varphi = k2\pi$, $k = 0, 1, 2, \dots$ feltételnek megfelelő helyeken igen **éles intenzitásmaximumok alakulnak ki** (lásd II.20. ábra). Ezek az ún. **elhajlási rendek**, melyekhez k különböző értékei rendelhetők. Így beszélhetünk nulladrendről ($k = 0$), első rendről ($k = 1$), stb. Mivel a fáziskülönbség negatív is lehet, ezért k is felvehet negatív értékeket.



II.20. ábra. Két maximális erősítés közötti relatív intenzitás eloszlás 2,3,4 és nagyon sok rés (optikai rác) esetében, egyszínű (monokromatikus) fény alkalmazásakor

A rendeket azzal is jellemezhetjük, hogy a szomszédos rések közötti útkülönbséget adjuk meg a (II.34) összefüggés alapján. Így a nullad, első, második, stb. rendekben $\Delta s = k\lambda$, ahol $k = 0, 1, 2, \dots$. Ebből az is kiderül, hogy miként módosul az optikai rács elhajlási képe akkor, ha a megvilágító fény hullámhosszát, azaz színét megváltoztatjuk. Amit a kettős résnél már említettünk (lásd II.19. ábra), hogy rövidebb hullámhosszúságú fény alkalmazásakor a maximumok közelebb kerülnek egymáshoz, ugyanez érvényes most az éles maximumokra is. Így **összetett megvilágító fény használatakor az összetevők térben elkülönülve tűnnek elő az elhajlási képben** (minden rendben, a nulladrend kivételével). Ez figyelhető meg a II.21. ábrán, ahol két azonos intenzitású (λ_1 illetve λ_2 hullámhosszal jellemzett) komponensből összetett fény esetét szemléltettük. Ez a fajta összetevőkre való bontás természetesen akkor is megtörténik, ha az összetett fény sokkal bonyolultabb és több különböző intenzitású komponensből áll, ily módon (egy renden belül) **a rácsra érkező fény spektrális eloszlását kaphatjuk meg** (lásd a VI/3. részt).

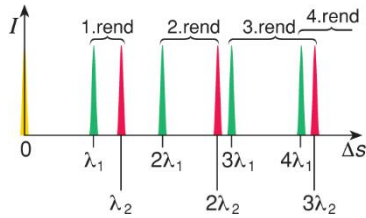
Az **ernyőn megfigyelhető elhajlási képet** más módon nem mérhető **mikroszkopikus távolságmérésre is felhasználhatjuk**. A (II.33) összefüggésből ugyanis a **rácsállandó**, azaz a rések közötti távolság (d) egyszerűen kifejezhető:

$$d \approx \Delta s \frac{L}{\Delta x}. \quad (\text{II.35})$$

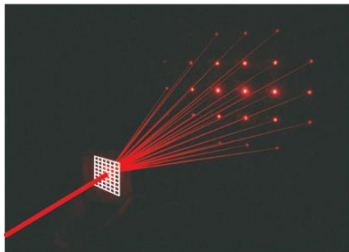
Így ha monokromatikus megvilágító fényt alkalmazunk és az ernyőn lemérjük a nulladrendű és az elsőrendű maximum távolságát, amit jelölünk D -vel, akkor a fény hullámhosszának (λ), valamint a rács és az ernyő közötti távolság (L) ismeretében megkaphatjuk d -t. Az elsőrendű maximumra ugyanis $\Delta s = \lambda$, ezért

$$d \approx \lambda \frac{L}{D}. \quad (\text{II.36})$$

A II.22. ábrán két egymással adott szöget bezáró azonos rácsállandójú optikai rács monokromatikus fényvel megvilágított elhajlási képe látható. **A szabályos makroszkopikus elhajlási képet szabályos mikroszkopikus struktúra idézi elő.** A periodikus ismétlődés miatt az intenzitásmaximumok nagyon élesek. Az imént megbeszélt távolságmérési lehetőségeken kívül az elhajlási kép szimmetriája tükrözi a mikroszkopikus szerkezet szimmetriáját is, ami lehetőséget biztosít annak teljes rekonstrukálására. **Ezt az alapelvet alkalmazzák valamennyi diffrakciós szerkezet-meghatározó módszerben** (lásd például a X/6. részt).



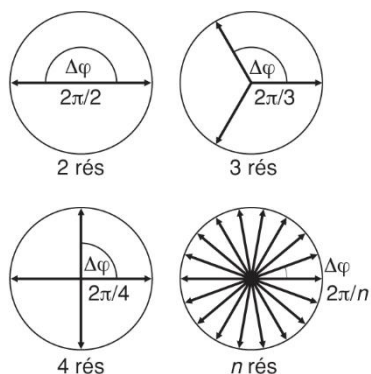
II.21. ábra. Az optikai rács elhajlási képe kétkomponensű ($\lambda_1 < \lambda_2$) összetett fény esetében. A magasabb rendekben az átfedések elkerülhetetlenek



II.22. ábra. Kétdimenziós optikai rács elhajlási képe (Derka István felvétele és illusztrációja)

Diffrakció optikai rácson

A vektoros ábrázolásmódban ezt úgy szemléltethetjük, hogy két, egymással $\Delta\varphi$ szöget bezáró A hosszúságú vektor helyett további A hosszúságú $\Delta\varphi$ -vel elforgatott vektorokat rajzolunk az ábrába. Ezek mindegyike egy újabb részből az ernyő egy adott pontjába érkező elemi hullám járulékanak felel meg. Az utoljára behelyezett vektor az elsővel $(n-1)\Delta\varphi$ szöget zár be, ahol n a rések számát adja meg.



$A_{\text{eredő}} = 0$. Az első teljes kioltás (0 eredő) fáziskülönbsége 2,3,4 és sok (n) rész (illetve optikai rács) esetén ($\Delta\varphi = 2\pi/n$).

Az összegzés során az egyik lényeges változás az lesz, hogy az első teljes kioltás (tehát amikor az eredő vektor 0) fáziskülönbsége ($\Delta\varphi$) a rések számának növekedésével a 0 fáziskülönbséghez egyre közelebb kerül, általánosan felírva $2\pi/n$ -nel lesz egyenlő. A másik fontos változás pedig az, hogy a maximális erősítés helyein, amikor minden vektor azonos irányú ($\Delta\varphi = k2\pi$,

$k = 0,1,2,\dots$) az intenzitás az újabb rések megnyitásával rohamosan növekszik, hiszen $A_{\text{eredő}}^2 = n^2 A^2$.

Mi van azonban két maximális erősítés között? Két rész esetén láthattuk, hogy az átmenet folytonos (II.19. ábra). Három rész esetén a két résznek megfelelő teljes kioltási helyen, amikor $\Delta\varphi = 2\pi/2 = \pi$ ugyan nem tapasztalunk teljes kioltást, de az intenzitás csak a maximális érték $1/9$ része. Ez könnyen belátható, hiszen a két ellentétes irányú vektor éppen semlegesíti egymást, ezért $A_{\text{eredő}} = A$, vagy $A_{\text{eredő}}^2 = A^2$, a maximális erősítésnél viszont $A_{\text{eredő}} = 3A$, így $A_{\text{eredő}}^2 = 9A^2$.

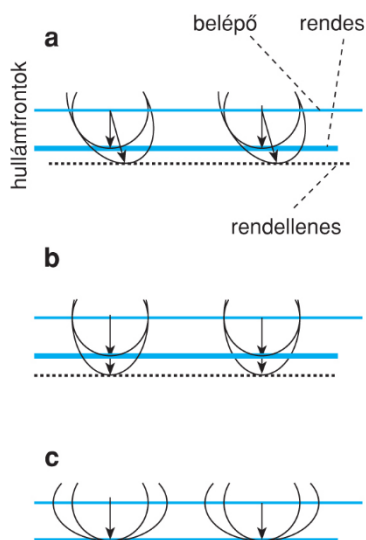
Elég sok rész, azaz **optikai rács alkalmazásakor** ($n \rightarrow \infty$) általánosan a következőt mondhatjuk: amíg a vektorok a körön belül nagyjából egyenletesen eloszolva minden irányba mutatnak, addig $A_{\text{eredő}} \approx 0$, és lényeges járuléka csak a maximális erősítés helyein várható, mivel a teljes kioltás már $2\pi/n$ -nél bekövetkezik.

2.1.7. II/2.1.7. Optikai anizotropia, a fény polarizációja

Ezzel a problémakörrel már Huygens is foglalkozott, és munkája egyik nagy eredményének tekinthető, hogy sikerült megmagyaráznia a kettős törés jelenségét (lásd II.23. ábra). Huygens feltételezte, hogy a **kettősen törő anyagban** a fény kétféle módon terjedhet. A **rendes** (közönséges) **fénysugár** mentén úgy terjed, hogy az elemi hullámok gömbszimmetrikusak, tehát a terjedési sebesség minden irányban azonos (izotrop terjedés). A **rendellenes** (különleges) **fénysugármentén** pedig úgy, hogy a **terjedési sebesség függ az iránytól**, tehát az elemi hullámfelületek gömb helyett ellipszoid alakúak (anizotrop terjedés). A II.24. ábrán a belépő hullámfront két pontjából kiinduló elemi hullámokat szemléltettük különböző esetekben. A tovaterjedő elemi hullámok burkolója (érintője) szolgáltatja az új hullámfrontot. (A hullámfront terjedési irányát az elemi hullám kiindulási pontja és az érintési pont közötti vektor mutatja meg.) Az a) esetben a két hullámfront irány szerint is elkülönül, ilyenkor a fény két különböző úton jut a szemünkbe. Ez figyelhető meg a II.23. ábrán is.



II.23. ábra. A kettős törés mészpát (CaCO_3) kristályon, valamint egyszeres törés kôso (NaCl) kristályon (Derka István felvétele)



II.24. ábra. A kettős törés magyarázata Huygens elképzelése szerint. a) A rendes és a rendellenes fénysugár sebessége és haladási iránya is eltér a közegbe való belépés után. b) Csak a sebességek nagysága különbözik. c) Ebben az irányban a rendes és a rendellenes fénysugár egyformán terjed

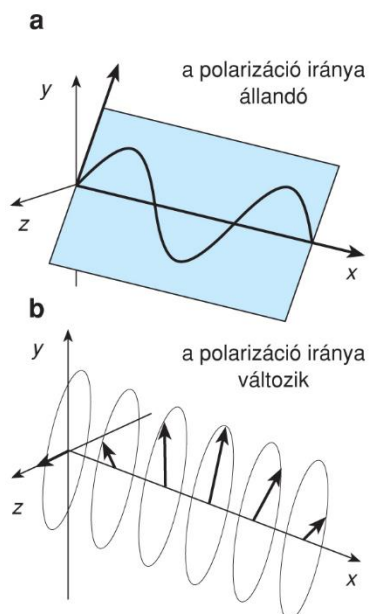
Louis Etienne Malus (1775–1812) francia fizikus fedezte fel azt, hogy a meghatározott szög alatt **viisszaverődô** közönséges fény is olyan tulajdonságokat mutat, mint a kettős törést szenvedett fénysugarak valamelyike. Ma már tudjuk, hogy **ezek a tulajdonságok a fénysugarak polarizációs állapotával kapcsolatosak**.

Korábban a fényt a hanghullámok mintájára longitudinális hullámoknak képzelték (lásd II.3. idézet). A kettős törésben megjelenô kétféle fénysugár azonban csak transzverzális hullámok feltételezésével képzelhetô el. A longitudinális vagy más néven hosszanti hullámokban ugyanis a terjedési irányon kívül más kitüntetett irány nincsen, hiszen a rezgési irány is ezzel megegyezô, így a hullámok megkülönböztethetetlenek. Ezzel szemben a transzverzális vagy haránthullámokban, ahol e két irány merôleges egymásra, van lehetőség a hullámok megkülönböztetésére. Nevezetesen ha a rezgések a hullám terjedése során állandóan egy, a terjedési irányon átfektetett síkban maradnak, akkor **lineárisan** vagy **síkban poláros hullámokról** beszélünk (II.25a. ábra).

Amióta James Clerk Maxwell (1831–1879) angol fizikus kidolgozta az elektromágneses tér általános elméletét, tudjuk, hogy **a fény is elektromágneses hullám** (II.4. idézet). Az elektromágneses hullámokban **az elektromos, valamint a mágneses térerôsség az a fizikai mennyiség, ami térben és idôben periodikusan változik („rezeg”)**.

Maxwell elméletébôl az is kiderül, hogy az elektromágneses hullámok **transzverzálisak**, tehát a fény is **polarizálható**. A Huygens által bevezetett rendes és rendellenes fénysugár így két olyan lineárisan polarizált fénysugarat jelent, amelynek polarizációs iránya egymásra merôleges.

Poláros fényen azonban nemcsak lineárisan polarizált fényt kell értenünk. Ha ugyanis két egymásra merôleges lineárisan polarizált fényhullám valamilyen fáziskülönbséggel találkozik össze (ilyen helyzet állhat elô például a II.24b. ábra szerinti esetben), akkor a szuperpozíció eredményeként ez általában valamilyen **elliptikusan poláros** fényhullámot eredményez. Elliptikusan poláros fényről akkor beszélünk, ha a hullám leírására szolgáló elektromos térerôsség vektor végpontja az idô függvényében egy ellipszis kerületi pontjain fut végig (II.25b. ábra). **A körbefutás** kétféle, **jobb vagy bal irányú** lehet. Ez a fénypolarizáció legáltalánosabb esete. Ha az ellipszis tengelyei megegyeznek egymással, akkor **cirkulárisan poláros** fényről állunk szemben, ha pedig az egyik tengely 0, akkor lineárisan poláros fényről van szó. A **polarizálatlan fény** a fenti alaptípusok változatainak véletlen keveréke. Ilyen például egy közönséges izzólámpa fénye is.



II.25. ábra. A különféle polarizáció szemléltetése a) Lineáris polarizáció: a rezgések egy, a terjedési irányon átfektetett síkban maradnak. b) Elliptikus polarizáció: a „rezgés” itt valójában egy ellipszis mentén történő mozgást jelent

2.1.8. II/2.1.8. A fény mint elektromágneses hullám és mint fényrészecske-, fotonsugárzás

II.4. idézet

Az elektromágneses hullámok terjedési sebességéről.

Ez a sebesség annyira közel esik a fény terjedési sebességéhez, hogy úgy tűnik nyomós okunk van arra következtetni, hogy a fény maga is egy, az elektromágneses törvények szerint az elektromágneses térben hullám alakjában tovaterjedő elektromágneses zavar.

Maxwell, 1864 (Simonyi Károly fordítása)

Azt a gondolatot, hogy a fény részecskékből áll, már Isaac Newton (1642– 1727) a híres angol fizikus is felvetette (II.5. idézet). Ez az elképzelés Newton nagy tekintélye miatt közel száz évig a hullámoptika kerékkötőjévé vált, de az 1800-as évek végére úgy tűnt a „hullám vagy részecske” kérdés végleg nyugvópontra jutott. Minden kísérleti és elméleti munka a fény elektromágneses hullám volta mellett szólt. Így **fénynek** nevezzük az emberi szemmel érzékelhető, tehát a körülbelül **400 nm és 800 nm közötti** hullámhosszal rendelkező **elektromágneses hullámokat**. A fény színe alapján, e két határon túli sugárzást **ultraibolya** valamint **infravörös** sugárzásnak nevezzük. (Az általános szóhasználatban szokásos ultraibolya és infravörös „fényről” beszélni.)

Wilhelm Hallwachs (1859–1922) német fizikusnak tulajdonítható az a felfedezés (1888), hogy ultraibolya sugárzás hatására negatív elektromos töltéshordozók távoznak a megvilágított fém felületéről. Ezt nevezzük **fényelektromos jelenségnek (fotoeffektus)**. Később Lénárd Fülöp (Philipp Lenard) (1862–1947) magyar származású Németországban élő fizikus tanulmányozta alaposabban a jelenséget és a következő megállapításokra jutott (1902):

- a távozó töltéshordozók elektronok, amelyek a megvilágítással gyakorlatilag egy időben jelennek meg,
- a jelenség egy a fém anyagától függő küszöbfrekvencia alatt nem jön létre, hiába növeljük a megvilágító fény intenzitását (például „gyenge” nagyfrekvenciájú ultraibolya sugárzással megvalósul, de „erős” kisfrekvenciájú vörös színű fényel semmi sem történik),
- a kilépő elektronok maximális sebessége nem a megvilágító fény intenzitásától, hanem a színétől, azaz frekvenciájától függ, (növekvő frekvenciával növekszik a sebesség),

- a fény intenzitásának növekedése (azonos frekvencia mellett), csak az időegység alatt kilépő elektronok számát növeli, amennyiben a jelenség már bekövetkezik.

Az **elektromágneses hullámok elmélete alapján**, ezeket a tapasztalatokat **nem lehet megmagyarázni**. A sugárzás intenzitását ugyanis az amplitúdón kívül a hullám más paraméterei, például a frekvencia nem befolyásolják. Így ha az elektronok eltávolításához adott energia szükséges, miért nem lehet azt összegyűjteni hosszabb rövidebb idejű besugárással akármekkora intenzitású és akármekkora frekvenciájú fényből?

A magyarázatot Albert Einstein (1879–1955) német fizikus adta meg (1905), aki feltételezte, hogy **a fény hf nagyságú energiaadagokból, fotonokból áll** (ahol h a Planck-állandó, f pedig a fény frekvenciája), amelyek egyenes vonalban fénysebességgel mozognak **mint kis részecskék**. Így a fény intenzitását két paraméter szabja meg, egyrészt a fotonok egyedi energiája (hf), másrészt az időegység alatt az adott felületre érkező fotonok száma (N). Egy elektront egy foton tud kiléptetni a fémből, amennyiben van hozzá elegendő energiája (lásd II.4. megjegyzés). A kilépéshez szükséges energia az ún. kilépési munka (W_{ki}). Így elektronkilépés csak akkor történhet, ha $hf \geq W_{ki}$. Tehát hiába érkezik időegységenként sok foton (N) a felületre, ha mindegyik csak a kilépési munkánál kevesebb energiával rendelkezik, elektronkilépés nem történik. **A kilépő elektron maximális kinetikus energiáját** ($E_{kin.}$) (az energiamegmaradás alapján) az **Einstein-formula** adja meg (1921, Nobel-díj):

$$E_{kin.} = hf - W_{ki} \quad (\text{II.37})$$

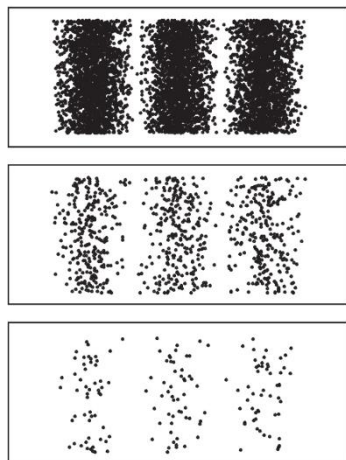
Formálisan kiszámíthatjuk a foton impulzusát is. Az I/1.5.2 részben már említett tömeg-energia reláció felhasználásával megadhatjuk a foton „tömegét” $m = hf/c^2$, és így az impulzusát:

$$p = mc = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{II.38})$$

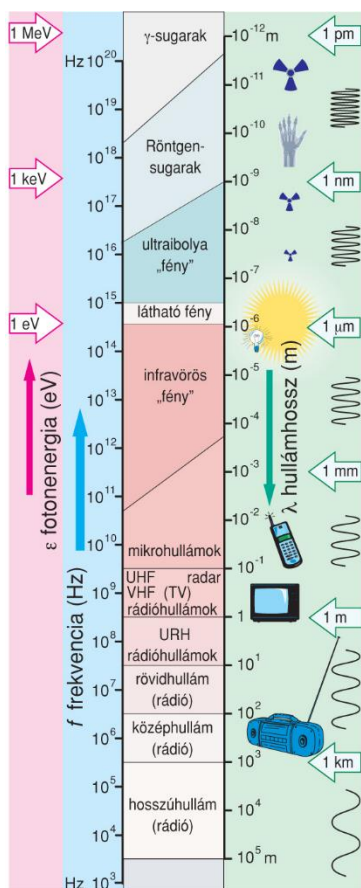
(Ugyanezt az összefüggést alkalmaztuk akkor is, amikor az elektronhoz hullámot rendeltünk az I/1.1.3 részben. Újra hangsúlyozzuk azonban, hogy a számolás csak formálisan végezhető el, mert a fotonnak hagyományos értelemben nincsen tömege.)

A „hullám vagy részecske” kérdés tehát mégsem dőlt el. Hogyan lehet ugyanis fotonokkal, részecskékkel interferenciát produkálni? Hasonló ellentmondással szembesültünk az I/1.1.3 részben az elektronokkal kapcsolatban. Megoldásképpen azt mondhatjuk, hogy az általános kvantumfizikai elv, a **kettősség (dualitás) érvényességét látjuk teljesülni a fény esetében is**. Terjedés közben hullámnak tekinthető, de amikor érzékeljük, felfogjuk, inkább részecskéhez hasonlít (lásd II.26. ábra). (Az elektromágneses sugárzás sikeres elméleti leírását a kvantumfizika egyik ága a kvantumelektrodinamika adta meg.)

A II.27. ábrán összefoglalót adunk a különböző elnevezésű elektromágneses sugárzásokról, melyek csak jellemző paramétereikben (hullámhossz, frekvencia, fotonenergia), továbbá keletkezésük módjában különböznek egymástól. Az egyes tartományok nem rendelkeznek éles határokkal és át is fedhetik egymást.



II.26. ábra. A kettős rés interferenciaképének kialakulása kevés valamint egyre több foton részvételével, fényérzékeny fotolemezen (vö. II.19. ábra; szimuláció)



II.27. ábra. Az elektromágneses sugárzás tartományai

II.5. idézet

Vajon nem téves-e minden olyan hipotézis, amely azt tételezi fel, hogy a fény nyomás vagy mozgás, amely valamely fluidumban terjed?

Vajon a fénysugarak nem kis testekből állanak-e, amelyeket a fénylő anyag kibocsát?

Newton: Optics (Simonyi Károly fordítása)

II.4. megjegyzés

Ma már tudjuk, hogy igen nagy fényintenzitások esetén, amit csak lézerekkel lehet előállítani, egyetlen foton hatását, több kisebb energiájú foton együttesen is előidézheti.

2.2. II/2.2 A fény keletkezése

A fény keletkezésének témaköre nem választható el a fény és az anyag kölcsönhatásától. Ennek ellenére, a jobb áttekinthetőség kedvéért, ebben a részben elsősorban a fénykibocsátással, a II/2.3 részben pedig a fényszóródás mellett a fényelnyeléssel és annak következményeivel foglalkozunk.

Általánosan fogalmazva azt mondhatjuk, hogy fény kétféleképpen keletkezhet: vagy **hőmérsékleti sugárzással**, vagy **lumineszcencia** útján. (Speciális körülmények között keletkezhet fény ezektől eltérő módon is, de azokkal nem foglalkozunk.)

2.2.1. II/2.2.1. Hőmérsékleti sugárzás

Naponta tapasztalhatjuk, hogy a környezetüknél magasabb hőmérsékletű testek sugároznak. Ezt például bőrünkkel érzékelhetjük a meleg kályha közelében, de szemünkkel is észlelhető az izzó parázs esetében. Régóta ismert az a tény is, hogy két különböző hőmérsékletű tárgyat egymás közelébe helyezve azok hőmérséklet-

különbsége akkor is csökken, ha a testek vákuumban vannak, pedig ilyenkor közöttük energiacsere sem hővezetés, sem hőáramlás formájában nem lehetséges. A magyarázat csak az lehet, hogy az egyik test által kisugárzott energiát a másik test elnyeli, és így létrejön a hőmérséklet-kiegyenlítődés.

Ezzel kapcsolatosan Constant Prévost (1787–1856) francia földtan tanár ismerte fel azt, hogy a sugárzás folyamatában nemcsak a hidegebb test kap energiát a melegebbtől, hanem fordítva is. Erre alapozta tételét, nevezetesen, hogy **minden test (legyen bármekkora is a hőmérséklete) környezetének hőfokától függetlenül sugároz.**

Ez a **hőmérsékleti sugárzás**, ami **mindig elektromágneses sugárzás**, és amely a kisugárzó test hőmérsékletétől függően akár **fényt** is tartalmazhat.

A sugárzó test jellemzésére a **kisugárzott felületi teljesítményt** (M) használhatjuk, amelynek számértéke azt adja meg, hogy 2π térszögben, egységnyi felület által mekkora a kisugárzott teljesítmény (lásd II/1.1.1. rész). A hőmérsékleti sugárzás esetében ez a mennyiség függ a test hőmérsékletétől, valamint a test egyéb sajátosságaitól, például a felület érdességétől, színétől, stb. Emiatt, illetve a testek sokfélesége miatt úgy tűnt, hogy további, minden testre érvényes, általános törvényszerűségek már nem is állapíthatók meg.

Ennek a vélekedésnek mintegy cáfolatául Gustav Robert Kirchhoff (1824– 1887) német fizikus – azon megfigyelés elemzése során, hogyha egy test „erősebben” sugároz, akkor ugyanezt a sugárzást jobban el is nyeli (lásd II.28. ábra) – egy egyszerű, de igen fontos általános törvényt fogalmazott meg. A testre jellemző elnyelés mértékét az **abszorpciós tényezővel** (α) adhatjuk meg, ami az időegységenként a test által elnyelt (E_a) és a testet érő összes (E_o) sugárzási energia aránya: $\alpha = E_a/E_o$. Mivel ez a mennyiség általában a sugárzás hullámhosszától (illetve spektrális összetételétől) is függ, ezért a különböző testek összehasonlításakor mindig csak egy adott hullámhossz körüli szűk hullámhossztartományt veszünk figyelembe. Ezt fejezi ki az α_λ , valamint az M_λ jelölés.

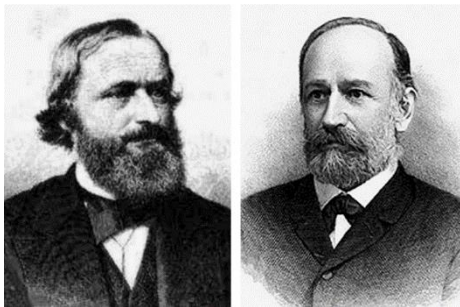
Ennek felhasználásával **Kirchhoff sugárzási törvénye**:

$$\frac{M_{\lambda,i}}{\alpha_{\lambda,i}} = \frac{M_{\lambda,j}}{\alpha_{\lambda,j}}, \quad (\text{II.39})$$

ahol az i, j indexek a különböző testeket jelentik. (Lásd még a II.5. megjegyzést.) Ez az összefüggés azt is kifejezi, hogy a fenti hányados már független a test anyagi minőségétől, és csak a hőmérséklettől függ, tehát a törvény **univerzális érvényű**. Az összefüggésnek van egy másik fontos következménye is. Eszerint ugyanis elméletileg létezik egy olyan ideális test, amelynek a kisugárzott felületi teljesítménye maximális, azaz nagyobb, mint minden más valódi testté (ugyanolyan feltételek mellett, vagyis ugyanazon a hőmérsékleten). Ez az ún. **abszolút fekete test**, amelyre $\alpha = 1$, tehát, ami minden ráeső sugárzási energiát elnyel (a hullámhossztól függetlenül). Ennek ismeretében a (II.39) összefüggés is átalakítható:

$$M_{\lambda,i} = \alpha_{\lambda,i} M_{\text{fekete},\lambda}, \quad (\text{II.40})$$

ahol $M_{\lambda,\text{fekete}}$ -vel az abszolút fekete test kisugárzott felületi teljesítményét jelöltük (az adott hullámhossz körüli szűk hullámhossztartományban). Így a továbbiakban elegendő az $M_{\lambda,\text{fekete}}$ mennyiség tanulmányozására szorítkoznunk, mert minden más test hőmérsékleti sugárzását az α_λ abszorpciós tényezővel súlyozva megkaphatjuk. Az abszolút fekete test hőmérsékleti sugárzását **feketetest-sugárzásnak** is szokás nevezni.



Kirchhoff és Stefan



Wien



II.28. ábra. A gyertyaláng képe és árnyképe. Kirchhoff sugárzási törvényének alapja: a gyertyaláng azokon a részeken világít jobban, ahol az áteső fényt jobban elnyeli (árnyék)

II.5. megjegyzés

Ehhez a törvényhez Kirchhoff úgy jutott el, hogy megmutatta, ha nem így lenne, akkor létezne olyan több testből álló rendszer, ahol hőközlés formájában energiát lehetne átvinni egy hidegebb testről egy melegebbre, ami ellentétes a termodinamika második főtételével (lásd III/3.3.3. rész).

2.2.2. II/2.2.2. A feketetest-sugárzás törvényei

„Abszolút” fekete test a valóságban nincsen. Azonban egy fémből készült zárt üreg, amelynek falára egy kis lyukat fúrunk, igen jó modellje a fekete testnek. Ugyanis a kis lyukon egyszer már bejutott sugárzás a falakon történő sokszoros diffúz visszaverődés következtében csak igen kis valószínűséggel tud kijönni onnan. Az alábbi törvények megfogalmazásához vezető kísérletek ilyen és ehhez hasonló próbatesteken folytak.

Jozef Stefan (1835–1893) szlovén fizikus volt az, aki fontos összefüggést talált a feketetest hőmérséklete, valamint a kisugárzott felületi teljesítmény között. John Tyndall (1820–1893) ír fizikus mérési eredményeit tanulmányozva arra a következtetésre jutott, hogy a fekete test által kisugárzott összteljesítmény a hőmérséklet negyedik hatványával arányos (lásd II.6a. megjegyzés).

Később Ludwig Eduard Boltzmann (1844–1906) osztrák fizikus elméleti úton ugyanerre az eredményre jutott. A törvény neve ezért **Stefan–Boltzmann-törvény**, mely szerint:

$$M_{\text{fekete}}(T) = \sigma T^4, \quad (\text{II.41})$$

ahol M_{fekete} itt is az abszolút fekete test kisugárzott felületi teljesítménye (nemcsak egy szűk, hanem a teljes hullámhossztartományban), T az abszolút hőmérséklete, $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ pedig az ún. Stefan–Boltzmann-állandó.

A feketetest sugárzással kapcsolatban felmerülő egyik legfontosabb kérdés az volt, hogy milyen ennek a sugárzásnak a színe (spektruma). (Mivel később egy külön részben (VI/3.) foglalkozunk a spektroszkópiai módszerekkel, ezért a spektrumokra vonatkozó alapismeretek ott találhatóak. Itt csak a legfontosabbak ismertetésére szorítkozunk.) Azt már korábban megfigyelték, hogy például a tűzbe tartott izzó vasrúd színe a

növekvő hőmérséklettel fokozatosan sötétvöröstől csaknem fehérig változik. Ebből arra lehetett következtetni, hogy a spektrum nagy valószínűséggel folytonos, és magas hőmérsékleten a fehér szín úgy jön létre, hogy a kezdeti vöröshöz egyre több sárga, zöld, valamint kék szín is keveredik. A pontosabb mérésekből (lásd II.29. ábra) az derült ki, hogy a spektrum valóban folytonos, de minden hőmérséklethez (T) tartozik egy jellegzetes hullámhossz (λ_{\max}), amelyen minden más hullámhosszhoz képest intenzívebb a sugárzás. Wilhelm Wien (1864–1928) német fizikus (Nobel-díj, 1911) elméleti úton jutott ahhoz az összefüggéshez, amely ezeket a mennyiségeket összekapcsolja:

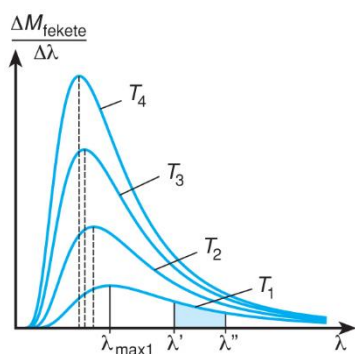
$$\lambda_{\max} T = \text{állandó} \quad (\text{II.42})$$

A két mennyiség tehát fordítottan arányos egymással, így λ_{\max} a hőmérséklet növekedésével a rövidebb hullámhosszak felé tolódik. Ez a **Wien-féle eltolódási törvény**, melyben az állandó értéke $2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$.

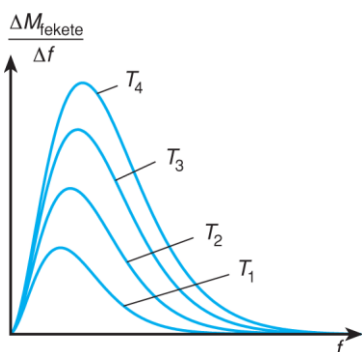
A törvény a $\lambda = c/f$ általános összefüggésből következôen (lásd a II/2.1.3. részt) úgy is felírható, hogy $f_{\max 1}/T_1 = f_{\max 2}/T_2$. Wien azt is megmutatta, hogy a spektrum a frekvencia függvényében (lásd II.30. ábra)

$$\frac{\Delta M_{\text{fekete}}}{\Delta f}(f) = f^3 \gamma \left(\frac{f}{T} \right) \quad (\text{II.43})$$

alakú, de az γ függvényt nem tudta helyesen meghatározni. Mint késôbb kiderült, a klasszikus fizika keretein belül erre nincs is lehetőség. A probléma sikeres megoldása a XX. századi fizika szimbolikus jelentôségû eredménye lett.



II.29. ábra. A feketetest sugárzás spektruma különböző hőmérsékleteken ($T_1 < T_2 < T_3 < T_4$). A szürke terület a T_1 hőmérsékleten, λ' és λ'' közötti hullámhossz intervallumban kisugárzott felületi teljesítményt adja meg. Az ábrán λ_{\max} eltolódása is jól megfigyelhető



II.30. ábra. A II.29. ábrán láthatóval megegyező spektrumsorozat, de a frekvencia függvényében ábrázolva.

II.6a. megjegyzés

Tyndall mérései szerint egy próbatest 1473 K-en időegységenként 11,7-szer több energiát sugárzott, mint 798 K-en. Stefan azt vette észre, hogy:

$$\left(\frac{1473}{798} \right)^4 \approx 11,7$$

és ebből következtetett az említett összefüggésre.

Csak érdekességképpen említjük, hogy később kiderült, Tyndall mérései hibásak voltak. Addigra azonban a helyes összefüggés már megszületett.

2.2.3. II/2.2.3. A Planck-féle sugárzási törvény

II.7a. megjegyzés

A hőmérsékleti sugárzás keletkezéséről a XIX. végére kialakult kvalitatív kép

Az anyagot alkotó pozitív és negatív töltésű részecskék rendezetlen hőmozgása mindenféle frekvenciájú rezgések megjelenését eredményezi. A rezgő töltések (mint apró oszcillátorok vagy kis rádióadók) elektromágneses hullámokat bocsátanak ki, amelyekben mindenféle frekvenciájú energiakibocsátás fellép. Megfordítva, az anyagra érkező sugárzás hatására a megfelelő sajátfrekvenciájú oszcillátorok rezonancia folytán erős rezgésbe jönnek, tehát a sugárzásból energiát nyelnek el, amely vagy ismét kibocsátódik, vagy ütközések útján hővé alakul.

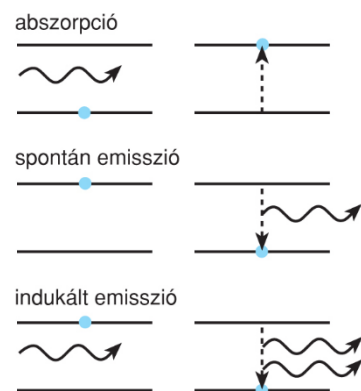
A századfordulóra elfogadottá vált kvalitatív kép alapján (lásd II.7a. megjegyzés) a klasszikus fizika meglévő törvényei szerint a fizikusok nem találtak választ arra a kérdésre, hogyan kell az energiát szétosztani a sugárzást okozó rezgő töltések (oszcillátorok) között ahhoz, hogy az elméleti leírás a kísérletekkel összhangban legyen. A klasszikus leírásmódban az energia folytonosan szétosztható mennyiség. Max Planck 1900-ban mégis azzal a meglepő ötlettel állt elő, hogy az oszcillátorok az **energiát** csak **diszkrét adagokban** vehetik föl és adhatják le. Egy adott f frekvenciájú oszcillátor esetén a legkisebb energia adag az ún. hatáskvantum, ami hf -vel egyenlő, ahol h a Planck-állandó. Plancknak ez a gondolata jelentette a **kvantumfizika kezdetét**, amely nemcsak a természettudományokat, de az egész társadalmat, bátran mondhatjuk, az egész világot átalakította. A klasszikus fizikán nevelkedett Planck azonban maga is kételkedett eredményében (lásd II.6. idézet).

Mivel Planck számításai nagyon bonyolultak, ezért itt a probléma megoldására Einstein 1916-ból származó sokkal egyszerűbb gondolatmenetét mutatjuk be. Ez azért is célszerű, mert segítségével a lézerek működését könnyebben megérthetjük.

Célunk tehát a feketetest sugárzás spektrumának, azaz a

$$\frac{\Delta M_{\text{fekete}}}{\Delta f}(f, T) = M'(f, T)$$

illetve, (mivel a számolás közben kisugárzásról és elnyelésről is szó esik) az ezzel arányos $J'_E(f, T)$ (relatív energiaáram-sűrűség) függvény meghatározása. (Ezt a mennyiséget a jobb áttekinthetőség kedvéért itt röviden csak J' -vel fogjuk jelölni ($J'_E(f, T) ? J'$)). Feltételünk pedig az, hogy az azonos atomokból álló **feketetest**, ami minden ráeső sugárzást elnyel, saját sugárzásával **egyensúlyban van**. Einstein egyszerűsített modelljében csak két kiválasztott energiaszintet vizsgált, melyekre $E_2 - E_1 = hf$. Ebben a rendszerben a következő elemi folyamatok fordulhatnak elő (lásd II.31. ábra).



II.31. ábra. Einstein két energiaszintű modelljében előforduló elemi folyamatok kezdeti és végállapota

• **Abszorpció:** az atom elnyel egy hf energiájú fotont, és az alacsonyabb E_1 energiaszintről a magasabb E_2 energiaszintre kerül. Az esemény bekövetkezésének valószínűségét B_{12} -vel jelöljük.

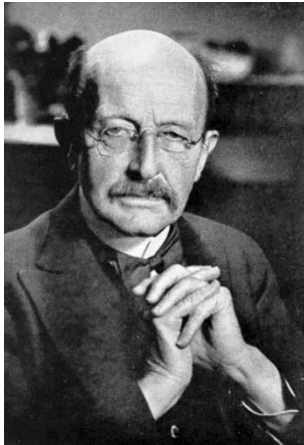
• **Spontán emisszió:** a magasabb E_2 energiaszinten lévő atom minden **külső behatás nélkül** visszatér az alacsonyabb E_1 energiaszintre, miközben kibocsát egy hf energiájú fotont. Az ehhez tartozó valószínűséget A -val jelöljük.

• **Indukált emisszió:** a magasabb E_2 energiaszinten lévő atom **egy hf energiájú foton hatására**, hf energiájú foton kibocsátása mellett visszatér az alacsonyabb E_1 energiaszintre. Az ehhez tartozó valószínűség B_{21} . (Az A , B_{12} , B_{21} számok az ún. Einstein-együtthatók.)

II.6. idézet

Ezért rövidesen elkezdtem próbálkozni, hogy a hatáskvantumot valamiképpen beillessem a klasszikus elmélet kereteibe, de a hatáskvantum minden ilyen kísérletnek makacsul ellenszegült.

Max Planck: Válogatott tanulmányok (Bíró Gábor fordítása)



Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858–1947) német fizikus (Nobel-díj, 1918)

A Δt idő alatt bekövetkező abszorpciók száma (ΔN_a) az időtartamon kívül egyenesen arányos az E_1 szinten tartózkodó atomok számával (N_1), a beérkező fotonok számával, azaz a relatív energiaáram-sűrűséggel (J'), valamint az elemi esemény valószínűségével (B_{12}) tehát:

$$\Delta N_a = K_1 \cdot B_{12} N_1 J' \Delta t, \quad (\text{II.44})$$

ahol K_1 az arányossági tényező. Ehhez hasonlóan a Δt idő alatt bekövetkező spontán emissziók száma (ΔN_{se}):

$$\Delta N_{se} = K_1 \cdot A N_2 \Delta t. \quad (\text{II.45})$$

(Ez természetesen független J' -től, és N_2 -vel az E_2 szinten tartózkodó atomok számát jelöltük.) A Δt idő alatt bekövetkező indukált emissziók száma (ΔN_{ie}) pedig:

$$\Delta N_{ie} = K_1 \cdot B_{21} N_2 J' \Delta t. \quad (\text{II.46})$$

Egyensúly esetén egyrészt az időegységenként bekövetkező abszorpciók száma megegyezik az (indukált + spontán) emissziók számával (lásd II.32. ábra):

$$B_{12} N_1 J' = B_{21} N_2 J' + A N_2 \quad (\text{II.47})$$

másrészt termikus egyensúlyban az atomok számarányát a Boltzmann-eloszlás szabja meg (lásd I/3.1. rész), így:

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{\frac{E_2 - E_1}{kT}} = e^{\frac{hf}{kT}}. \quad (\text{II.48})$$

A (II.47) összefüggést N_2 -vel elosztva, majd (II.48)-et behelyettesítve, a következő eredményre jutunk:

$$B_{12}e^{\frac{hf}{kT}}J' = B_{21}J' + A. \quad (\text{II.49})$$

Ebből kisebb átalakítás után $J' = J'_E(f, T)$ kifejezhető:

$$J'_E(f, T) = \frac{A}{B_{12}e^{\frac{hf}{kT}} - B_{21}} \quad (\text{II.50})$$

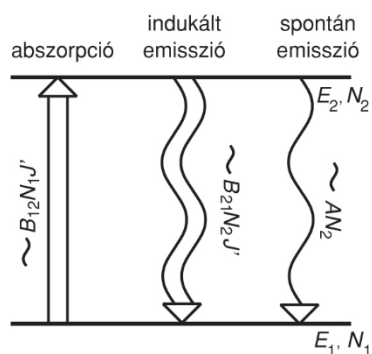
Ha a tapasztalattal összhangban azt várjuk, hogy a hőmérséklet növekedésével a relatív energiaáram-sűrűség is mindig növekedjék, akkor a

$$B_{12} = B_{21} = B \quad (\text{II.51})$$

egyenlőségnek teljesülnie kell, hiszen egyébként $T = \infty$ esetén $J'_E(f, T)$ nem végtelenhez, hanem az $A/(B_{12} - B_{21})$ véges értékhez tartana. Wien elgondolásával (II.43) pedig akkor kerülünk összhangba, ha $A/B \sim f^3$, azaz

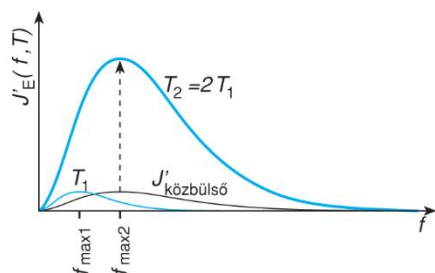
$$J'_E(f, T) \sim \frac{f^3}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1} \quad (\text{II.52})$$

Ily módon a (II.50) illetve (II.52) összefüggés a II.30. ábra görbéit adja vissza, tehát belőle a Wien-féle eltolódási törvény, valamint (a teljes görbe alatti területek révén) a Stefan–Boltzmann-törvény is következik (lásd „A Wien-törvény és a Stefan–Boltzmann-törvény származtatása a (II.52) összefüggésből”).



II.32. ábra. Az átmenetek számával arányos mennyiségek, melyek egyensúly esetén, a kétféle irányban (abszorpció, emisszió) megegyeznek egymással.

A Wien-törvény és a Stefan–Boltzmann-törvény származtatása a (II.52) összefüggésből



Induljunk ki a T_1 hőmérsékletű test emissziós spektrumából. Végezzünk el ezen egy kétszeres nyújtási transzformációt a f tengely mentén. ($J'_{\text{közbulűs}}$ egy tetszőleges f helyen felvett függvényértéke akkora, mint amekkora a kiindulási függvénynek $f/2$ helyen volt.) A transzformáció eredményeként (II.52 felhasználásával) azt kapjuk, hogy

$$J'_{\text{közbulűs}} = J'\left(\frac{f}{2}\right) \sim \frac{(f/2)^3}{e^{\frac{h(f/2)}{kT}} - 1} = \frac{1}{8} \frac{f^3}{e^{\frac{hf}{2kT}} - 1}$$

Az így kapott összefüggést 8-cal megszorozva visszakapjuk a spektrumot (II.52 összefüggés) azzal a különbséggel, hogy benne a hőmérséklet (T_2) a transzformáció előttinek éppen kétszerese: $T_2 = 2T_1$. A kétszeres nyújtás miatt $f_{\max,2} = 2f_{\max,1}$, tehát

$$f_{\max,1}/T_1 = f_{\max,2}/T_2,$$

ami a Wien-féle eltolódási törvény egyik lehetséges felírása. A kétszeres nyújtás értelemszerűen a görbe alatti területet is megduplázza, így a 8-cal való szorzás után az eredeti terület 16-szorosát kapjuk. A kétszeres hőmérsékleten tehát tizenhatszor akkora a teljes frekvenciatartományban kisugárzott teljesítmény ($2^4 = 16$), ami nem más, mint a Stefan–Boltzmann-törvény egyszerű megfogalmazása.

2.2.4. II/2.2.4. Lumineszcencia

Lumineszcenciával bővebben (lásd VI/3.3.) majd az „Optikai spektroszkópiai módszerek” című (VI/3.) részben foglalkozunk, itt csak a **fény másik lehetséges keletkezési módjaként** szerepel. Mivel hőmérsékleti sugárzást minden test kibocsát, (bár például szobahőmérsékletű tárgyak esetén ez nem jelent észlelhető fénykibocsátást,) ezért **lumineszcencián** azt a sugárzást értjük, amelyet a testek hőmérsékleti sugárzásukon felül, **többletsugárzásként bocsátanak ki**. Az ilyen típusú fénykibocsátást, megkülönböztetésül a hőmérsékleti sugárzástól, **hideg fénynek** is hívják. A lumineszkáló anyagok a termikus fényemissziótól függetlenül valamilyen külső gerjesztés hatására egyes hullámhosszakon vagy hullámhossztartományokban bocsátják ki a többletsugárzást. Így a lumineszcencia anyag lényegében energiaátalakítást végez. A lumineszcencia három elemi lépésből áll:

- a külső energia elnyelése,
- gerjesztés,
- az energia fény formájában történő leadása.

A folyamatot tehát mindig gerjesztett állapotú elektronok idézik elő. A test a gerjesztésekhez szükséges többletenergiát vagy kívülről kapja, vagy a test belsejében lejátszódó folyamat, például kémiai reakció szolgáltatja. Ennek megfelelően megkülönböztetünk foto-, röntgen-, katód-, kemo-, termo-, stb. lumineszcenciát. A gerjesztő energia tehát származhat ultraibolya vagy fényfotonok elnyeléséből, röntgen- vagy gamma-sugárzás fotonjai által keltett ionizációs folyamatok következményeként, de egy vákuumcső katódjából kilépő gyorsított elektronoktól is. Kemo-, illetve biolumineszcenciára példa a szentjánosbogár világítása, a termolumineszcencia pedig (az izzásnál kisebb hőmérsékleten) a hőmérséklet-növekedés miatt bekövetkező fénykibocsátást jelent.

A lumineszcenciának két alapfajtaját különböztetjük meg. Hétköznapi értelemben **fluoreszcenciáról** akkor beszélünk, ha a gerjesztés megszűnte után a fénykibocsátás is „azonnal” megszűnik (igen rövid idő alatt lecseng), **foszforeszcenciáról** pedig akkor esik szó, ha a fénykibocsátás a gerjesztés megszűnte után is tart (azaz csak lassan cseng le). Kicsit pontosabban a fluoreszcencia a gerjesztés megszűnése után 10^{-8} s-on belül már biztosan kioltódik, a foszforeszcencia lefutási ideje (utánvilágítása) pedig ennél akár több nagyságrenddel is hosszabb lehet (a néhány perces időtartamokat is elérheti).

A következő részben még szó esik a **gerjesztett állapot élettartamáról** (τ -ról) is, amit a radioaktív anyagok jellemzésére használt átlagos élettartamhoz hasonlóan adhatunk meg (lásd II/3.2.2.). Eszerint, ha a gerjesztés után N_0 részecske került gerjesztett állapotba, akkor t idő elteltével már csak $N(t) = N_0 e^{-t/\tau}$ marad ott. Így, ha az alapállapotba történő átmenet „megengedett”, akkor a gerjesztett állapot élettartama (τ) rövid (fluoreszcencia), ha pedig „tiltott” (kis valószínűségű), akkor hosszú (foszforeszcencia). Ez az alapja annak a megfigyelésnek, hogy foszforeszcencia esetén a fénykibocsátás a gerjesztés megszűnte után is tart.

2.2.5. II/2.2.5. A fényerősítés gondolata

II.6. megjegyzés

Az (II.50) összefüggés szerint a relatív energiaáram-sűrűség:

$$J'_E(f, T) = \frac{A}{B_{12} e^{\frac{hf}{kT}} - B_{21}}$$

Mivel a tapasztalattal összhangban azt várjuk, hogy a hőmérséklet korlátlan növekedésével a relatív energiaáram-sűrűség is végtelenhez tartson, ezért B_{21} nem lehet nulla, tehát az indukált emisszió léte ezzel elméleti bizonyítást nyert.

Ez a gondolat már 1916-ban felmerült, amikor Einstein megmutatta, hogy az anyag és az elektromágneses sugárzás közötti egyensúly megvalósulásához egy akkor még fel nem fedezett folyamat, az **indukált emisszió** létezése szükséges (lásd II/2.2.3. és II.6. megjegyzés). Az indukált és spontán emisszió közötti egyik legfontosabb különbség a fázissal kapcsolatos. Az indukált emisszió **rendezett, koherens folyamat**, míg a spontán emisszió rendezetlen inkohereus folyamat (lásd II/2.1.4.). Indukált emissziónál az új hullám ugyanolyan fázisban és ugyanolyan irányban bocsátódik ki, mint az őt kiváltó hullám, így az erősítés feltétele adva van. 45 évvel később ez a gondolat vezetett a lézerek megvalósításához.

II.1. emlékeztető

$$\Delta N_{ic} = K_1 \cdot B_{21} N_2 J' \Delta t \quad (\text{II.46})$$

$$\Delta N_a = K_1 \cdot B_{12} N_1 J' \Delta t \quad (\text{II.44})$$

$$B_{12} = B_{21} = B \quad (\text{II.51})$$

$$\Delta N_{se} = K_1 \cdot A N_2 \Delta t \quad (\text{II.45})$$

II.2. emlékeztető

A hasonló egyenlet és annak megoldása:

$$\Delta J_E = -\mu \Delta x J_E \quad (\text{II.10})$$

$$J_{E,ki} = J_{E,ki} e^{-\mu x} \quad (\text{II.11})$$

A probléma csak az, hogy az indukált emissziót kiváltó hullám el is nyelődhet az anyagban. Vizsgáljuk meg ezért, hogy a fény hatására bekövetkező két folyamat (az indukált emisszió és az abszorpció) versengése milyen végeredményekhez vezethet. (A spontán emisszióról egyelőre megfeledezhetünk, mert az a besugárzó fénytől függetlenül történik, és a később vizsgálandó hosszú élettartamú állapotok esetében amúgy is kicsi az átmenet valószínűsége, $A = 1/\tau$.)

Továbbra is Einstein egyszerűsített, két-energiaszintű modelljét használjuk, amelyben $E_2 - E_1 = hf$. A (II.46) és (II.44) összefüggések (ilyen sorrendben) megadják a Δt idő alatt bekövetkező indukált emissziók (ΔN_{ic}) és abszorpciók (ΔN_a) számát (lásd II.1 emlékeztető). Mivel tudjuk, hogy egyetlen átmenethez emisszió esetén hf , abszorpció esetén $-hf$, energia tartozik, ezért az előbbieket felhasználásával felírható az energiamérleg, amely a relatív energiaáram-sűrűség (pozitív vagy negatív) megváltozásával arányos:

$$hf \cdot K_1 \cdot B(N_2 - N_1) J' \Delta t = K_2 \cdot \Delta J', \quad (\text{II.53})$$

ahol K_2 egy másik arányossági tényező.

Ez az időbeli folyamatot leíró összefüggés átalakítható úgy, hogy a sugárzásnak az anyagba való behatolását jellemezze. Tudjuk ugyanis, hogy a c sebességgel terjedő sugárzás Δt idő alatt Δx utat tesz meg, tehát $\Delta t = \Delta x/c$. Így, ha ezt behelyettesítjük a (II.53) összefüggésbe és az ott szereplő állandó mennyiségeket (h, f, K_1, B, K_2), valamint c -t egyetlen K állandóban összefoglaljuk, akkor a következő egyenlethez jutunk:

$$\Delta J' = K \cdot (N_2 - N_1) J' \Delta x, \quad (\text{II.54})$$

ahol $K = (hfK_1\beta)/(K_2c)$. Ehhez nagyon hasonló egyenletet (II.10) viszont már megoldottunk a II/1.1.3. részben (lásd II.2. emlékeztető). Amennyiben tehát a $K \cdot (N_2 - N_1)$ együtthatót $-\mu$ -nek feleltetjük meg, akkor a megoldást a

$$J' = J'_0 e^{-\mu x} \quad (\text{II.55})$$

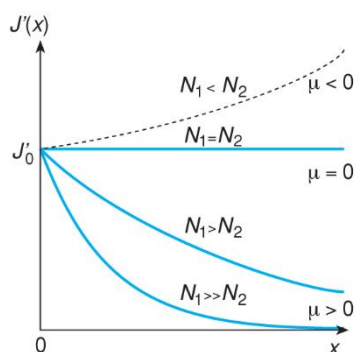
függvény adja meg, ahol most

$$\mu = K \cdot (N_1 - N_2). \quad (\text{II.56})$$

Első ránézésre úgy tűnik, hogy a (II.55) összefüggés nem más, mint a sugárzás intenzitásának gyengülési törvénye. Vizsgáljuk meg azonban, hogy **hogyan befolyásolja μ értékét az E_1 és E_2 energiaszint betöltöttsége** (N_1, N_2). A Boltzmann-eloszlás szerint: $(N_2/N_1) = e^{-(hf)/(kT)}$, ami szobahőmérsékleten ($\approx 20^\circ\text{C} = 293\text{ K}$), a látható színek tartomány közepén ($\approx 550\text{ nm}$) körülbelül 10^{-40} -nel egyenlő. Ez azt jelenti, hogy több Avogadro-számnyi atom esetében is csak az alsó szint (E_1) van betöltve, és egyetlen atom sincs a magasabb energiaszinten (E_2 -n). Sokkal magasabb hőmérsékleteken ez az arány jelentősen nő, például a Nap 6000 K -es hőmérsékletén már körülbelül $10^{-2} = 0,01$, de akár mekkora hőmérsékleten sem haladhatja meg a $0,5$ -et, ami azt jelenti, hogy a két szint egyformán van betöltve.

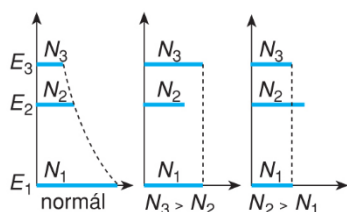
Vegyük ezután sorra a lehetőségeket (II.33. ábra):

1. $N_1 \gg N_2$. Bár ha abszorpció megy végbe, az N_1, N_2 betöltöttségek kissé megváltozhatnak, gyenge forrás és nagyon sok atom esetén ez a hatás elhanyagolható. Ilyenkor μ a hagyományos értelemben vett gyengítési „állandó”.
2. $N_1 > N_2$. Az N_1, N_2 betöltöttségek kismértékű megváltozása fokozható, ha kis mennyiségű atomot nagy intenzitású fénnyel világítunk meg. Ilyen esetekben μ értéke csökken.
3. $N_1 = N_2$. Az előbbi folyamat elérheti a **telítődést**, ilyenkor az időegységre jutó abszorpciók és emissziók száma megegyezik és az anyag átlátszóvá válik az adott frekvencián, tehát $\mu = 0$.
4. $N_1 < N_2$. Ez az ún. **fordított betöltöttség** (inverz betöltés vagy **populáció-inverzió**), ami természetesen ellentmond a Boltzmann-eloszlásnak, és ezért az eredeti két energiaszintű modellrendszerünkben nem is valósulhat meg. Ilyenkor azonban $\mu < 0$ lenne, tehát a (II.55) összefüggés szerint az energiaáram-sűrűség a távolsággal növekedne, azaz **több fény jönne ki az anyagból, mint amennyi belement.**



II.33. ábra. A sugárzás intenzitásának változása az anyagba való behatolás közben. A „gyengítési” együtthatót a betöltöttségek (N_1, N_2) szabják meg:

A fordított betöltöttség megvalósításához legalább három energiaszintre van szükség (II.34. ábra). Ha az atomokat olyan intenzív fénnyel világítjuk meg, amelynek f^* frekvenciájára teljesül a $hf^* = E_3 - E_1$ feltétel, akkor e két állapot (E_1, E_3) között telítődés jöhet létre, tehát $N_3 = N_1$. Ha ez a helyzet előállt, akkor vagy az E_3 és E_2 energiájú, vagy az E_2 és E_1 energiájú állapotok között létrejön a fordított betöltöttség (inverzió). Hogy a két eset közül melyik valósul meg, az az (E_3, E_2) állapotok (τ_3, τ_2) élettartamától függ. Ha $\tau_3 > \tau_2$, akkor az előbbi ($N_3 > N_2$), fordított esetben pedig az utóbbi ($N_2 > N_1$), jön létre. Az energiaszintek populációjának megváltoztatására szolgáló ilyen energiabeviteli módszert **optikai pumpálásnak** nevezzük. Természetesen fordított betöltöttség nemcsak optikai úton, hanem másfajta energiabevittel is megvalósítható. A fényerősítés gondolatata vezetett a lézerek kifejlesztéséhez.

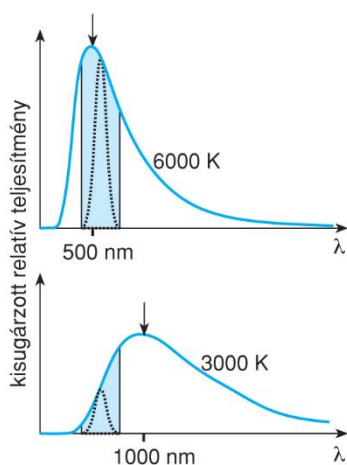


II.34. ábra. A normál és fordított betöltöttség megvalósulásai három energiaszintű rendszerben. (A normál esetet vö. a Boltzmann-eloszlás I.23. ábrájával I/3.1.1. rész.)

2.2.6. II/2.2.6. Fényforrások, fotometria

A hétköznapi életben és az orvosi gyakorlatban is nagyon sok különféle fényforrást használunk. A fény kétféle keletkezési módja szerint (lásd II/2.2) megkülönböztetünk **hőmérsékleti sugárzókat** és **lumineszcencia-sugárzókat**. E második csoportba tartoznak a lézerek is, de fontosságukra való tekintettel külön részben foglalkozunk velük (lásd II/2.2.7.).

Legfontosabb természetes fényforrásunk a **Nap**, körülbelül 6000 K hőmérsékletű feketetest-sugárzónak tekinthető. A Wien-féle eltolódási törvényből kiszámítható, hogy ezen a hőmérsékleten körülbelül 500 nm-nél van a sugárzásnak maximuma. Ez nagyjából megfelel annak a hullámhossznak, amelyre szemünk a legérzékenyebb (lásd II.35. ábra). A spektrum alapján az is megállapítható, hogy a teljes kisugárzott teljesítménynek - még ebben az optimális esetben is – csak kevesebb mint 40%-a esik a látható tartományba.



II.35. ábra. A látható tartomány aránya (kék területek) a 6000 K és 3000 K hőmérsékletű feketetest-sugárzó esetében. (A két grafikon egymáshoz képest szándékosan torzított, a teljes görbe alatti területek aránya ugyanis 16:1! Az ábrán pontozott vonallal a szem körülbelüli színérzékenységet is feltüntettük.)

Ilyen magas hőmérsékletű mesterséges fényforrás előállítására igen körülményes. A könnyen elérhető, körülbelül 3000 K hőmérsékleten viszont a fenti arány már 10%-nál is kevesebb (például közönséges volfrámizzó esetén). Ha ehhez még azt is hozzávesszük, hogy a látható tartomány széleihez közeledve az emberi szem érzékenysége erősen csökken (lásd II.35. ábra és IV/2.2.7. rész), azt kapjuk, hogy a kisugárzott teljesítménynek csupán körülbelül 3%-át érzékelhetjük fényként.

Ilyen és ehhez hasonló problémák kapcsán felvetődött annak az igénye, hogy a radiometriai alapfogalmaknak megfelelő mennyiségeket (lásd II/1.1.1. rész) a fényre vonatkozóan külön is definiáljuk. A **fotometriai mennyiségek** definíciójának alapjául az „**egygyertyányi fény**” szolgál. (Napjainkban ugyan gyertya helyett stabilabb standardizált fényforrásokat használnak referenciaként, de ez a definíciókat nem érinti.)

A wattokban kifejezett energiaáram-erősség (I_E) mintájára adhatjuk meg a **fényáramot** vagy **fényteljesítményt** (Φ). Ennek mértékegysége a **lumen** (jelölése lm), ami egy gyertya egységnyi térszögben emittált fénye. Tehát egy gyertya által kibocsátott összes fényteljesítmény 4π lm.

A besugárzott felületi teljesítmény párja a fotometriában a **megvilágítás** ($E = \Delta\Phi/\Delta A$). A definícióból következik a mértékegysége: $1 \text{ (lm/m}^2\text{)} = 1 \text{ lux}$. Egy lux a megvilágítás egy közönséges gyertyától egy méter távolságra (vízszintes irányban) elhelyezett, a fénysugarakra merőleges felületen. A II.1. táblázatban néhány tipikus fényáram- és megvilágítási adatot tüntettünk fel.

A közönséges volfrámizzók adataiból (II.1. táblázat) az derül ki, hogy ezek **fényhasznosítása** a legjobb esetben is csak körülbelül 13,5 lm/W. Ez messze elmarad az elvileg maximálisan lehetséges 683 lm/W értéktől (lásd IV/2.2.5.). Igaz, hogy ilyen nagy fényhasznosítás viszont csak az 555 nm hullámhosszúságú (zöld) fény esetében érhető el. Így a minél jobb fényhasznosítás és a Napéhoz hasonló spektrum elérése elvileg is

ellentmond egymásnak, pedig ez lenne az ideális (világítási célokra tervezett) fényforrással szemben támasztott két legfontosabb alapkövetelmény.

A **volfrámizzók** esetében a hőmérséklet növelésével elérhető, hogy a fényforrás az említett mindkét feltételeknek jobban megfeleljen. A volfrám igen magas olvadáspontja (3683 K) miatt használható egyáltalán világítási célokra. A **vákuumizzólámpa** esetében az izzószáll már 3000 K hőmérséklet alatt is erősen párolog. Ennek két káros következménye is van: egyrészt az üvegburára történő kicsapódás rontja a fénykibocsátást, másrészt hamar kiég a lámpa. A megoldás a gáztöltésű (például kripton) izzó.

Külön kell megemlítenünk a **halogénizzókat**, amelyeknek gáztöltése meghatározott mennyiségben jódot vagy brómot tartalmaz. Ennek az a kedvező hatása, hogy az ilyen izzóban magasabb hőmérsékletet lehet elérni. Az izzószállról elpárolgó volfrámatomok ugyanis reakcióba lépnek a halogéntöltéssel, majd az izzószállon redukálódva (hő okozta disszociáció miatt) lecsapódnak az izzószállra. Ráadásul, ahol vékonyabb, és emiatt melegebb a szál, ott nagyobb mértékű a visszaalakulás. A szál így lassabban vékonyodik.

Speciális „fényforrásnak” tekinthetők az **infralámpák**. Ezek olyan volfrámizzók, amelyekben a kívánt hullámhossztartományokat a Wien-féle eltolódási törvény alapján a hőmérséklettel, valamint megfelelő szűrőkkel lehet beállítani.

A lumineszcenciasugárzók közül elsőként a **fémgőzlámpákat** említjük. A fémgőz, leggyakrabban higanygőz üvegcsőbe van zárva, amelyre fém elektródákon keresztül feszültséget kapcsolunk. A bekapcsoláskor felizzított elektródákból elektronok lépnek ki, és ez megindítja az elektromos kisülést. A felgyorsult töltések ütközéssel gerjesztik a fémgőz atomjainak elektronjait, amelyek lumineszcencia-fényt bocsátanak ki. A kisnyomású (1-100 Pa) fémgőzlámpák spektruma a lumineszcenciának megfelelően vonalas.

Bár nem igazi fényforrás, orvosi szempontból mégis igen nagy jelentőségű a kvarcüvegből készült kisnyomású higanygőzlámpa, az ún. **germicidlámpa**. Az emittált teljesítmény jelentős része ugyanis egyetlen hullámhosszon, 254 nm-en kerül kibocsátásra (ezt csak a kvarcüveg engedi át), ami gyakorlatilag a DNS abszorpciós tartományának közepére esik, ezért kiválóan alkalmas a mikroorganizmusok elpusztítására, csíraszám csökkentésre.

A **fénycsővek** ugyancsak kisnyomású higanygőzlámpák azzal a különbséggel, hogy nem kvarcüvegből készülnek és a cső belső felülete lumineszkáló anyaggal, ún. fényporral van bevonva. A higanygőz 254 nm-es UV sugárzása gerjeszti a fényport, amely látható sugárzást bocsát ki. A „maradék” UV sugárzás nem károsítja a felhasználót, mivel azt az üvegbura elnyeli. A fénypor összetételének változtatásával (a megfelelő spektrumvonalak kiválasztásával) változtatható a kisugárzott fény színe. A fénycsővek fényhasznosítása nagyon jó, körülbelül 5-6-szor annyi látható fényt állíthatunk elő velük, mint a legjobb izzólámpákkal. Kompakt kivitelben izzólámpák helyett is alkalmazzák.

Hasonló módon készülnek a terápiás célokra kifejlesztett UV-lámpák, valamint a szoláriumlámpák is.

Az **ívlámpák** szintén kisülési csövek, amelyekben a fényt elsősorban az ív nagy hőmérsékletű plazmája sugározza ki. A plazma nagymértékben ionizált gáz, amely semleges molekulákból, elektronokból, pozitív és negatív ionokból áll, de kifelé semleges. Az ívlámpák leggyakrabban igen nagy nyomású higany-, xenon- vagy nátriumlámpák. Spektrumukban egy folytonos háttérrel jelennek meg a töltőgázra jellemző intenzív lumineszcencia-vonalak.

A **világító diódák** (vagy a Light Emitting Diode angol elnevezésből alkotott betűszó szerint LED-ek) fénykibocsátása azon alapul, hogy egy *p*- és egy *n*- típusú félvezető átmenetén (lásd az I/3.3.4. részt) az elektronok és lyukak egyesülnek (rekombinálódnak). Mivel a különálló elektronnak és lyuknak nagyobb az energiája, mint az elektronnal betöltött lyuknak, ezért az energiakülönbség fény formájában kisugárzódhat. A világító dióda eléggé monokromatikus fényt emittál ($\Delta\lambda < 50$ nm). Kis méretük és egyszerű kezelhetőségük miatt hagyományos fényforrások helyettesítésére igen sok területen alkalmazzák őket.

2.1. táblázat - II.1. táblázat. Néhány fényáram és megvilágítás érték

Közönséges wolfrámizzók adatai	
Energiaáram erősség (W)	Fényáram (lm)

60	710
75	940
100	1340
Megvilágítási adatok	
Körülmények	Megvilágítás (lux)
Holdtöltekor szabadban	néhány tized
Huzamos olvasáshoz és íráshoz ajánlott	100
Átlagos nappali fényben	néhány ezer
Orvosi műtétekhez ajánlott	néhányszor 10^4
Nyári vakító napsütésben	10^5

2.2.7. II/2.2.7. Lézerek

II.7. megjegyzés

A lézer és az elektromos szinuszoszcillátor közötti hasonlóság

Az elektromágneses hullámok közös tulajdonságaira, illetve a rádióadókra gondolva azt is mondhatjuk, hogy a lézer egy olyan „adó”, oszcillátor (rezgéseltető), ami meghatározott tulajdonságú elektromágneses hullámot (esetünkben fényt) bocsát ki. Így a lézer mint fényerősítő, illetve mint oszcillátor ugyanolyan kapcsolatban van egymással, mint az elektromos erősítő, illetve az (elektromos) szinuszoszcillátor (lásd VII/1.4.3.). Ha tehát az erősítés gondolatából akarunk kiindulni, akkor a lézer nem más, mint egy „begerjesztett” pozitív visszacsatolású erősítő. Ennek megvalósításához elvileg ugyanúgy kell eljárunk, ahogyan egy elektromos erősítőtől oszcillátort készítettünk (VII/1.7.). Nevezetesen az erősítő kimenőteljesítményének egy részét pozitívan vissza kell csatolni, azaz azonos fázisban vissza kell juttatni a „bemenetre”, amitől (megfelelő paraméterek esetén) az erősítő rezgésbe jön, tehát oszcillálni kezd („begerjed”). Ha ennek az oszcillátornak előre meghatározott frekvencián kell rezegnie, akkor még egy rezonátort kell közbeiktatnunk.

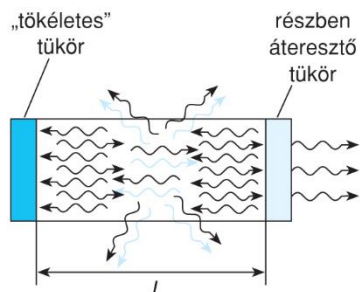
A lézerek a fényforrások egy speciális csoportját képviselik, amelyek ma már igen elterjedtek a hétköznapi életben és az orvosi biológiai gyakorlatban egyaránt. A lézer, vagy eredeti betűszó alakban LASER, elnevezés az angol „Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation” („fényerősítés indukált emisszió révén”) kifejezésből származik. Ebből a meghatározásból az következne, hogy a lézer olyan rendszer, amely a fényt indukált emisszió útján erősíti, azaz „csak” **erősítő** (lásd II/2.2.5. rész). Ezzel szemben a lézer nemcsak fényt erősít, hanem fényt állít elő, azaz egyfajta **fényforrás** (lásd II.7. megjegyzés).

A lézer vagy precízebben lézeroszcillátor készítéséhez négy dolog szükséges: megfelelő **lézeranyag**, intenzív elektrongerjesztés vagy **pumpálás** (külső forrásból történő energiabevitel), pozitív **visszacsatolás** és optikai **rezonátor**.

Vegyük sorra ezeket. A lézeranyag lehet gáz, folyadék vagy szilárdtest, de lényeges, hogy legalább 3 energianívós rendszer legyen. A működés alapfeltétele ugyanis a populáció-inverzió, ami csak ilyen rendszerben valósítható meg (lásd II/2.2.5. rész). A felső energiaszintek közül legalább egynek hosszú élettartamának (τ) kell lennie. Ebben az esetben ugyanis onnan az alatta lévő energiaszintre (vagy szintekre) kicsi a spontán emisszió valószínűsége ($A = 1/\tau$), tehát lehetőség nyílik az indukált emisszióra. Az ilyen hosszú élettartamú energia szinteket nevezzük **lézernívóknak**, ugyanis ezekről történhet lézerátmenet. Mindkét feltételnek megfelelőnek például szennyezett kristályok, két vagy több gáz keverékből álló rendszerek vagy több energianívós festékmolekulák oldatai.

A pumpáláshoz szükséges energiát például elektromos áram (elektromos kisülés) vagy intenzív megvilágítás révén fedezhetjük.

A lézergyagot optikai rezonátorban helyezük el, amely biztosítja a pozitív visszacsatolást és a rezonanciának megfelelő frekvenciakiválasztást is. Az optikai rezonátor két egymással szemben elhelyezett, pontosan párhuzamos és azonos optikai tengelyű síktükrökből áll. (Kedvezőbb tulajdonságai miatt sok esetben inkább homorú tükröket alkalmaznak). Ez az elrendezés az alábbi módon teszi lehetővé az oszcilláció létrejöttét (II.36. ábra).



II.36. ábra. A lézeroszcillátor

Először is a pumpálással inverziót hozunk létre. Tudjuk, hogy a lézernívókról történő spontán emisszió valószínűsége kicsi, de nem nulla. Így a pumpálás egyik következményeként a lézergyag belsejéből a tér minden irányába terjedő, spontán emisszióval kibocsátott fénycsomagok indulnak ki. Ezek a lézergyagban áthaladva, a fordított betöltöttség miatt, indukált emisszió révén lavinaszerűen felerősödnek. Ennek a sugárzásnak jelentős része kilépve a lézergyagból eltávozik a rezonátorból is. Azok a hullámok azonban, amelyek a rezonátor hossz tengelyének irányában (azaz a tükrök optikai tengelyével párhuzamosan) haladnak, a tükrökről visszaverődve visszajutnak a lézergyagba, és ott tovább erősödnek. (Ebben a rendszerben tehát a tükrökön történő reflexió felel meg a pozitív visszacsatolásnak.)

A visszaverődések folyamatos megismétlődésével a fény intenzitása egyre növekszik egészen addig, amíg (igen hamar) el nem ér egy maximális telítési értéket. Ilyen felső korlát léte nyilvánvaló, hiszen a pumpálással folyamatosan bevitt energiánál többet úgysem kaphatunk vissza. Emellett a rendszerben van egy beépített negatív visszacsatolás is. A növekvő indukált emisszió ugyanis csökkenti a lézernívók betöltöttségét, ami μ értékét (lásd a (II.56) összefüggést a II/2.2.5. részben) az erősítés csökkenésének irányába tolja el. Ezenkívül veszteségek is fellépnek, mégpedig egyrészt a spontán emisszió következtében, másrészt a tükrökön és az egyik közegből a másikba való áthaladásnál.

Végeredményképpen a rezonátor belsejében kialakul egy önfenntartó sugárzás. A lézergyag kilépését a rezonátorból úgy biztosíthatjuk, ha az egyik tükrő „teljes” mértékben visszaveri a fényt (azaz például 99,9%-os reflexiójú), de a másik mondjuk „csak” 99%-ban reflektál és 1%-ban átterszt.

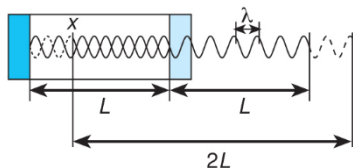
Azt, hogy a rezonátor melyik lézertípusot és azon belül is melyik frekvenciát emeli ki, (tehát hogy a lézergyagból valójában milyen hullámhosszú fény lép ki) a tükrök spektrális tulajdonsága és távolsága (L) szabja meg. Ilyen jó minőségű tükröket csak meglehetősen szűk frekvenciatartományon belüli reflexiókra lehet készíteni, így ez önmagában egyfajta kiválasztást biztosít. Ezen túlmenően a kifeszített húron kialakuló rezgésekhez hasonlóan (vö. I/1.1.3. rész) a tükrökkel határolt rezonátorban is csak bizonyos feltételeket kielégítő ún. sajátrezgések valósulhatnak meg.

A rezonátorral azok a frekvenciák választhatók ki, amelyek esetében a tükrökön történő visszaverődés az elkerülhetetlen veszteségeken túlmenően nem okoz további intenzitáscsökkenést. Ehhez annak kell teljesülnie, hogy egy tetszőleges x helyről kiinduló hullám a mindkét tükrőről történő visszaverődés után ugyanolyan fázisban érjen a kiindulási helyre (x -be, lásd II.37. ábra). Egyszerűbben megfogalmazva a rezonátor hosszának kétszerese és a hullámhossz valamelyik egész számú többszöröse meg kell hogy egyezzen egymással:

$$2L = m\lambda, \quad (\text{II.57})$$

ahol L a tükrök közötti távolság, λ a hullámhossz az adott közegben, m pedig pozitív egész szám. Ebből az is kiderül, hogy a rezonátor saját rezgései valójában állóhullámok. (Az állóhullám két egyenlő frekvenciájú és amplitúdójú, de ellenkező terjedési irányú hullám szuperpozíciója, vö. II/2.1.3. rész.)

Az itt felvázolt rendszer (lézerezoscillátor) tehát spontán emisszióval kibocsátott fénycsugár segítségével „önműködően” beindul, és az ezt követő indukált emisszió és optikai visszacsatolás révén folyamatosan, speciális tulajdonságokkal rendelkező lézerezoscilláció kibocsátására alkalmas.



II.37. ábra. Rezonancia feltétel a lézerben: $2L = m\lambda$, vagy másképpen ahol L a rezonátor hossza, λ a hullámhossz az adott közegben, m pedig tetszőleges pozitív egész szám.

2.2.8. II/2.2.8. A lézerezoscilláció legfontosabb tulajdonságai, lézerezoscillációk

II.2. példa

A spektrális vonalszélesség

A Heisenberg-féle határozatlansági reláció alapján (lásd I/1.2.2. rész (I.9.) összefüggés) megbecsülhető egy közönséges lumineszcencia sugárzó spektrumvonalának körülbelüli szélessége. A reláció szerint $\Delta E \cdot \Delta t \approx h$ ahol ΔE az energia, Δt pedig az idő határozatlanságát jelenti. Ha felhasználjuk azt, hogy $E = hf$, akkor a $h\Delta f \cdot \Delta t \approx h$ illetve a $\Delta f \cdot \Delta t \approx 1$ összefüggéshez jutunk. Így ha az idő határozatlanságát a gerjesztett állapot élettartamával becsüljük, ami a rövidebb élettartamok (fluoreszcencia) esetén tipikusan 10^{-9} s körüli érték, akkor a frekvencia határozatlanságára 10^9 Hz-et, azaz 1 GHz-et kapunk.

A lézerek által kibocsátott sugárzás a következő szempontok alapján mondható különlegesnek a „klasszikus” fényforrások sugárzásához képest.

- A lézerezoscilláció **monokromatikus**, magyarul egyszínű (ritkábban több monokromatikus komponens együttese). Ennek mértékét a spektrumvonalak szélességével adhatjuk meg. A közönséges lumineszcencia-sugárzó egy spektrumvonala körülbelül 1 GHz szélességű (lásd II.2. példa), ami $\Delta f/f = 10^{-6}$ nagyságrendű relatív frekvenciaingadozásnak felel meg. (A spektrumvonalak szélességét ezzel a mennyiséggel szokás jellemezni.) Egy lézer relatív frekvencia-sávszélessége az indukált emisszió és az optikai rezonátor révén ennél több nagyságrenddel kisebb, akár 10^{-10} nagyságrendű is lehet.
- A lézerezoscilláció **koherens**, (másképpen mondva megfigyelhető interferenciakép kialakítására képes, lásd II/2.1.4. rész), mivel az indukált emisszió miatt a lézernyaláb olyan állandó fáziskülönbségű hullámok együtteséből tevődik össze, amelyek a kibocsátás helyén térben is közel vannak egymáshoz (keskeny nyaláb). A koherencia egyik jellemző paramétere a koherenciahossz. Ez a leghosszabb útkülönbséggel egyenlő, amelynél az interferencia még megfigyelhető. Míg egy egyszerű lumineszcencia sugárzó koherenciahossza 10^{-3} m nagyságrendű, addig egy lézere 10^3 m vagy ennél is nagyobb lehet.
- A lézernyaláb **kis divergenciájú** (csak kevéssé széttartó), tehát közel párhuzamos. A széttartás mértéke általában csak néhány szögpercnyi. Kilépéskor a tipikus nyalábtérítő lézertípustól függően néhány millimétertől néhány centiméterig terjed.
- A lézerezoscilláció **nagy intenzitású**, ami elsősorban annak köszönhető, hogy az energia egy keskeny nyalábban belül áramlik. (Orvosi szempontból talán ez a lézerezoscilláció legfontosabb tulajdonsága.) Például egy néhány mW teljesítményű lézer néhány mm² nyalábkeresztmetszet esetén 10^3 W/m² nagyságrendű energiaáram-sűrűséget eredményez. Összehasonlításképpen a Napból származó, a Föld felületét érő sugárzás intenzitása ennél kisebb. Mivel a nyaláb keskeny és kis divergenciájú, ezért egyszerű fókuszálással az intenzitás tovább fokozható. Ha mondjuk a fókuszálás után a nyaláb keresztmetszete néhány száz μm^2 , akkor ott az intenzitás már 10^7 W/m² nagyságrendű.

Külön kell említenünk az impulzus üzemmódban működő lézereket. Például az orvosi gyakorlatban is gyakran használatos a Nd-YAG lézer (ennek lézerezoscilláció neodímmal szennyezett ittrium-alumínium gránát, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$), amely körülbelül 20 ns időtartamú és 2 J energiájú impulzusok sorozatát bocsátja ki. Ha az ismétlődési frekvencia például 10 Hz, akkor a kisugárzott átlagteljesítmény $2 \text{ J}/0,1 \text{ s} = 20 \text{ W}$, de egy impulzus ideje alatt a pillanatnyi teljesítmény $2 \text{ J}/20 \text{ ns} = 10^8 \text{ W}$. Ha figyelembe vesszük a nyaláb hozzátétőlegesen 5

mm-es átmérőjét, akkor ez azt jelenti, hogy az impulzus ideje alatt a sugárzás intenzitása 10^{12} W/m²-nél is nagyobb. Fokuszálással természetesen még ez az óriási energiaáram-sűrűség is több nagyságrenddel fokozható.

Az első működő lézert 1961-ben készítették. Ennek lézeryanyaga rubinkristály volt, amelyben a pumpálást erős villanólámpával oldották meg. Ez a lézer csak rövid impulzusokat produkált. Ezt követően a hatvanas, majd a hetvenes években fokozatosan fejlesztették ki a különböző lézertípusokat. Ezek közül mutat be néhányat a II.2. táblázat. A hetvenes évektől a lézereket fokozatosan bevezették az orvosi gyakorlatba is (lásd a IX/1. részt).

Amint az a táblázatból is kitűnik, a lézereket több szempont szerint csoportosíthatjuk. Megkülönböztethetjük őket lézeryanyaguk minősége szerint, vagy csak azok halmazállapota alapján (gáz, folyadék, szilárdtest). Különbséget tehetünk üzemmódjukban (folytonos, impulzus), de a csoportosítás történhet a teljesítménysűrűség, valamint az emisszió hullámhossza szerint is. Ez utóbbi paraméterek azok, amelyek leginkább kijelölik az adott lézer felhasználási területeit, illetve meghatározzák a különböző célokra történő alkalmazhatóságát.

2.2. táblázat - II.2. táblázat. Néhány lézertípus és fontosabb jellemzőik

Főtípus (halmazállapot)	Lézeryanyag			Típikus hullámhossz zak (nm)	Típikus teljesítmény (W)		Alkalmazások
	Altípus	Neve	Jelölése		Folytonos, illetve kvázifolytonos üzemmódban	Impulzus- üzemmódban, egy impulzus ideje alatt	
Gáz		Helium-neon	HeNe	633	$5 \cdot 10^{-3}$		<i>infravörös lézerek célzófénye</i>
		Argon	Ar	488 514	10	10^2	<i>szemészet, fés- télklézerek pumpálás</i>
		Kripton	Kr	548 647	10		<i>szemészet</i>
		Szén-dioxid	CO ₂	10600	$2 \cdot 10^3$	10^9	<i>sebészet</i>
	Excimer (excited dimer) (általában nemes- és halogéngáz)	<i>például</i> Kripton- fluor	KrF	248		$5 \cdot 10^4$	<i>szemészet</i>
Folyadék	Festék (oldat)	<i>például</i> Rodamin 6G	C ₂₈ H ₃₁ N ₂ O ₃ Cl	560-610	1	10^5	<i>szemészet, bőrgyógyászat, PDT (IX/2.2.)</i>
Szilárdtest		Rubin	Cr-Al ₂ O ₃	694		10^9	<i>bőrgyógyászat</i>

	YAG (ittrium- alumínium- gránát) + lantanidák: Nd, Ho, Er, ...	<i>például</i> Neodímium- -YAG	Nd-Y ₃ Al ₅ O ₁₂	1064	50	10 ⁸	<i>sebészet</i>
	Félvezetô	<i>például</i> Gallium- arzenid	GaAs	840	5·10 ⁻³		<i>fénymutató, CD-lejátszó</i>

2.3. II/2.3. A fény és anyag kölsönhatása

Amint azt már a II/2.2 rész bevezetôjében említettük ebben a részben a fényszóródás mellett a fényelnyelést és annak következményeit vesszük sorra. Mivel a fényszóródás és a fényabszorpció témaköre még „A molekuláris és sejtdiagnosztika fizikai módszerei” címû VI. fejezetben is elôkerül, ezért itt csak az alapjelenségeket tárgyaljuk. Ugyanez a helyzet a fény biológiai hatásaival is, hiszen a Terápiás módszerek fizikai alapjai címû IX. fejezetben külön részben foglalkozunk a fényterápiával.

2.3.1. II/2.3.1. Fényszóródás

A fényszóródás jelenségét a mindennapi életben is tapasztalhatjuk. A kék ég, a fehér felhök látványa mind a fényszóródás megnyilvánulási formái, de a fényszóródás teszi lehetővé azt is, hogy a fénynyalábot egyáltalán megfigyelhetjük (például a párás erdôben: lásd II/2.1. rész II.9. ábra). Ilyenkor a fény úgy hat kölsön az anyaggal, hogy **a beesô fénynyaláb elektromos tere az útjába esô igen kis méretû részecskék** (például molekulák) **töltéseit** (elektronjait) **rezgésre kényszeríti**. A „fel-alá” **gyorsulva mozgó** (kényszerrezgést végzô) **elektronok** (mint apró oszcillátorok vagy kis rádióadók) **elektromágneses hullámokat** (fényt) **bocsátanak ki** a legkülönbözôbb irányokba.

Amennyiben az anyag részecskéi egymástól (a fény hullámhosszához képest) relatíve távol, **véletlenszerûen elhelyezkedô** és ráadásul mozgó szórócentrumok (elemi hullámforrások), akkor a fázisviszonyok összevisszasága (inkoherencia) miatt **nincs** megfigyelhetô **interferencia**. Így az összes részecskétôl származó teljes fényintenzitás egyszerűen az egyes részecskéktôl származó intenzitások összege:

$$\sum_i J_{Ei} = J_{E,credô} \quad (\text{II.58})$$

(vö. a II/2.1.4. rész (II.28) összefüggéssel). Éppen ezért, ha azt akarjuk kiszámítani, hogy valamely anyag adott irányban mennyi fényt szôrt szét, elegendô **egyetlen részecskén fellépô szóródást** vizsgálni és az általa sugárzott intenzitást szorozni a részecskék számával.

A legegyszerûbb esetben a beesô (például f frekvenciájú) sugárzás a részecskében, időben változó dipólusmomentumot (p) indukál:

$$p = p_0 \sin \omega t, \quad (\text{II.59})$$

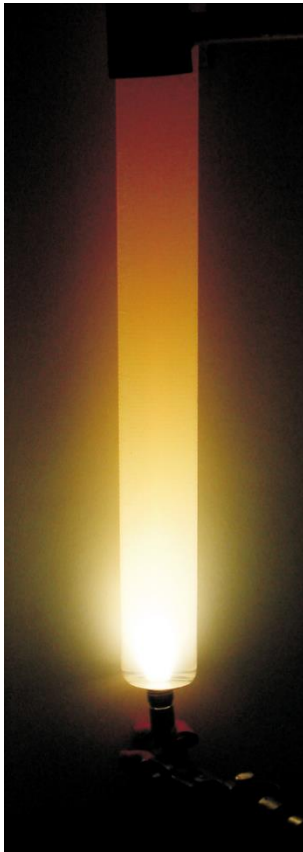
ahol $\omega = 2\pi f$, a $p_0 = Qd$ pedig az indukált dipólusmomentum maximális értéke, ami azt adja meg, hogy az elektromos tér hatására mekkora (pozitív illetve negatív) töltés (Q) milyen messze (d) tud eltávolodni egymástól (lásd még VI/3.4.). Az „újrásugárzott” fényteljesítményrôl ($P_{szôrt}$ -rôl) feltehetjük, hogy biztosan függ az indukált dipólusmomentum maximális értékétôl (p_0 -tôl) és a körfrekvenciától (ω -tôl). Azt, hogy matematikailag milyen alakú lehet ez az összefüggésfüggés, John William Strutt Rayleigh (1842–1919) angol fizikus (rôla nevezték el ezt a típusú fényszórást Rayleigh-szórásnak) bonyolult számolása helyett dimenzióelemzéssel határozzuk meg.

A kérdés az, hogy hogyan állíthatunk elő [teljesítmény] dimenziójú mennyiséget (P), [elektromos töltés][hosszúság] (p_0), illetve [idő]⁻¹ (ω) dimenziójú mennyiségekből, ha még felhasználhatjuk azt is, hogy a fény terjedési sebessége (c) [hosszúság][idő]⁻¹ dimenziójú (lásd *A dimenzióelemzés lépései*).

A fentiek szerint tehát:

$$P_{\text{szórt}} \sim \frac{p_0^2}{c^3} \omega^4. \quad (\text{II.60})$$

Látható, hogy a szóródó fény teljesítménye a körfrekvenciának (ω -nak és így természetesen a frekvenciának, f -nek is) a negyedik hatványával arányos. Így például az a kék fény, amelynek frekvenciája megközelítőleg kétszerese a spektrum vörös végére jellemző értéknek, tizenhatszor „erősebben” szóródik a vörös fényénél (lásd a II.38. ábrát). Ezt figyelhetjük meg például akkor is, amikor a horizont közelében lévő Nap fényéből a sugárzás útjába eső vastag légréteg részecskéi a kék összetevőt kiszórják, és ezért a Nap sárga vagy vörös színűnek látszik. A kék fény azonban nem megy veszendőbe, hanem csak eltérül, és az ég kék színeként jut a szemünkbe. Így ha felnézünk a derült égboltra, mindig ezt a ragyogó kékséget csodálhatjuk. A figyelemfelkeltő lámpák vörös színére is ugyanebből a megfontolásból esett a választás, hiszen a párás, ködös időben a kisebb mértékű fényszóródás miatt sokkal jobban észrevehető (annak ellenére, hogy szemünk a nagyobb frekvenciájú zöld fényre érzékenyebb).



II.38. ábra. Fényszóródás kisméretű véletlenszerűen elhelyezkedő szórócentrumokon (vízzel hígított, a masztixcserje gyantájából készült alkoholos masztixoldatban) (Derka István felvétele)

Most még azt vizsgáljuk meg, hogy a **részecskék méretének növekedése** hogyan befolyásolja a fényszóródást (II.8. megjegyzés). Ennek érdekében először hasonlítsuk össze, hogy mi változik meg akkor, ha a beeső **fény** mondjuk **egyetlen kis molekula helyett** a fény hullámhosszához képest **egymástól igen kis távolságra levő atomok**, illetve molekulák **halmazára esik**. Gondoljunk arra, hogy az atomok átmérője néhány tized nm nagyságrendű, míg a fény hullámhossza 500 nm körül van. Így az a néhány atom, amely a kis csoportot alkotja, valóban igen közel tud kerülni egymáshoz. Ilyen körülmények között az elektromos tér hatására együtt is rezegnek, tehát feltétlenül azonos fázissal sugároznak, és emiatt **erősítő interferencia jön létre**.

Ha az atomhalmaz, például egy parányi vízcsepp, N vízmolekulát tartalmaz és feltesszük, hogy ezek mindegyike az elektromos tér azonos hatásának van kitéve, akkor az egyes molekulák által keltett szórt hullámok amplitúdói is ugyanakkorák lesznek (A). Így a teljes szórt elektromos tér amplitúdója (az azonos fázis miatt) N -szeresére nő (NA), a szórt fény intenzitása pedig N^2 -szeres lesz $(NA)^2$ (lásd II/2.1.3. rész II.27 összefüggés). Például 5-szörös növekedés 25-szörös fényintenzitás-növekedést eredményez. Ha tehát a vízpára cseppé tömörül, a fényszóródás a mérettel rohamosan növekszik. Kérdés, hogy meddig tart ez a folyamat.

Ha a vízcsepp már olyan nagyra nő, hogy egyik végétől a másikig a távolság megközelítőleg egy hullámhossznyi, a rezgések már biztosan nem maradnak továbbra is azonos fázisban. Ezen a határon túl tehát a szórt fény intenzitása már közel sem az előbbi arányban növekszik. Mivel ez a határ kék színű fényre (400 nm) hamarabb bekövetkezik, mint vörösre (800 nm), ezért először a kék szín nagyfokú szóródása kezd csökkenni. Bár az egyedi molekulák továbbra is a rövidebb hullámhosszúságú fényt szórják erősebben, ha a vízcseppek mérete meghaladja a látható fény határának hullámhosszát (400 nm), akkor a vörös szín intenzitása a kékhez képest relatíve fokozódik, s ennek megfelelően a szín a kéktől a vörös felé tolódik el (tehát fehéredik). Ha a vízcsepp mérete tovább növekszik, akkor a szórt fény intenzitása minden hullámhosszon csökken (tehát a szín szürkül, lásd II.39. ábra).



II.39. ábra. Fényszóródás vízcseppeken. A felhők fehér, illetve szürke színét a vízcseppek mérete határozza meg.

II.8. megjegyzés. Előljáróban még egyszer hangsúlyozzuk, hogy az elmondottak kisméretű, egymástól (a fény hullámhosszához képest) relatíve távol, véletlenszerűen elhelyezkedő (állandó mozgásban lévő) részecskékre érvényesek. Ezen a feltevésen alapult ugyanis az egyes szórócentrumokból érkező hullámok fázisának függetlensége (inkoherencia, lásd (II.58) összefüggés).

A dimenzióelemzés lépései

Tudjuk, hogy a teljesítmény dimenziója: $[erő][hosszúság][idő]^{-1}$ (hiszen SI mértékegysége $W = J/s = Nm/s$); és látható, hogy $p_0\omega$ dimenziója: $[elektromos\ töltés][hosszúság][idő]^{-1}$.

Így ha az erőt valahogy ki tudjuk fejezni az elektromos töltéssel, akkor meg is oldottuk a problémát.

A Coulomb-törvény épp ezt a két mennyiséget kapcsolja össze: $\frac{Q_1 Q_2}{r^2} \sim F$, aminek alapján a dimenziókra azt kapjuk, hogy $[töltés]^2[hosszúság]^{-2} = [erő]$.

Első lépésként tehát p_0 -t négyzetre kell emelni ahhoz, hogy az $[erő]$ dimenzió egyáltalán megjelenjék. Ugyanis p_0^2 dimenziója $[töltés]^2[hosszúság]^2$, ha ezt bővítjük $[hosszúság]^{-2}$ -tel, (azaz szorozzuk $[hosszúság]^{-2}[hosszúság]^2$ -tel) akkor a $[töltés]^2[hosszúság]^{-2}[hosszúság]^4 = [erő][hosszúság]^4$. A további lépéseket a mellékelt táblázatban foglaltuk össze:

2.3. táblázat -

A fizikai kifejezés	Dimenzió
p_0^2	$[erő][hosszúság]^4$
$\frac{p_0^2}{c^3}$	$[erő][hosszúság][idő]^3$

$\frac{p_0^2}{c^3} \omega^4$	$[\text{erő}][\text{hosszúság}][\text{idő}]^{-1}$
------------------------------	---

(Ugyanis c dimenziója $[\text{hosszúság}][\text{idő}]^{-1}$, tehát $1/c^3$ -é $[\text{hosszúság}]^{-3}[\text{idő}]^3$; ω -é pedig $[\text{idő}]^{-1}$, tehát ω^4 -é $[\text{idő}]^{-4}$. Így végül visszakaptuk a teljesítmény dimenzióját.)

2.3.2. II/2.3.2. Fényabszorpció

Bár külön nem hangsúlyoztuk, de az előző részben tárgyalt fényszóródás olyan kölsönhatást jelent, ahol a besugárzott és a visszasugárzott fényteltjesítmény összességében megegyezik egymással. Az atomi méretű oszcillátorok kis amplitúdóval végeznek kényszerrezgéseket, minden rugalmasnak tekinthető, tehát a csillapodás vagy energiaveszteség csak az újrasugárzás miatt lép fel. Ilyenkor az anyag nem nyeli el a fényt.

Megváltozik azonban a helyzet, ha a beeső fénynyaláb elektromos tere olyan frekvenciát kényszerít az oszcillátorra, amelyre az rezonál. **Rezonancia esetén** a rezgési amplitúdó igen nagy mértékben megnő és az oszcillátor energiája nemcsak az újrasugárzás, hanem egyfajta „súrlódási erő” fellépése miatt is csökken. **Az anyag részlegesen elnyeli a sugárzást.**

Itt jegyezzük meg, hogy ez a hatás valójában mindig fellép, csak amikor mértéke nem számottevő, akkor elhanyagoljuk. Azt is tudjuk, hogy bár ez a klasszikus megközelítés sok szempontból igen hasznos (például az új témakörben fellépő jelvégeket a korábban már megértett törvénytérvésegekkel össze tudjuk kapcsolni), a fényabszorpció pontosabb leírásához a kvantummechanikát kell segítségül hívnunk. Éppen ezért az egész kérdéskörre még visszatérünk a VI. fejezetben.

2.3.3. II/2.3.3. A fény biológiai hatásainak általános megközelítése

Bár szigorú értelemben fénynek csak az emberi szem számára látható elektromágneses sugárzást nevezünk, tágabb értelemben szokásos ultraibolya és infravörös „fényről” is beszélni (lásd II/2.1.8. rész II.27. ábra). **Így a következő két részben fényen az elektromágneses hullámok 100 nm-től 1000 µm-ig terjedő tartományát értjük.** Ezt a tartományt a fénynek az élővilágra gyakorolt hatásaival kapcsolatban tovább szokás osztani a II.3. táblázat szerint.

2.4. táblázat - II.3. táblázat. Az elektromágneses sugárzás „fénynek” nevezett tartományának felosztása

hullámhossz	rövidítés	megnevezés
100–280 nm	UV-C*	(távoli UV)
280–315 nm	UV-B	(Dorno-tartomány)
315–400 nm	UV-A	(közeli UV)
400–420 nm	VIS	ibolya
420–490 nm		kék
490–540 nm		zöld
540–600 nm		sárga
600–760 nm		vörös
0,76–1,4 µm	IR-A	(közeli IR)

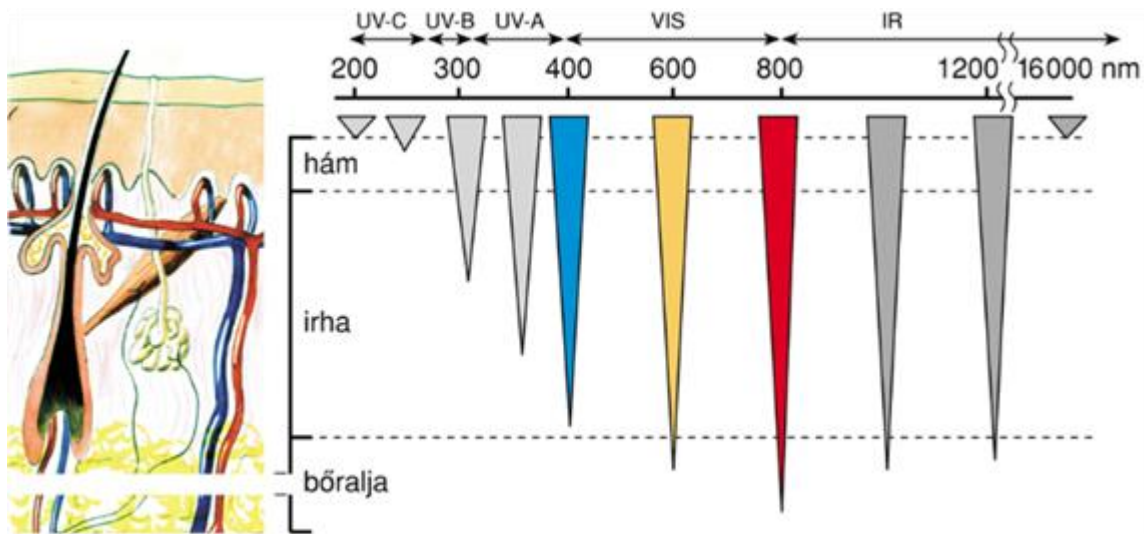
1,4–3 μm	IR-B	(középső IR)
3–1000 μm	IR-C	(távoli IR)

*Az UV-C tartomány 180 nm-nél rövidebb hullámhosszúságú részét vákuum-UV-tartománynak nevezzük, mivel ezt a levegő elnyeli, csak vákuumban terjed.

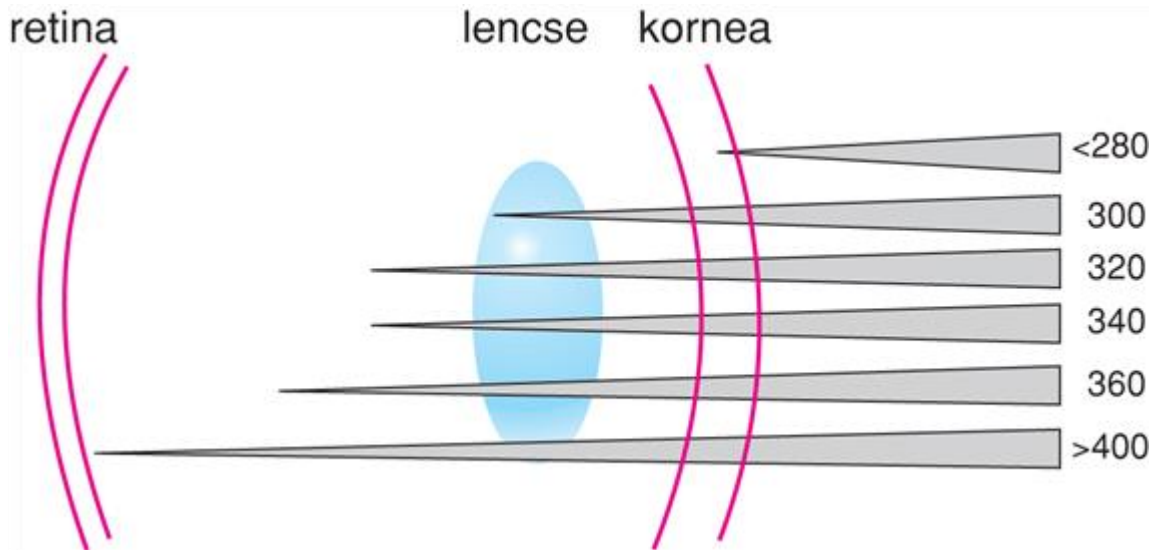
Az alábbiakban természetesen arra nem vállalkozhatunk, hogy a fény valamennyi biológiai hatásával részletesen foglalkozzunk, vagy akár csak számba vegyük valamennyit. Az ember szempontjából legjelentősebb biológiai hatások bemutatása mellett célunk elsősorban azoknak az alapvető törvényszerűségeknek az áttekintése, amelyek a biológiai hatás kialakulásának hátterében állnak.

A **biológiai hatás létrejöttének feltétele** az, hogy a **fény** az élő anyagban **elnyelődjék**. A foton elnyelődésének következménye, hogy az elnyelő molekula gerjesztett (magasabb energiájú) állapotba kerül, ami érintheti külső elektronpályák elektronjait vagy – IR fény elnyelődése esetén – a molekula rezgési, forgási állapotait. Elegendően nagy fotonenergiák esetén ionizáció is történhet. Ez utóbbi jellemzően 7 eV-nál nagyobb energia elnyelése nyomán mehet végbe, de egyes aromás vegyületek már 4 eV fotonenergiával is ionizálhatók.

A fényfotonok nem azonos eséllyel vesznek részt biológiai folyamatok kiváltásában. Ennek egyik oka az, hogy a szervezetet felépítő molekulák különböző hullámhossztartományokban abszorbeálódnak, vagyis rájuk jellemző abszorpciós spektrummal rendelkeznek (lásd a VI/3.1. részt). A kölcsönhatás kialakulásának valószínűségét befolyásolja továbbá az a körülmény, hogy a fény különböző hullámhosszúságú tartományai különböző mélységbe képesek behatolni szövetünkbe. Mivel természetes körülmények között a fény szemünkön és bőrünkön keresztül juthat szervezetünkbe, a II.40. és a II.41. ábra segítségével tekintsük át a különböző hullámhossz-tartományú sugárzások bőrben és szemben tapasztalható behatolási mélységét.



II.40. ábra. Behatolási mélységek a bőrben



II.41. ábra. Behatolási mélységek a szemben

Az ábrák elemzésekor megállapíthatjuk, hogy itt nem érvényes az a – például röntgensugárzás esetében megfigyelhető – tendencia, hogy a nagyobb fotonenergia nagyobb áthatolóképességet eredményez. A bőr esetében például az UV-C tartománytól a hosszabb hullámhosszak felé haladva egyre nő a behatolási mélység egészen az IR-A tartományig, majd innen a IR-B, C tartományokban újra fokozatosan csökken. Az UV-C, valamint az UV-B sugárzás rövidebb hullámhosszúságú része túlnyomóan a hámrétegben nyelődik el. A bőrfelszínre érkező UV-A sugárzás néhány százaléka, míg a 400 nm hullámhosszúságú fény 30-40%-a már az irharétegbe is bejut. Összességében a látható fény 60-70%-a hatol be az irhába, az IR-A sugárzás 20%-a 3-3,5 mm mélységben az irha alatti rétegeket is eléri. A megadott százalékok közelítő jellegűek, egyedi esetben függhetnek például a bőr pigmentáltóságától. A pigmentek fényelnyelő molekulák, tehát a pigmenttartalom növekedése akár felére is csökkentheti a bőrnek a teljes ultraibolya-tartományra vonatkozó áteresztőképességét.

A szem esetében az UV-C és az UV-B rövidebb hullámhosszúságú része, valamint az IR-B és IR-C sugárzások már a szaruhártyában elnyelődnek. Az UV-B és az UV-A rövidebb hullámhosszúságú része a szaruhártyában és a szemlencsében nyelődik el.

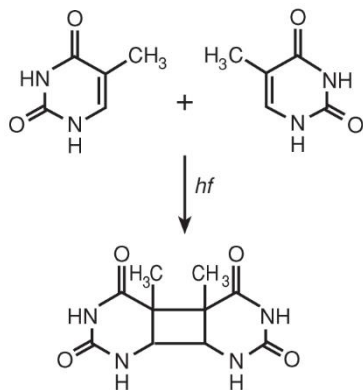
Egy adott energiájú foton behatolási mélységét több tényező befolyásolja. Ezek közül legjelentősebb a fényabszorpció. Mivel a sejtekben nagy mennyiségben jelen lévő nukleinsavak és aromás aminosavak elnyelési sávja az UV-C, B és kisebb mértékben az UV-A tartományba esik, ezért nyelődnek el nagy valószínűséggel már a legfelső sejtrétegekben. A látható tartományban abszorbeáló molekulák közül a hemoglobint és a melanint kell kiemelnünk, de számottevő elnyeléssel rendelkezhetnek a karotinok és a bilirubin is. Az abszorpció mellett a fénytörés és visszaverődés is befolyásolja az egyes rétegekbe jutó fény intenzitását. A bőr felszínére eső intenzitás öt-hét százaléka reflektálódik a szaruhártyáról (stratum corneumról), de számottevő visszaverődés történik a hám és irha határán is.

A fényelnyelés során felvett energia leadása többféle módon lehetséges. A gerjesztett elektron alapállapotba való visszatérését kísérheti fény kibocsátása, fluoreszcencia vagy foszforeszcencia (lásd II/2.2.4.). A felvett energia egy része termikus energiává alakulhat, továbbá kémiai reakciót eredményezhet, amit ebben az esetben **fotokémiai reakciónak** hívunk.

Egy adott fajta molekula gerjesztése esetén mindhárom folyamat végbemehet, de a molekula elektronszerkezetétől és molekuláris környezetétől függően valószínűségük különböző. A egyes folyamatok lejátszódásának valószínűségét fejezi ki a **kvantumhatásfok** (lásd VI/3.3.2.) Tekintsünk például egy folyamatot, amelyben az elnyelő molekulák gerjesztése minden tizedik esetben eredményez kémiai átalakulást. Ennek a fotokémiai reakciónak a kvantumhatásfoka 0,1, vagyis az elnyelt kvantumok 1/10 része hasznosul ezen a módon. Megjegyezzük, hogy egy gerjesztést követő összes lehetséges folyamat kvantumhatásfokainak összege 1.

A **fotokémiai reakciók** két fő típusát különböztethetjük meg. Azokat a reakciókat, amelyekben új kovalens kötés jön létre, vagy bomlik fel a fényt elnyelő molekulában **direkt fotokémiai reakciónak** nevezzük. Az ilyen reakciók egyik gyakori, fotobiológiai szempontból is jelentős példája a nukleinsavak pirimidin bázisainak

dimerizációja. A II.42. ábrána timin esetén szemléltetjük a folyamatot. UV-C vagy UV-B fény elnyelése nyomán a bázisok 5. és 6. szénatomjai közötti kettős kötések felhasadnak és két bázis érintett szénatomjai között új kovalens kötések jönnek létre. A reakció ciklobután addíció, mivel a részt vevő szénatomok egy új, négy szénatomos gyűrűt alakítanak ki. A DNS esetében ilyen folyamat játszódhat le szomszédos pirimidin, kisebb valószínűséggel puringyűrűk között, ami a DNS-molekula szerkezetének megváltozásával, a pontmutációkra jellemző biokémiai következményekkel jár.

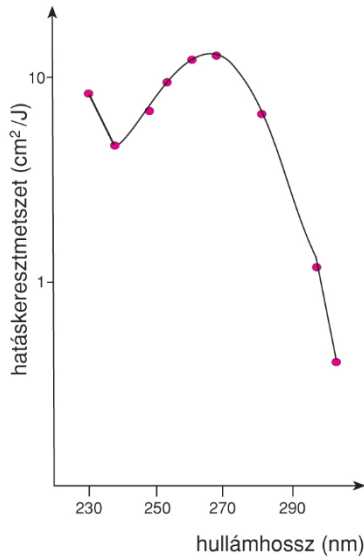


II.42. ábra. Timin dimerizációja UV fény hatására

A gerjesztés **indirekt fotokémiai reakciókhoz** is vezethet. Az ebbe a csoportba tartozó reakciók esetében energia- vagy elektronátadás történik a fény által gerjesztett és az annak környezetében lévő molekulák, ionok között. Az energia- vagy elektronátadás révén újabb reaktív termékek, gerjesztett molekulák vagy szabad gyökök képződnek. Az ilyen indirekt reakciók terméke lehet például az energiaátadással képződő, igen reaktív szingulett állapotú oxigén, ami azután makromolekulákkal vagy zsírsavakkal való reakciói révén vezethet az élő sejtekben szerkezeti majd funkcionális változásokhoz.

Már a XIX. században, a fotobiológia korai korszakában elkezdődött annak a kérdéskörnek a vizsgálata, hogy a spektrum mely tartománya felelős egy-egy biológiai változás kiváltásáért. Megfigyelték például, hogy a különböző színnel megvilágított növények nem azonos mértékben gyarapodtak. A mérési technikák és a tudományos gondolkodás fejlődése a múlt század közepén vezetett el a fény által indukált biológiai változások hullámhosszfüggésének kvantitatív elemzéséhez. Lehetővé vált a különböző hullámhosszakon az azonos biológiai hatás kiváltásához szükséges **beeső energiasűrűség** (J/cm^2) vagy **beeső fotonszám** (foton/ cm^2) meghatározása. Az így kapott értékek reciproka az úgynevezett **hatáskeresztmetszet** (cm^2/J , $cm^2/foton$). (Ezt a fogalmat a fizika, biofizika más területein is használják, de nem mindig ugyanilyen értelemben.) Nyilvánvaló, hogy minél hatékonyabb egy bizonyos hullámhosszúságú fény egy folyamat kiváltásában, annál kisebb beeső energiasűrűségre van szükség egy adott mértékű változás – például azonos számú mutáció – létrehozásához, vagyis annál nagyobb a biológiai objektum hatáskeresztmetszete. A hatáskeresztmetszetet a hullámhossz függvényében ábrázolva nyerjük az úgynevezett **hatásspektrumot** (lásd a II/4.7. részt). Ennek egy példáját mutatja be a II.43. ábra.

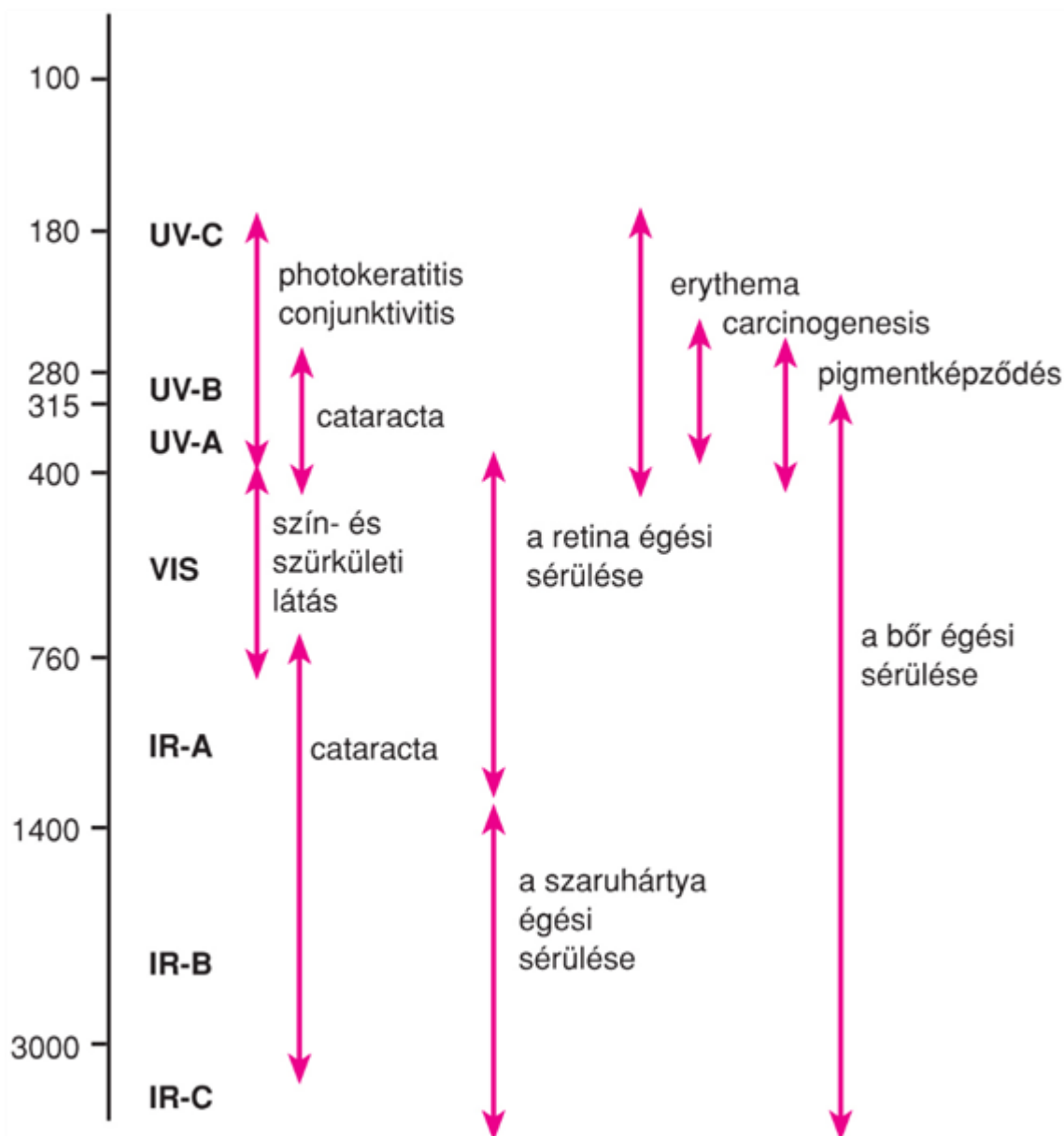
Kézenfekvő és már számos esetben bizonyítást nyert az a feltételezés, amely szerint egy fotobiológiai folyamat elindításáért felelős molekula elnyelési spektruma és a biológiai változásra vonatkozó hatásspektrum egymással párhuzamos lefutású. Megfigyelhető például, hogy az *E. coli* baktérium II.43 ábrán bemutatott inaktivációs hatásspektrumának maximuma 260 nm-nél van, ami jó egyezést mutat a DNS – az inaktivációért felelős molekula – abszorpciós spektrumával. Az elnyelési spektrum és hatásspektrum összehasonlító elemzése széles körben használatos módszer egy adott fotobiológiai hatás hátterében álló, még ismeretlen folyamatok felderítése, a primer fotofizikai esemény azonosítása során. Az elnyelő molekula azonosítását ugyanakkor megnehezítheti, ha annak elnyelési spektruma natív környezetében és izolált állapotban nagyon különböző, vagy ha a natív környezetben más, ugyanabban a tartományban elnyelő molekulák is jelen vannak.



II.43. ábra. E. coli baktérium UV fény hatására bekövetkező inaktivációjának hatásspektruma

2.3.4. II/2.3.4. A fény hatása a szemre és a bőrre

Az általános értelemben „fénynek” nevezett sugárzásnak (lásd II/2.3.3.) a szemre és bőrre gyakorolt főbb hatásait a II.44. ábrán foglaltuk össze.



II.44. ábra. A fény szemre és bőrre gyakorolt hatásainak összefoglalása

Az UV-C sugárzás hatására a szaruhártyában **szaruhártya-gyulladás** (photokeratitis), a kötőhártyában **kötőhártya-gyulladás** (conjunctivitis) alakulhat ki. Az IR-B és IR-C sugárzás a szaruhártya égési sérüléseit okozhatja. Az UV-B sugárzás hosszabb hullámhosszúságú része továbbá az UV-A kiválthatja a már az UV-C sugárzás kapcsán említett hatásokat, valamint a **lencsehomályt** (cataracta) is. A látható tartomány fotonjai érik el a retinát (lásd II.41. ábra), természetesen a látás folyamatában ezeknek van szerepük. A látás során szokásos teljesítménysűrűség néhány század, illetve néhány tized W/m^2 . Ennél nagyobb teljesítménysűrűség a retina égési sérüléseit okozhatja. A hatás mértéke természetesen függ a kiváltó sugárzás időtartamától is.

A teljes UV-tartomány legszembetűnőbb és rövid időn belül megjelenő hatása a **bőrpír** (erythema). E fotobiológiai hatás kialakulásának pontos mechanizmusa még nem ismert. Feltételezzük, hogy ebben a hámsejtek nukleinsav- sérüléseinek, illetve a sérülések következtében a sejtekből kiszabaduló toxikus anyagok hatásának van szerepe.

A bőrpír megjelenése érzékeny indikátora a bőr ultraibolya-terhelésének. Éppen ezért a **minimális erythemadózist** (MED), vagyis azt a felületegységre vonatkoztatott beeső energiát, ami az adott hullámhossznál a bőr pirosodását éppen kiváltja, fel is használjuk a különböző hullámhossz-tartományú sugárzások hatékonyságának jellemzésére.

Az ultraibolya fény rövid távú hatásán túl hosszú távú károsító hatásai is ismertek. Ezek közül legjelentősebb a **rosszindulatú daganatok**kialakulása (photocarcinogenesis).

Az UV-B és UV-A sugárzások jellegzetes hatása a **pigmentképződés**. Ennek során a melanocitákban lévő festékanyag polimerizációja jön létre, ami az ultraibolya fény abszorpciója révén fokozott védelmet nyújt a hám és az irha mélyebben fekvő sejtjei számára.

Tévedés lenne azt feltételeznünk, hogy a fénynek a bőrben, illetve szemben való elnyelődése az emberi szervezetben csak a bőrben és a szemben megjelenő változásokat okozhat, vagyis hogy a fénynek csak lokális hatásai volnának. Számos olyan fotobiológiai folyamatot ismerünk, amelyek kezdeti lépései, így a fényabszorpció és a primer fotokémiai reakció a bőrben játszódhatnak le, de hatásaik az egész szervezetet érintik. Ezek között említhetjük a D-vitamin szintézisét vagy az immunrendszernek az UV-B sugárzás hatására bekövetkező szuppresszióját.

A folyamatok hatásmechanizmusa még sok esetben nem ismert, de tapasztalati tény, hogy a látható fény előnyösen hathat az anyagcserére és a hormonrendszer működésére, elősegítheti az immunrendszer működését. Ismeretes például, hogy a melatonin hormon és a szerotonin nevű ingerületátvivő anyag termelődését is befolyásolják a fényviszonyok. Kellő intenzitású természetes fény hiánya a melatonin túlermelődéséhez és ezen keresztül egy jellegzetes, „téli depresszió” néven ismert tünetegyüttes kialakulásához vezet, aminek jellemzői az állandó álmoság, a fáradtságérzés, a fokozott étvágy.

A komor évszakban bekövetkező lelki zavarok ellensúlyozására ezért az egyik legelterjedtebb módszer a fényterápia. Egy látható tartományban emittáló hőmérsékleti sugárzó fényforrással történő, meghatározott ideig tartó besugárzással kezelhetők a melatoninképződés zavarai.

A fentiekben természetes és mesterséges fényforrásokból származó háttérsugárzás jelentősebb biológiai hatásait mutattuk be. Az orvostudomány a fény által kiváltott biológiai folyamatokat számos esetben irányítottan, terápiás céllal alkalmazza. A fény gyógyításban való felhasználásának néhány példájával a IX/2. részben részletesebben foglalkozunk.

2.4. II/2.4. Hang–ultrahang

2.4.1. II/2.4.1. Általános fizikai tulajdonságaik

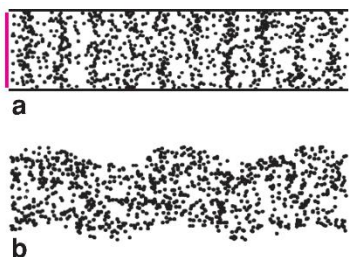
A hang rugalmas közegek olyan mechanikai rezgés-állapota, amely egy közegben hullámként terjed. Röviden: a **hang mechanikai hullám**. Míg az elektromágneses hullámok terjedéséhez nincs szükség közegre addig rugalmas közeg nélkül sem a mechanikai rezgés, sem pedig annak tovaterjedése nem jöhet létre. Ha például egy dobot megütünk, akkor annak hártáját rezgésbe hozzuk. Ez a rezgés terjed át a közelben lévő levegőmolekulákra, és a későbbiekben ez a rezgés terjed tovább a fülünkig.

Aszerint, hogy a közeg részecskéi a terjedés irányában vagy arra merőlegesen rezegnek, longitudinális és transzverzális hullámokat különböztetünk meg (lásd II.45. ábra). A hanghullámok esetén szilárd testekben mindkét forma létrejöhet, folyadékok és gázok belsejében (a nyírófeszültség hiánya miatt) csak **longitudinális hullámok** alakulhatnak ki (lásd II.46. ábra). (A felületi feszültség miatt a folyadékok felületén transzverzális hullámok is kialakulhatnak.) A lágy szövetekben kialakuló nyírófeszültségek elhanyagolhatók, ezért – a hangterjedés szempontjából – a lágy szövetek folyadéknak tekinthetők. Longitudinális hanghullám esetén a közegben a terjedési irány mentén sűrűség-, és ennek megfelelően nyomásingadozások jönnek létre. A hanghullám leírására e nyomáskülönbségeket (Δp , vö. II.9. megjegyzés) mint a hely (x) és az idő (t) periodikus függvényét adjuk meg (vö. II.10. megjegyzés és lásd még II/2.1.3.). A legegyszerűbb esetben:

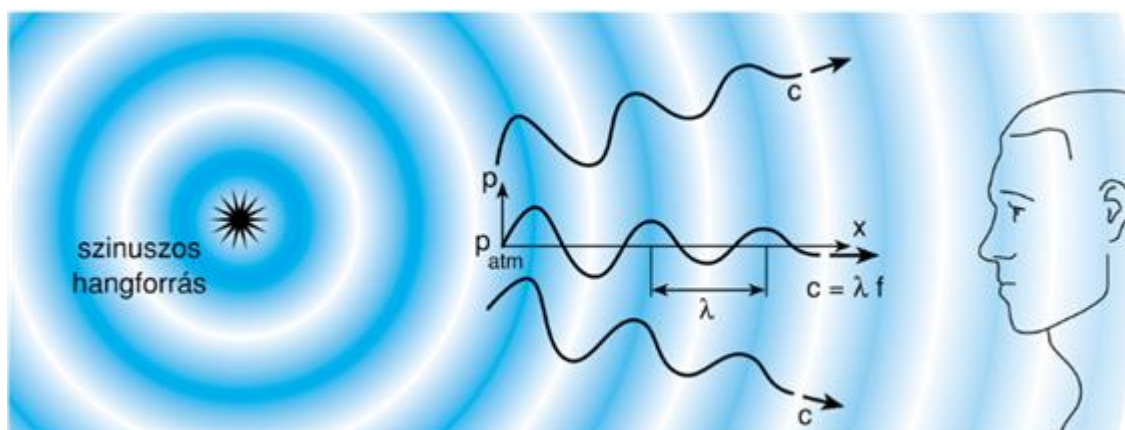
$$\Delta p(t, x) = \Delta p_{\max} \sin \left[2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda} \right) \right], \quad (\text{II.61})$$

ahol Δp_{\max} a maximális nyomásváltozás, $T = 1/f$ a periódusidő (f a közeg rezgőmozgást végző részecskéinek frekvenciája), λ a hullámhossz. (A későbbiekben Δp helyett p -t, illetve Δp_{\max} helyett p_{\max} -ot használunk.) A hanghullám terjedési sebességét c -vel jelöljük (ez a jelölés nemzetközileg elterjedt, azonban nem szabad összetéveszteni a fénysebességgel), ennek értéke a közvetítő közeg tulajdonságaitól függ (pl. vízben kb. 1500 m/s, levegőben 330 m/s). A hanghullám paraméterei között is fennáll a hullámokra általában érvényes összefüggés (lásd II/2.1.3. rész (II.26)):

$$c = f \cdot \lambda. \quad (\text{II.62})$$



II.45. ábra. Longitudinális a) és transzverzális b) hullám



II.46. ábra. Pontszerű szinuszos hangforrás esetén a levegőben kialakuló sűrűségváltozások bemutatása

A hallható hang és az ultrahang (UH) fizikailag azonos típusú hullámjelenségek, csupán frekvenciában különböznek. Szokás az emberi hallástartomány határait kerekítve 20 Hz-nek és 20 000 Hz-nek tekinteni. Az UH-tartomány ezen túl (túl = ultra) kezdődik, azaz a 20 000 Hz (20 kHz) fölötti frekvenciájú hangok az ultrahangok. Fontos hangsúlyoznunk, hogy a hallható és az ultrahangok közötti különbségtétel „szubjektív”, mely az emberi halláson alapul. Sok állat, mint például a kutya, a denevér vagy a delfinek képesek messze 20 kHz fölötti frekvenciájú hangokat meghallani. Az orvosi diagnosztikában használatos ultrahang frekvenciája lényegesen nagyobb, mint a természetben előforduló ultrahangoké: a képalkotó készülékekben jellegzetesen 2–10 MHz frekvenciájú ultrahangot használnak. A hanghullám közegbeli **terjedési sebessége nem függ a hang frekvenciájától** csak a közeg anyagi tulajdonságaitól, így azonos a hallható és az UH-tartományban. Ez azt jelenti, hogy a fényhullámok esetén tárgyalt diszperzió jelensége (a fény közegbeli terjedési sebessége függ a frekvenciától) nem lép fel. Az eltérő frekvenciaértékek a (II.62.) összefüggés miatt azonban eltérő hullámhosszértékeket is jelentenek. Például a légyszövetekben átlagos 1540 m/s terjedési sebességet feltételezve a képalkotásra használt ultrahang hullámhossza a szövetekben mintegy 0,77–0,154 mm.

Az ultrahangok tartományának felső határfrekvenciáját néhány száz MHz-nek szokás venni. Hiperhang azoknak a hangoknak a neve, amelyeknek a frekvenciája ennél is magasabb. A hallható tartomány másik „oldalán” a 20 Hz-nél kisebb frekvenciájú hangok az ún. infrahangok.

II.9. megjegyzés. Egy zajos teremben a levegő „igazi” vagy teljes nyomása (p_{teljes}) a levegő súlyából származó nyomás ($p_{\text{hidrosztat}}$) és a hangnyomás (Δp) összege: $p_{\text{teljes}} = p_{\text{hidrosztat}} + \Delta p$

II.10. megjegyzés. *Kitérés, sebesség, gyorsulás.* Legegyszerűbb esetben a kimozdított részecskék harmonikus rezgőmozgást végeznek. Az egyensúlyi helyzettől mért pillanatnyi kitérés (y) a rendszer egy pontjának rezgésbe hozatala utána x/c idővel:

$$y = y_{\text{max}} \sin \left[\omega \left(t - \frac{x}{c} \right) \right],$$

ahol y_{max} a rezgés (kitérés) amplitúdója, ω ($2\pi f = 2\pi/T$) a rezgés körfrekvenciája, c a rezgés terjedési sebessége.

A kimozdított részecskék pillanatnyi sebessége:

$$v = \gamma_{\max} \omega \cos \left[\omega \left(t - \frac{x}{c} \right) \right],$$

ahol $\gamma_{\max} \omega = v_{\max}$ a kimozdított részecske maximális sebessége (sebességamplitúdó) és pillanatnyi gyorsulása:

$$a = -\gamma_{\max} \omega^2 \sin \left[\omega \left(t - \frac{x}{c} \right) \right],$$

ahol $\gamma_{\max} \omega^2 = a_{\max}$ a kimozdított részecske maximális gyorsulása (gyorsulásamplitúdó) a rezgés során.

2.4.2. II/2.4.2. A hang terjedése közegekben

II.11. megjegyzés

$\Delta V/V$ a relatív térfogatváltozást jelenti. Mivel a nyomásnövekedés térfogatcsökkenést okoz, ezért, ha ($-\Delta V/V$) relatív térfogatcsökkenést használjuk az összenyomhatóság definiálásánál, akkor annak értéke pozitív lesz.

A terjedési sebesség

A hang terjedési sebessége a közegek sűrűségétől és összenyomhatóságától függ. A közeg sűrűsége a sebességet fordított módon befolyásolja, sűrűbb közegben kisebb sebesség alakul ki. (Bár a tapasztalatnak ez látszólag ellentmond, az alábbiakban rámutatunk az okokra.) Egy közeg összenyomhatóságát a **kompesszibilitással** (κ) jellemezhetjük:

$$\kappa = \frac{-\Delta V/V}{\Delta p}, \quad (\text{II.63})$$

ami megadja az egységnyi nyomásnövekedés által okozott relatív térfogatcsökkenést (lásd II.11. megjegyzés). Az II.4. táblázat harmadik oszlopában néhány közeg kompresszibilitási állandóját találjuk. Minél könnyebben összenyomható egy közeg, azaz minél nagyobb κ értéke, a nyomás annál nagyobb deformációt hoz létre, ami nagy részecskeelmozdulásokhoz vezet. Ebből az következik, hogy a hullám lassabban terjed, azaz az összenyomhatóság is fordított módon befolyásolja a sebességet. Kvantitatívan:

$$c = \frac{1}{\sqrt{\rho \kappa}}, \quad (\text{II.64})$$

ahol ρ a közeg sűrűsége, κ pedig a kompresszibilitás. A szilárd anyagok sűrűsége kb. három nagyságrenddel nagyobb, mint a gázoké, viszont a szilárd anyagokat sokkal nehezebb összenyomni (több mint három nagyságrenddel kisebb a κ értékük). Végeredményképpen szilárd anyagokban nagyobb a hang terjedési sebessége mint a gázokban. A folyadékok általában a két csoport között foglalnak helyet. A terjedési sebességet tehát a közeg mechanikai tulajdonságai bonyolult módon határozzák meg. Az II.4. táblázat negyedik oszlopában terjedési sebességadatokat sorolunk fel néhány közegben. Még egyszer kiemeljük a **lágyszövetekre** vonatkozó **1540 m/s** terjedési sebességet.

Az akusztikus impedancia

Az elektromos impedancia azt mutatja meg, hogy mekkora feszültség szükséges az egységnyi áramerősség létrehozásához, azaz a feszültség és a kialakuló áramerősség hányadosa. Nagyobb impedanciaérték azt jelenti, hogy nagyobb az ellenállás az áram kialakulásával szemben (impedancia = általánosított ellenállás).

Az akusztikus impedancia ezzel analóg mennyiség, a nyomás és a részecske sebességének hányadosa. Megmutatja, hogy mennyire áll ellen a közeg annak, hogy a részecskéit mozgásba hozzuk, azaz mennyire „kemény” akusztikus szempontból (akusztikus impedancia = akusztikai keménység):

$$Z = p/v \quad (\text{II.65})$$

Megmutatható (lásd „A nyomás és a részecskesebesség kapcsolata”) hogy:

$$p = v c \rho. \quad (\text{II.66})$$

(II.65) és (II.66) összehasonlításából következik, hogy az akusztikus impedancia megkapható a hang **közegbeli terjedési sebességének és a közeg sűrűségének a szorzataként:**

$$Z = \rho \cdot c. \quad (\text{II.67})$$

A közeg sűrűsége Z értékét a terjedési sebességen keresztül is befolyásolja (vö. (II.64)). A közeg összenyomhatósága a terjedési sebességen keresztül szerepel a formulában, így Z a következő módon is kiszámítható:

$$Z = \sqrt{\frac{\rho}{\kappa}} \cdot c. \quad (\text{II.68})$$

mely alapján belátható, hogy Z valóban anyagi állandó, hiszen kiszámítható két, az anyagra jellemző paraméter (ρ és κ) hányadosaként. A II.4. táblázat ötödik oszlopában az egyes közegek akusztikus impedanciáját is feltüntettük. A későbbiekben szó lesz az impedanciának az UH-reflexióban játszott fontos szerepéről is.

2.5. táblázat - II.4. táblázat. Néhány anyag akusztikus tulajdonságára jellemző adatok

anyag	ρ sűrűség	κ kompresszibilitás	c terjedési sebesség	Z akusztikus impedancia	$\alpha(f \cdot x)$ fajlagos csillapítás
	[kg/m ³]	[1/GPa]	[m/s]	[kg/(m ² · s)]	[dB/(cm · MHz)]
levegő	1,3	7650	331	0,00043 · 10 ⁶	1,2
tüdő	400	5,92	650	0,26 · 10 ⁶	–
zsír	925	0,51	1470	1,42 · 10 ⁶	0,63
víz, 20 °C	998	0,45	1492	1,49 · 10 ⁶	0,0022
víz, 36 °C	994	0,42	1530	1,53 · 10 ⁶	–
agy	1025	0,42	1530	1,56 · 10 ⁶	0,85
lágyszövet	1060	0,40	1540	1,63 · 10 ⁶	0,3–1,7
máj	1060	0,38	1560	1,65 · 10 ⁶	0,94
vese	1040	0,40	1560	1,62 · 10 ⁶	1,0
lép	1060	0,39	1566	1,64 · 10 ⁶	–
izom	1060	0,40	1568	1,63 · 10 ⁶	1,3–3,3
vér	1060	0,38	1570	1,61–1,66 · 10 ⁶	0,18
szemlencse	1140	0,34	1620	1,84 · 10 ⁶	2,0
csontvelő	970	0,36	1700	1,65 · 10 ⁶	–
csont, porózus	1380	0,08	3000	2,2–2,9 · 10 ⁶	–

II. rész – Sugárzások és kölcsönhatásuk az „élő” anyaggal

csont, tömör	1700	0,05	3600	$6,12 \cdot 10^6$	20,0
alumínium	2700	0,009	6400	$17,28 \cdot 10^6$	–
csatológél	–	–	–	$6,5 \cdot 10^6$	–
ólom-cirkonát-titanát	7650	0,009	3791	$29 \cdot 10^6$	–
kvarc	2650	0,011	5736	$15,2 \cdot 10^6$	–

A nyomás és a részecskesebesség kapcsolata

Ez a kapcsolat egyszerű dinamikai megfontolásokkal meghatározható. Tekintsünk egy vízszintes lapon fekvő, hosszú A keresztmetszetű homogén rudat, amelynek sűrűsége ρ . Ha a rúd egyik végére a hosszirányban igen rövid Δt ideig F erő hat, például a rúd végére kalapáccsal ráütünk, akkor ez a – rúd összenyomásában megnyilvánuló – zavar longitudinális hullámként c sebességgel halad a rúdban, és Δt idő alatt $l = c\Delta t$ távolságra jut el. Legyen a rúd hossza éppen ezzel az l távolsággal egyenlő. A folyamatot a következőképpen részletezhetjük: az erőhatás kezdetekor, $t = 0$ -nál még az egész rúd nyugalomban van. Δt idővel később a rúd megütött vége már valamilyen Δl -lel elmozdult, de a másik véglapja még éppen nyugalomban van. Újabb Δt idő elteltével ez a véglap is elmozdul Δl -lel (azaz a benne lévő részecskék mozdulnak el ennyivel). Az erőlkés következtében végső soron az egész rúd $v = \Delta l/\Delta t$ sebességgel elmozdul, és így mv impulzusra tesz szert. Impulzusa tehát Δt idő alatt ennyivel változott. Newton II. törvénye szerint az erőlkés és az impulzusváltozás egyenlő egymással (azaz $F\Delta t = \Delta mv$, vagy a közismertebb átrendezett formában $F = ma$): $F\Delta t = \rho A c \Delta t v$, ahol $\rho A c \Delta t = m$ a rúd tömege. Innen a nyomás: $p = \rho c v$.

A hang intenzitása

II.12. megjegyzés. Az elektromosságban felhasznált szinuszos jelekre vonatkozó összefüggés ($U_{\text{eff}}^2 = U_{\text{max}}^2/2$) természetesen igaz a szinuszosan változó nyomásértékekre is:

$$\Delta p_{\text{eff}}^2 = \frac{\Delta p_{\text{max}}^2}{2}.$$

Továbbá az elektromos analógia szerint: az elektromos teljesítmény és a feszültség kapcsolata azonos alakú

$$P_{\text{el}} = \frac{1}{Z_{\text{el}}} U_{\text{eff}}^2.$$

összefüggés:

A hanghullámban a közeg részecskéinek mozgásállapota, egyúttal mozgási energiája is továbbadódik. Az energiaterjedés jellemzésére a különböző sugárzásoknál, így a hanghullámoknál is általánosan használt mennyiség az **intenzitás** (J , energiaáram sűrűség, teljesítménysűrűség), amely a sugárzás irányára merőlegesen elhelyezett egységnyi felületen időegység alatt áthaladó energiát jelenti, egysége W/m^2 . A sugárzás átlagos intenzitása a hullámmozgás amplitúdójával van kapcsolatban, egyenesen arányos annak négyzetével (lásd II/2.1.3. rész (II.27) összefüggés):

$$J \sim (\Delta p_{\text{max}})^2. \quad (\text{II.69})$$

Az akusztikus impedancia segítségével az arányossági tényező is kifejezhető (lásd II.12. megjegyzés):

$$J = \frac{1}{2Z} \Delta p_{\text{max}}^2 \quad (\text{II.70})$$

$$J = \frac{1}{Z} \Delta p_{\text{eff}}^2 \quad (\text{II.71})$$

Intenzitás és szöveti károsodás

A (II.70) formula alapján látható, hogy adott hangintenzitáshoz adott mértékű nyomásingadozás tartozik a közeg anyagi minőségétől függően. A nyomásingadozások mértéke a szövetekben igen fontos kérdés, hiszen ezek vezethetnek a szövetek károsodásához UH-alkalmazásokban. A későbbiekben tárgyalt intenzitás határértékek, amelyeket humán alkalmazásokra előírnak, éppen ebből a körülményből következnek. A veszélyesség szempontjából jelentősége van annak is, hogy a nyomásamplitúdóval jellemezhető maximális és minimális nyomásértékek közötti ingadozás milyen közeli tartományokat érint. Ezt a hullám fél hullámhossza adja meg. Az UH-tartomány nagy frekvenciájából következően a hullámhossz mm – µm nagyságú (lásd (II.62)), tehát az ingadozások tarományja a sejtek méretével egyezik meg. Ez a jelentős mechanikai igénybevétel elég a szövetek sejtjeit összetartó kötőterek legyőzésére, üregek képzésére (kavitációra). Az üregek megszűnését kísérő nagy energiafelszabadulás kémiai következményei (szabad gyökök képződése, H₂O₂-felszabadulás, DNS-lánc-törés, stb.) vezetnek a fizikai hatások (pl. erős felmelegedés) mellett a szövetek károsodásához (lásd még *Nyomásingadozások a szövetekben UH terjedésekor*).

Nyomásingadozások a szövetekben UH terjedésekor

Az ultrahang terápiás alkalmazásokban 2-3 W/cm² -es (azaz 2-3·10⁴ W/m²) intenzitású UH sugárzásokat is használnak. 2,5 W/cm² intenzitásérték esetén a (II.71) összefüggésekből és a II.4 táblázat adataiból megbecsülhető a nyomásingadozás mértéke például izomszövetben: a nyomásamplitúdó értékére a légköri nyomás közel háromszorosát kapjuk. Ez azt jelenti, hogy a hanghullám frekvenciájának megfelelő gyakorisággal – például másodpercenként egymilliószor – egy adott helyen a szövetben a nyomás a normális 1 atm körül, 4 atm és –2 atm között váltakozik.

Energiaveszteség terjedés közben

Az UH-ban terjedő energia sűrűlódás, hőfejlődés miatt a terjedés közben veszteséget szenved, a sugárzás intenzitása csökken. A közeg energiafelvételét összefoglaló néven **abszorpciónak** szokás nevezni. Párhuzamos nyalábként terjedő hullám esetén a hang – UH sugárzásokra is jó közelítéssel érvényes a sugárzások közegekben tapasztalható intenzitásgyengülését leíró általános törvény (abszorpciós törvény, lásd II/1.1.3.):

$$J = J_0 e^{-\mu x}, \quad (\text{II.72})$$

ahol J_0 a megfigyelés kezdőpontjában, J pedig a közegben x távolság megtétele után mért intenzitás. A sugárzásoknál általánosan bevezetett fogalmakat (lásd a II/1.1.3. részt) itt is használhatjuk (abszorpciós együttható, felezési rétegvastagság stb.).

Egy közeg abszorpcióképessége az anyagi minőségen kívül a hanghullám frekvenciájától is függ. Kézenfekvőnek látszik, hogy minél nagyobb a mechanikai hullám frekvenciája, annál nagyobb az energiavesztesége a közegben egy adott távolságon belül, hiszen másodpercenként ebben az esetben több rezgőmozgás játszódik le, amelyek mindegyike sűrűlódásos hőveszteséggel jár. Az UH diagnosztikai frekvenciatartományban az abszorpciós együttható jó közelítéssel arányos a frekvenciával: $\mu \sim f$.

Gyakorlati alkalmazásokban az intenzitásgyengülés jellemzésére gyakran használják az ún. **csillapítást** (α), amit decibel (dB) egységben a következő formula segítségével adhatunk meg:

$$\alpha = 10 \cdot \lg \frac{J_0}{J}. \quad (\text{II.73})$$

Pl. ha egy közegben századrészre csökkent az intenzitás egy adott távolságon, akkor $\lg(J_0/J) = \lg 100 = 2$, azaz a közeg által okozott csillapítás 20 dB. A most bevezetett csillapítás természetesen összefügg az abszorpciós együtthatóval. A (II.73) formula felhasználásával:

$$\alpha = 10 \cdot \mu \cdot x \cdot \lg e, \quad (\text{II.74})$$

tehát adott x esetén α arányos μ -vel. Mivel μ a diagnosztikai frekvenciatartományban arányos a frekvenciával, ez α -ra is igaz. Ebből következően az $\alpha/(f \cdot x)$ mennyiség egy a frekvenciától független, az adott anyagra jellemző állandó, az ún. **fajlagos csillapítás**. Sok esetben a szövetek abszorpciós tulajdonságát ezzel a mennyiséggel jellemzik. Pl. lágyszövetre a fajlagos csillapítás ~1 dB/(cm²MHz). Az így megadott értékek jól használhatók a gyakorlatban, mivel az aktuális intenzitásgyengítést dB-ben könnyen megkapjuk, ha a fajlagos csillapítást szorozzuk az aktuális szövetvastagsággal (cm-ben) és az alkalmazott UH frekvenciájával (MHz-ben). AII.4. táblázat hatodik oszlopában egyes szövetekre jellemző fajlagos csillapításértékeket is megadunk.

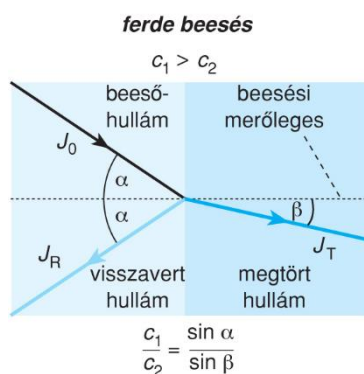
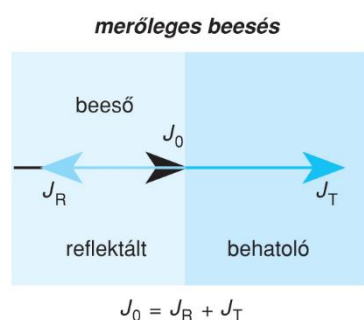
A hullám szóródása a közeg részecskéin

A hanghullámok szóródnak, azaz irányváltozást szenvednek a közeg részecskéin. A tényleges energiaelnyelődés mellett ez a jelenség is hozzájárul a terjedési irány mentén megfigyelhető intenzitáscsökkenéshez. (Sőt az UH nyaláb széttartása, divergenciája miatt is egyre kevesebb energia jut egységnyi felületre, azaz emiatt is csökkenhet az intenzitás.) Gyakorlati alkalmazásokban ezért az abszorpcióra érvényes (II.72) formula abszorpciós együtthatójára egy korrekciós tagot szokták használni, kifejezve, hogy az energiaelnyelésen kívül a fenti okok miatt is csökkenhet a sugárzás intenzitása:

$$\mu = \mu_{\text{absz}} + \mu_{\text{szórás}} \quad (\text{II.75})$$

2.4.3. II/2.4.3. Közegek határán lejátszódó jelenségek

Az előzőekben homogén (mindenütt azonos akusztikus impedanciájú) közegben való hangterjedésről beszéltünk. Két különböző akusztikus impedanciájú tartomány határán új jelenségek léphetnek fel (reflexió, törés), ahogy azt a II.47. ábra mutatja (lásd még *A ferde beesés jelensége és hatása az UH diagnosztikában*).



II.47. ábra. Az ultrahang terjedése és visszaverődése különböző közegek határán

A ferde beesés jelensége és hatása az UH-diagnosztikában

Abban az esetben, ha a határfelületre a sugárzás a merőleges iránytól különböző, azzal az szöget bezáró irányból érkezik, a második közeg eltérő akusztikus impedanciája irányváltozáshoz is vezet, ahogy azt a II.47. ábrán láthatjuk. A diagnosztikában a visszavert jelek felfogása többnyire ugyanazon elemmel történik, amelyik UH adóként a jelet kibocsátotta. A detektálás során észlelt visszavert impulzusjelek nagysága és a beérkezés ideje szolgáltatja a képi megjelenítés alapját. Az egyes határfelületek helye a képen a beérkezési idők alapján alakul ki, feltételezve, hogy a beeső sugárzás és a visszavert jel iránya azonos. Amennyiben a jel a szövetben irányváltozásokat szenved a határfelületeken, ezt a detektálás során mért paraméterekből nem lehet megállapítani, és így a jelfeldolgozás során ezek a határfelületek a képen nem a valóságnak megfelelően fognak kialakulni. Az a) és b) ábrán olyan képtorzítási példákat mutatunk be, amelyek ferde beesésből származnak. Az c) és d) ábra esetén pedig a külső felülethez képest ferde helyzetű különböző UH terjedési sebességű rétegek képtorzító hatását mutatják be (c_k : kisebb terjedési sebesség, c_n : nagyobb terjedési sebesség).

Reflexió

Az UH-diagnosztika az UH-hullámok visszaverődésén alapul. Az impulzus-echo-módszerekkel nyert diagnosztikai felvételeken csak olyan részletek jelennek meg, amelyek határfelületén az UH visszaverődik. A reflexió mértékét a **reflexióképességgel** (R) jellemezzük, amely a reflektált intenzitás (J_R) és a beérkező intenzitás (J_0) hányadosa.

$$R = \frac{J_R}{J_0} \quad (\text{II.76})$$

R egyszerű kapcsolatban áll a határfelület két oldalán található közegek mechanikai tulajdonságaival az akusztikus impedancián keresztül (lásd még a II.13. megjegyzést):

$$R = \left(\frac{Z_1 - Z_2}{Z_1 + Z_2} \right)^2 \quad (\text{II.77})$$

Látható, hogy visszaverődés akkor tapasztalható, ha a két közeg akusztikus impedanciája különbözik. Ha a különbség nagy ($Z_1 \gg Z_2$, vagy $Z_2 \gg Z_1$), akkor a formulában a nagyobb érték mellett a kisebb elhanyagolható, és $R \approx 1$. Ez a **teljes visszaverődés** esete. Az II.5. táblázat adatai alapján látható, hogy a levegő-szövet határon az UH teljesen visszaverődik, azaz a sugárzás nem jut túl ezen a felületen egyik irányban sem. Ugyancsak ez a helyzet az UH-forrás véglapja és a kívül levő levegő határfelületére is: a sugárzás nem tud kilépni a forrás anyagából. Az echo-módszerekben az UH-forrás és az UH-detektor ugyanaz az elem, tehát a probléma a fordított irányban is jelentkezik. Ennek következménye, hogy az UH-sugárzásnak a forrásból a testszövetbe ill. a reflektált jelnek a testszövetből a detektorba való eljuttatásának feltétele, hogy a forrás és a test között **csatolóközeg** helyezkedjen el. Általános elvként elfogadható, hogy a csatolóként használt gél akusztikus impedanciáját a forrás anyagára és a bőr-, zsírszövetre jellemző impedanciákhoz illesszék, (lásd II.5. táblázat).

$$Z_{\text{csatoló}} \approx \sqrt{Z_{\text{forrás}} Z_{\text{bőr}}} \quad (\text{II.78})$$

Amennyiben megvalósítható, a vizes közeg is megfelelő csatolást biztosíthat (vízfürdős alkalmazások).

A csontok, gázok, ill. légyszövetek erősen eltérő akusztikus impedanciájából következik, hogy csontokba, ill. gázterekbe és azok mögé nem „láthatunk” UH segítségével (csontárnyék, kőárnyék stb.).

A diagnosztikában tehát a különböző légyszövetek közötti kis akusztikus különbségek feloldása történik meg. A Z értékekben fennálló kis különbségek (lásd II.5. táblázat) csupán %-nyi, vagy még kisebb R értékeket jelentenek. Az echo-jelek tehát általában meglehetősen gyengék, ami jelfeldolgozási problémákat okoz és nehezíti az egyes határfelületek jeleinek megkülönböztetését. Nagyobb echo-jeleket csak az eredeti intenzitás növelésével kaphatunk, de ennek határt szab a szövetek károsodásának veszélye. A várható legnagyobb és a még hasznosítható legkisebb jel viszonya az UH-diagnosztikában ~100 dB (ezt nevezik „jeldinamikának”).

Fontos gyakorlati kérdés, hogy milyen mélyről várható még detektálható echo-jel. Ebben a kérdésben tekintetbe kell venni az UH-energia elnyelődését is, illetve ennek frekvenciától való függését. Az abszorpciós együttható és a frekvencia közötti arányosságból ($\mu \sim f$) következik, hogy alacsony frekvencia alkalmazásával a detektálási mélység növelhető (ugyanakkor a feloldóképesség romlik).

Annak érdekében, hogy ugyanolyan reflexiók viszonyból származó jel felerősítés utáni nagysága ne függjön attól, hogy milyen mélyről jött az echo, az erősítést úgy szokás szabályozni, hogy az egyre mélyebbről jövő echo-jelek erősítése egyre nagyobb legyen. E módszer (Time Gain Compensation = **TGC** = időbeli erősítés kiegyenlítés; Depth Gain Control = **DGC** = mélységi erősítésszabályozás) korábban 8-10 erősítésszabályozó potenciométer beállítását igényelte. Az újabb elektronikus megoldások – a gyengítés reciprokával való automatikus szorzás – e tekintetben is egyszerűbbé teszik a készülékek használatát.

2.6. táblázat - II.5. táblázat. Néhány határfelület ultrahangra vonatkozó reflexióképessége

határfelület	R
izom/vér	0,0009

zsír/máj	0,006
zsír/izom	0,01
csont/izom	0,41
csont/zsír	0,48
lágyszövet/levegő	0,99

II.13. megjegyzés. Optikai analógia: A fény esetében egy felület reflexióképességének az abszolút

törésmutatóktól való függése:
$$R = \left(\frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right)^2.$$

3. II/3. Ionizáló sugárzások

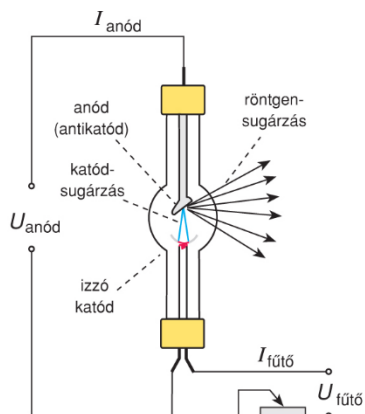
3.1. II/3.1. A röntgensugárzás

3.1.1. II/3.1.1. Általános jellemzők

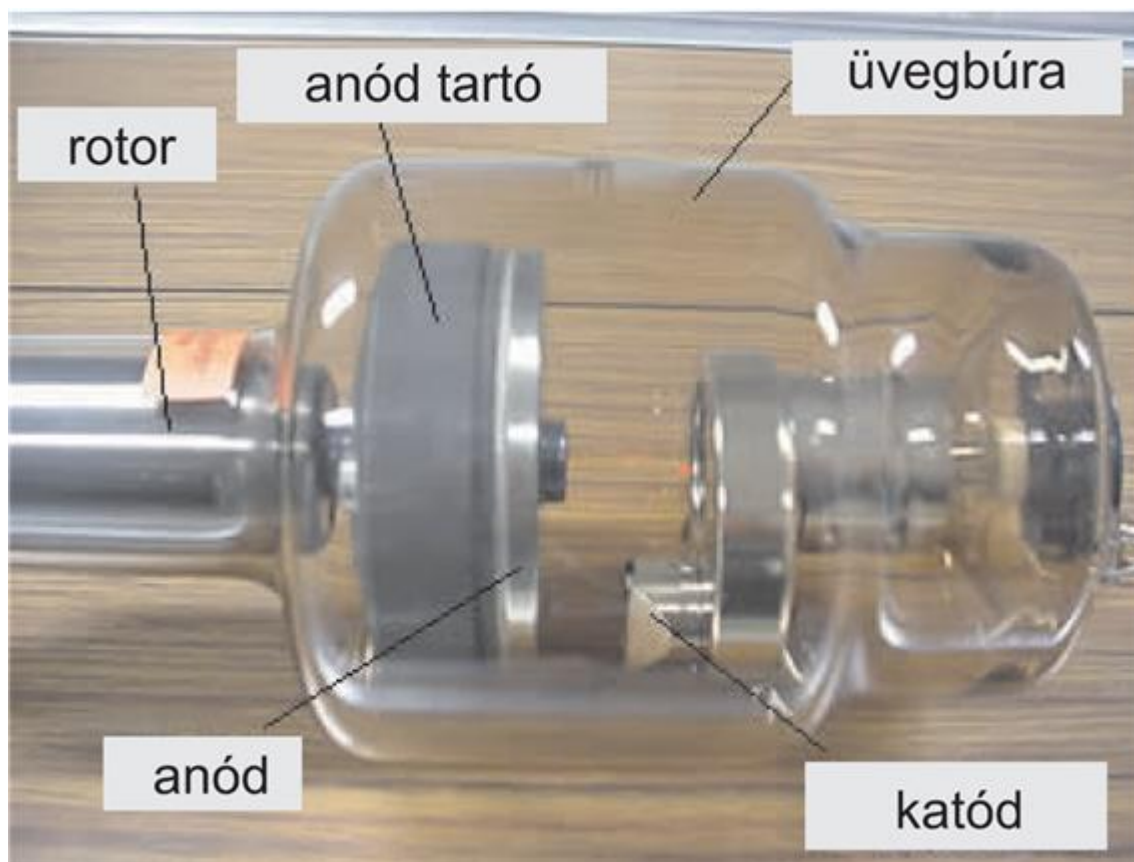
A röntgensugárzások tartománya az elektromágneses sugárzások között az optikai tartománynál néhányszor tíz eV-tal nagyobb fotonenergiáknál kezdődik, és a terápiás röntgensugárzásokat is tekintve egészen a több 10 MeV energiáig tarthat. Ilyenformán átfed a γ -sugárzó izotópokra jellemző fotonenergiákkal. A röntgensugárzás diszkrét atomi elektronállapotok közötti átmenetektől vagy nagy kinetikus energiájú töltött részecskék lefékezése során keletkezik. Az angolszász szakirodalom a mai napig X-sugarak (mint ismeretlen sugarak) néven hivatkozik a röntgensugarakra, amelynek felfedezéséért Wilhelm Konrad Röntgen német fizikus 1901-ben elsőként kapott Nobel-díjat. Az anyaggal való kölcsönhatásaiban tapasztalható legismertebb hatásai: lumineszcenciát kelt, a fotolemezt megfeketíti, kémiai reakciókat indít el, az élő sejtekben morfológiai és funkcionális változásokat okoz. Ezek az anyagban a röntgenfotonok energiájának elnyelése révén létrejövő primer folyamatok következményei, amelyek elsősorban az atomi kötött elektronok ionizációját jelentik. A röntgensugárzás ezért az ún. „ionizáló sugárzások” közé tartozik. A továbbiakban látni fogjuk, hogy a primer folyamat függ az elnyelt foton energiájától, és így a biológiai hatások is különbözőek lesznek a sugárzás különböző energiatarományában. A folyamatoknak ezt a tulajdonságát mind a diagnosztikai, mind a terápiás módszerekben kihasználják. Az orvosi gyakorlatban használt röntgensugárforrások fotonenergia-tartománya a diagnosztikai alkalmazásokban 200 keV-ig terjed ($\lambda \sim 5$ pm), a nagyobb fotonenergiájú, ~ 10 MeV tartományú sugárzásokat terápiás célokra használják.



Wilhelm Konrad Röntgen német fizikus (1845–1923)



II.48. ábra. A röntgenső felépítésének vázlata



II.49. ábra: Megoldás a röntgenső anódjának hűtésére. A tárcsa alakú anód forgástengelyétől eltérő helyen történik meg a katódsugár becsapódása, így forgás esetén a felmelegedés helye egy körgyűrű alakú tartományon belül állandóan változik. Körbefordulás közben lehetőség van a hő elvezetésére

Röntgen kísérleteit anódot és katódot tartalmazó vákuumsővel (katódsugárcsővel) végezte, amelynek falából lépett ki az általa megfigyelt, újfajta, láthatatlan sugárzás. Ehhez hasonló a napjainkban leggyakrabban használt sugárforrás a röntgenső is, melynek vázlatos felépítését a II.48. ábra, míg fényképét a II.49. ábra mutatja be. A röntgenső tehát egy vákuumső, amelynek katódját egy egyszerű fűtőáramkör segítségével izzítjuk. A katód az izzítás mértékétől, azaz a fűtőáramtól ($I_{fűtő}$) függően folyamatosan elektronokat bocsát ki. (Ez szabja meg az anódáram [$I_{anód}$] nagyságát). A katódból kilépő elektronok a katód és az anód (ez utóbbit hagyományosan antikatódnak is hívják) közé kapcsolt nagyfeszültség ($U_{anód}$) hatására felgyorsulnak, majd becsapódnak az anódba, amely nagy rendszámú, magas olvadáspontú fém. Ebből lép ki a röntgensugárzás, amelynek energiafedezetét az elektronok kinetikus energiája szolgáltatja. A becsapódó elektronok energiájának legnagyobb része azonban (> 99 %) hővé alakul, ezért szükséges az anód hűtése (lásd II.49. ábra).

A kilépő elektromágneses sugaraknak – keletkezési mechanizmusukat és tulajdonságaikat tekintve – két különböző komponense van, az ún. **karakterisztikus** és a **fékezési sugárzás**. Ez utóbbi a német „Bremsstrahlung” szó fordítása (a nemzetközi szakirodalomban még az angol nyelvterületeken is ez a változat terjedt el). A röntgensöből kilépő elektromágneses sugárzás elegendően nagy gyorsító feszültség esetén egyszerre tartalmazza a fékezési és a karakterisztikus sugárzást.

II.14. megjegyzés. A röntgensugárzás maximális fotonenergiája

A fűtött katódból hõmozgás okán kilépõ elektronokat gyorsító tér az elektronokon $eU_{\text{anód}}$ munkát végez, ahol e az elektron töltése, $U_{\text{anód}}$ a gyorsító feszültség, vagyis a röntgensöbre kapcsolt nagyfeszültség. E munka az elektron gyorsítására fordítódik, vagyis az elektronok legfeljebb ennyi mozgási energiára tehetnek szert. (A nem tökéletes vákuum miatt a csõ terében fellépõ ütközések és egyéb tényezõk miatt lesznek ennél kisebb mozgási energiájú elektronok is.) Legfeljebb ekkora energia alakulhat át egy lépésben fotonenergiává.

3.1.2. II/3.1.2. A fékezési röntgensugárzás jelensége és spektruma

A fékezési sugárzás az elektronoknak az anód anyagában történõ lefékezõdése során keletkezik azon elektrodinamikai törvény alapján, miszerint a lassuló (illetve gyorsuló) töltés (mint például a rezgõ dipólus is) elektromágneses sugárzás forrása. Az így keletkezõ sugárzás fotonjainak energiáját az elemi lefékezõdési folyamatok energiaváltozása szabja meg. A maximális fotonenergiát akkor nyerjük, ha a felgyorsított elektron egy lépésben teljes mozgási energiáját elveszti. Ennek valószínûsége kicsi, közel 0. A maximális fotonenergia azonban a sugárzás fontos jellemzõje, és könnyen kiszámítható (lásd II.14. megjegyzés).

$$E \cdot U_{\text{anód}} = \epsilon_{\text{max}} = h \cdot f_{\text{max}} \quad (\text{II.79})$$

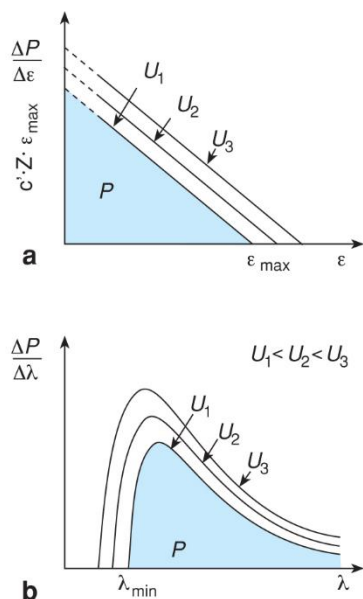
A maximális fotonenergiához tartozó minimális „határhullámhossz” (a $hf = hc/\lambda$ összefüggés alapján):

$$\lambda_{\text{min}} = \frac{h \cdot c}{e} \cdot \frac{1}{U_{\text{anód}}}, \quad (\text{II.80}),$$

ahol h a Plank-állandó, c a fénysebesség, e az elektron töltése. Ezt az összefüggést **Duane–Hunt-törvénynek** nevezik. Az összefüggésben h , c , és e természeti állandók, tehát a törvény azt fejezi ki, hogy a határhullámhossz fordítottan arányos a gyorsítófeszültséggel.

A II.50a ábra a fékezési sugárzás emissziós spektrumát, azaz az adott energiájú fotonok által kisugárzott teljesítményt (pontosabban a $\Delta P/\Delta \epsilon$ mennyiséget) mutatja a fotonenergia (ϵ) függvényében Kramers (1923) javaslata alapján (lásd „Néhány gondolat Kramers javaslatával kapcsolatban”). Az ábrán egyszerű lineáris függvények láthatók, amelyeknek y tengelymetszete $Z\epsilon_{\text{max}}$ -al arányos. (A különböző egyenesek különböző anódfeszültséghez tartoznak.) A spektrumot azonban általában nem ilyen formában, hanem a kisugárzott teljesítmény hullámhossz szerinti eloszlásaként ($\Delta P/\Delta \lambda$ függvényében) szokás megadni. Ez a függvény az elõbbi eloszlásból az ($\epsilon = hc/\lambda$) transzformációval kapható. Ez a spektrum látható a II.50b ábrán.

Megfigyelhetõ, hogy a gyorsítófeszültség ($U_{\text{anód}}$) növekedtével a (II.80) összefüggésnek megfelelõen λ_{min} értéke a rövidebb hullámhosszak felé tolódik, ugyanakkor a spektrum hullámhossztartománya kiszélesedik és a görbe alatti terület nõ.



II.50. ábra. A fékezési röntgensugárzás Kramers elmélete alapján kiszámított spektruma a) a fotonenergia és b) a hullámhossz függvényében ábrázolva, különböző gyorsítófeszültségek ($U_{\text{anód}}$) esetén.

Néhány gondolat Kramers javaslatával kapcsolatban

Az atommag közelében elhaladó elektronok veszítenek energiájukból, azaz lassulnak. Azok lassulnak a legjobban, amelyek a legközelebb jutnak a maghoz, valószínűsíthető azonban, hogy ezeknek a száma a legkisebb.

Az energiavesztés és így az emittált foton energiája a részecske kinetikus energiájától és az erőtér nagyságától függ. Ez utóbbit a magtól való távolság, illetve a mag töltése befolyásolja.

A nagyobb rendszám nagyobb hatásfokú lefékeződést jelent, így a keletkező fotonok száma ($N(\epsilon)$) Z növekedésével monoton növekszik.

A nagyobb energiájú fotonok a maghoz közelebb haladó elektrontól származnak. Kramers elgondolása szerint $N(\epsilon)$ fordítva arányos a fotonenergiával, így végső soron

$$N(\epsilon) = \text{konst}_1 \cdot Z \cdot \left(\frac{\epsilon_{\text{max}}}{\epsilon} - 1 \right).$$

(A képletből kiolvasható, hogy ha $\epsilon = \epsilon_{\text{max}}$, a fotonok száma nulla.) Mivel $N(\epsilon)\epsilon$ az ϵ fotonenergiájú sugárzás eredő energiája, ami (időben állandó sugárzást feltételezve) arányos az ehhez tartozó teljesítménnyel, felírhatjuk, hogy

$$\frac{\Delta P}{\Delta \epsilon} = \text{konst}_2 \cdot Z \cdot (\epsilon_{\text{max}} - \epsilon).$$

3.1.3. II/3.1.3. A fékezési sugárzás során kisugárzott összteljesítmény

A II.50. és a II.51. ábrák mindegyikén (a, b) a görbe alatti terület a sugárzás összteljesítményét ($P_{\text{összes}}$) adja meg. A gyorsítófeszültség ($U_{\text{anód}}$) növelése növeli az anódba ütköző elektronok kinetikus energiáját, és így az emittált sugárzás összteljesítményét is. A II.50b ábra spektrumsorozata ezt a jelenséget is jól tükrözi azzal, hogy a görbe alatti terület a gyorsítófeszültség ($U_{\text{anód}}$) növekedtével növekszik. Az összteljesítmény kiszámításához mégis kézenfekvőbb a II.50a ábra használata, mert egy háromszög területét sokkal egyszerűbb meghatározni:

(II.81)

Látható tehát, hogy az összteljesítmény a gyorsítófeszültség négyzetével arányos. Belátható az is, hogy annál nagyobb a kisugárzott összteljesítmény, minél több elektron csapódik időegységenként az anódba, tehát minél

nagyobb az anódáram ($I_{\text{anód}}$). Mivel ez a mennyiség csak a folyamatban részt vevő elektronok számát méri, ezért ennek hatása egyszerű arányosságban jelentkezik. Így a fékezési sugárzás összeteljesítménye:

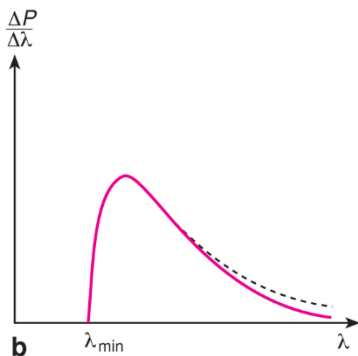
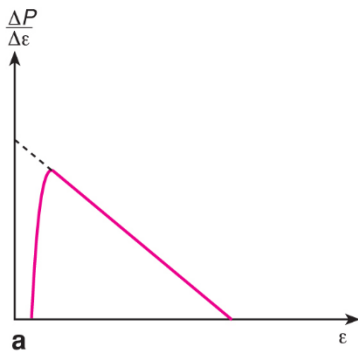
$$P_{\text{összes}} = C_{\text{Rtg}} \cdot U_{\text{anód}}^2 \cdot Z \cdot I_{\text{anód}}, \quad (\text{II.82})$$

ahol $U_{\text{anód}}$ a gyorsítófeszültség, $I_{\text{anód}}$ az anódáram, Z az anód anyagának rendszáma, C_{Rtg} pedig egy arányossági tényező, értéke a mérések szerint

$C_{\text{Rtg}} \approx 1.1 \cdot 10^{-9} \text{V}^{-1}$. A formula alapján a sugárzásnak a röntgensóvel történő előállítására jellemző hatásfokot (η) is megadhatjuk.

$$\eta = \frac{P_{\text{kisugárzott}}}{P_{\text{befektetett}}} = \frac{C_{\text{Rtg}} \cdot I_{\text{anód}} \cdot U_{\text{anód}}^2 \cdot Z}{I_{\text{anód}} \cdot U_{\text{anód}}} = C_{\text{Rtg}} \cdot U_{\text{anód}} \cdot Z. \quad (\text{II.83})$$

Általában elmondható, hogy az anódban az elektronok által bevitt energia főként hővé alakul; a röntgensó igen kis hatásfokkal állít elő röntgensugárzást. Például volfrámanód és 100 kV gyorsítófeszültség esetén $\eta \approx 0,008$, < 1 %.

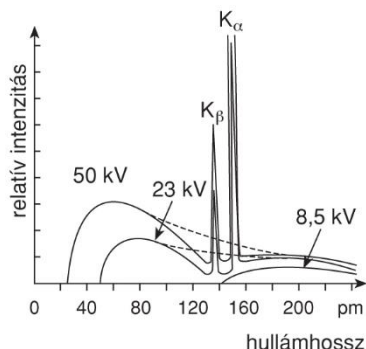


II.51. ábra. A fékezési röntgensugárzás számított (pontozott vonal) és „mért” (folytonos vonal) spektruma a) a fotonenergia és b) a hullámhossz függvényében ábrázolva. A legfontosabb különbség – nevezetesen, hogy a kis fotonenergiák (hosszú hullámhosszak) esetén az abszorpciós folyamatok miatt kevesebb a kisugárzott teljesítmény – jól megfigyelhető. Ezek a folyamatok szűrők segítségével fokozhatók, így tovább csökkenthető a lágy röntgensugárzás aránya.

3.1.4. II/3.1.4. Karakterisztikus röntgensugárzás

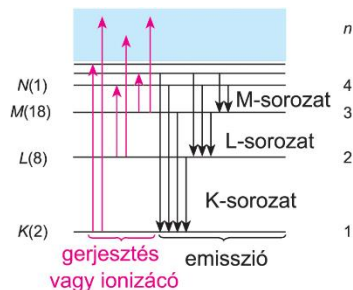
A karakterisztikus sugárzás az anód anyagára jellemző („karakterisztikus”) emissziós vonalakkól áll, amelyek a fékezési sugárzás folytonos spektrumából nőnek ki (lásd II.52. ábra). A karakterisztikus vonalak csak bizonyos nagyságú gyorsítófeszültség elérése felett tapasztalhatók, amelynek nagysága függ az anód anyagától. A jelenség hasonlít a vonalas spektrumú fényemisszióhoz, és eredete hasonlóan diszkrét elektronállapotok közötti

átmenet. A röntgensugárzás tartományába eső energiakülönbségek azonban csak nagyobb rendszámú atomokban alakulnak ki a maghoz közeli pályák közötti átmenetekben.



II.52. ábra. Fékezési sugárzásra rátevődő (szuperponálódó) karakterisztikus spektrum Cu-anód esetén. A gyorsítófeszültség növekedésével, a Duane–Hunt-szabálynak megfelelően a minimális hullámhossz eltolódik balra, de a karakterisztikus sugárzásokhoz tartozó K -vonalak helyben maradnak. Az is látható, hogy a fékezési sugárzás spektruma a vonalak környékén eltér az eredetitől, amit a szaggatott vonal jelöl. Ennek oka az, hogy azok az elektronok, amelyek létrehozzák a karakterisztikus sugárzást, nem vesznek részt a fékezési komponens produkciójában, és így ennek intenzitása csökken

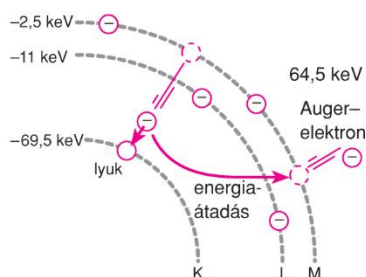
Általában igaz, hogy a főkvantumszám szerint szomszédos elektronállapotok energiakülönbsége a maghoz közeledve nő (lásd az I/1.3.1. részt), így nő az ilyen átmeneteket kísérő elektromágneses sugárzás frekvenciája is (II.53. ábra). Az energiakülönbségek a kötött elektronok számával (rendszámmal) is nőnek az elektrosztatikus árnyékolási effektusok miatt, és így nagyobb rendszámú atomoknál a belső pályákról való ionizáció energiája jelentősen megnövekszik. Ebből következően a K , majd az L , M , ... héjon végződő elektronátmeneteket kísérő fotonemissziók fotonenergiája az optikai tartományhoz képest nagyobb. (Emlékeztetünk arra, hogy optikai emisszió (lumineszcencia) gerjesztett elektronállapotból jön létre, az alapállapotban betöltetlen nívók és az alapállapot nívója között.)



II.53. ábra. A Cu-atom $n = 1, 2, 3, \dots$ főkvantumszámú elektronpályáinak energiaértékei relatív energiaskálán. Az n főkvantumszám egyes értékeihez rendelt nívókra sorra a K, L, M, \dots jelöléseket használják.

A karakterisztikus röntgensugárzás akkor keletkezik, ha a becsapódó elektronok mozgási energiája összemérhető a belső héjakon keringő elektronok kötési energiájával, és kölcsönhatásuk következtében e belső elektronok valamelyike kiszakad az atomi kötelékből. Az így keletkező üresedésekre az anód atomjainak külső héjairól elektronok léphetnek be, ezáltal csökkentve a teljes atom összenergiáját, az energiakülönbséggel azonos energiájú foton kisugárzása közben (lásd II.53. ábra). (Amennyiben a szomszédos héjról történik a beugrás, α , amennyiben a kiütött elektron héjához képest második szintről, β alsó index jelzi a folyamat részleteit. A K héjon végződő átmenetek között beszélünk például K_α és K_β karakterisztikus sugarakról.)

Ez a karakterisztikus sugárzás az atomnak azonban csak egyik lehetősége arra, hogy a beugró elektron energiátöbbletétől megszabaduljon. Egy másik lehetőség az ún. Auger-elektron keltése. Ilyenkor egy külső héjon keringő elektron veszi fel ezt a fotonenergiát, amelynek révén kiszabadul atomi kötelékéből, és meglehetősen nagy mozgási energiával távozik, mint azt a II.54. ábrán látható volfrámra vonatkozó energiaértékek mutatják. (Az Auger-elektron energiája nem sokkal kisebb, mint magának a röntgensugárzás felgyorsított elektronnak az energiája, vagyis elég nagy ahhoz, hogy másodlagos röntgensugárzást kelthessen magában az anód anyagában.) Mind a karakterisztikus vonalak fotonenergiája, mind az Auger-elektronok energiája anyagszerkezeti információ.



II.54. ábra. Auger-elektron keletkezése

3.1.5. II/3.1.5. A röntgensugárzás abszorpciója

Röntgensugarakra nem érvényes az az elv, hogy a kibocsátott sugárzással megegyező frekvenciájú sugárzást az atomok abszorbeálni is képesek. Ennek az oka az, hogy egy belső megüresedett elektronállapot (például a K héjon) legnagyobb valószínűséggel a hozzá legközelebbi állapotokból (pl. L héjról) töltődhet be. Az inverz $K \rightarrow L$ átmenet azonban az L héj telítettsége miatt nem lehetséges.

A röntgensugárzás elnyelődésének jelensége, a folyamat természete, függése az anyagi jellemzőktől olyan ismeretek, amelyek alapvető jelentőséggel bírtak az orvosi diagnosztika, terápia és az ezekhez a területekhez kapcsolódó sugárvédelem módszereinek kidolgozásánál.

A röntgensugárzás elnyelődését általánosan az exponenciális sugárgyengítési törvény írja le (vö. II/1.1.3. rész):

$$J = J_0 \cdot e^{-\mu x}, \quad (\text{II.84})$$

ahol J_0 a planparallel síkokkal határolt, homogén, x vastagságú abszorbens rétegeként elképzelt elnyelő közegre merőlegesen beeső sugárnyaláb intenzitása, J a réteg után, a belépő nyaláb irányában tapasztalható intenzitás és μ a gyengítési együttható. Az elnyelő közeg (orvosi alkalmazásokban a szövetek), valamint a közeg és a sugárzás kölcsönhatásának összes, a jelenség szempontjából lényeges tulajdonsága a μ állandóban van összesűrítve. Kicsit egyszerűsíti a folyamat jellemzését, ha leválasztjuk a kölcsönhatás mennyiségi részét, amit szerencsésen a „ ρ ” sűrűségen keresztül szorzótényezőként lehet megtenni, bevezetve a

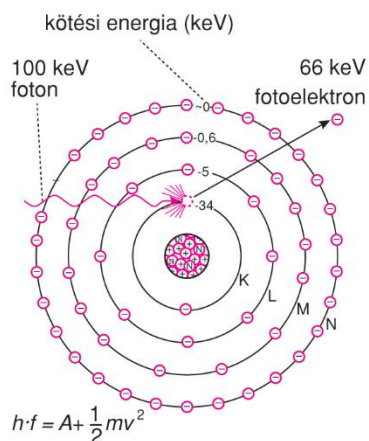
$$\mu = \mu_m \cdot \rho \quad (\text{II.85})$$

felírási módot, ahol μ_m a cm^2/g -ban kifejezett tömeggyengítési együttható, amely tehát tartalmazza a sugárzás fotonenergiájától és az anyagi minőségtől való függést.

A következőkben, részleteiben tárgyaljuk a röntgenfotonok elnyelődését okozó fontosabb jelenségeket. A tárgyalás során a röntgensugárzástól nyerhető röntgensugárzás diagnosztikai alkalmazásai szempontjából fontos jelenségekre és az ennek megfelelő 10–200 keV fotonenergia-tartományra koncentrálnunk.

3.1.6. II/3.1.6. A röntgensugárzás abszorpciójához vezető kölcsönhatások

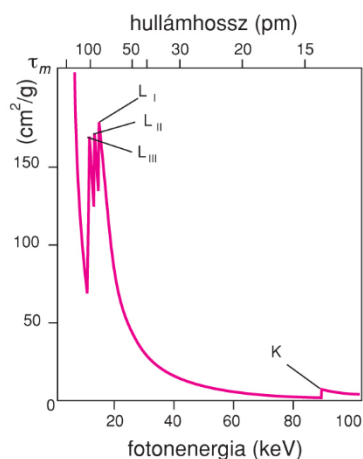
Az abszorpció során a röntgensugárzás intenzitáscsökkenése különböző típusú kölcsönhatások révén jöhet létre. A röntgensugárzás az „ionizáló” sugárzások közé tartozik, azaz a primer és szekunder energiaátadási mechanizmusok töltéshordozók (nagyenergiájú szabad elektronok) keltésével járnak. A röntgendiagnosztikai alkalmazásokban (10–200 keV) az elnyelődés vezető primer folyamata a **fotoeffektus**.



II.55. ábra. A fotoeffektus mechanizmusa

Fotoeffektus. A röntgenfoton ilyen esetben teljes energiáját átadja a közeg atomi kötelékéhez tartozó és a belső pályák egyikén található elektronnak. Ennek hatására az utóbbi kiszakad atomi kötelékéből. A folyamatot a II.55. ábra szemlélteti. A beeső foton teljes energiája ($\epsilon = hf$) részben a kiszakított elektron kötési energiáját ($E_{\text{köt}}$? $E_{\text{ionizáció}}$), részben az így felszabadult elektron mozgási energiáját fedezi, mint ezt az alábbi egyenlet kifejezi:

$$\epsilon = E_{\text{köt}} + E_{\text{mozgási}} \quad (\text{II.86})$$

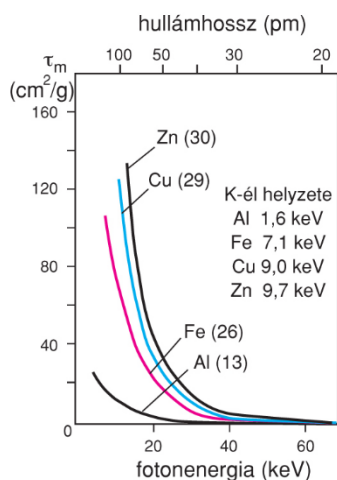


II.56. ábra. A τ_m értékének függése a fotonenergiától ólom esetében

A mozgási energiával távozó elektron a közegben (például a szöveteinkben) – a röntgensugárzás keletkezéséről szóló részben foglaltakkal analóg módon – másodlagos (fékezési és karakterisztikus) röntgensugárzást is kelthet. Végül a kinetikai energiáját elvesztett elektron befogódhat valamilyen atomi kötelékbe, például vízmolekulákkal léphet kölcsönhatásba, és hidratált elektron formájában okozhat további ionizációkat. (E másodlagos jelenségek a többi gyengülési mechanizmus kapcsán is szerepet játszanak.) A fotoeffektus gyengítési együtthatójára a μ helyett a τ ($\tau = \tau_m \rho$) jelölést szokás használni. Kísérleti eredmények alapján a τ_m jellegzetesen függ a röntgensugárzás fotonenergiájától (lásd II.56. ábra). Bizonyos fotonenergiáknál az abszorpció valószínűsége megnő – karakterisztikus abszorpciós vonalak, élek láthatók, amelyek a kisebb fotonenergiák felé jelentősen emelkedő, folytonosan görbülő függvényre rakódnak rá. Az abszorpciós vonalak (L_I , L_{II} , L_{III}), illetve él (K) az ábrán az illető nívókról történő ionizációra jellemző átmeneteket jelölik (több alhéj esetén több vonal is megjelenik). A röntgendiagnosztika fotonenergia-tartományában csak a nagy rendszámú anyagok rendelkeznek abszorpciós éllel, vonalakkal. Az élő szervezetben előforduló atomok (O, N, C, P, Ca) kisebb rendszámúak, és ennek megfelelően a K héj ionizációs energiája is kisebb fotonenergiát jelent, mint a diagnosztikai tartomány. Emiatt a szövetek röntgensugárzási elnyelőképességét a II.57. ábrán látható atomokhoz tartozó τ_m -függvényekhez hasonló, folytonosan változó hatványfüggvények jellemzik. Az ábrán látható, hogy a fotonenergián kívül a τ_m értéke a rendszámtól is jelentősen függ. A gyakorlatban előforduló esetekben a

$$\tau_m = \text{konst} \cdot \frac{Z^3}{\epsilon^3} = C \cdot \lambda^3 \cdot Z^3 \quad (\text{II.87})$$

hatványfüggvény-leírás jól jellemzi a jelenséget. A C „állandó” értéke $5,5-6,5 \text{ cm}^2/\text{g nm}^3$.



II.57. ábra. A τ_m értékének függése a fotonenergiától különböző elemek esetében

A (II.87) függvény képezi a röntgensugárzás orvosi alkalmazásainak alapját az orvosi diagnosztikától a terápiáig és a sugárvédelem szempontjaiig (lásd még a „Lágy” és „kemény” röntgensugárzás, valamint a *Pozitív és negatív kontrasztanyagok* részeket). Megérthetjük, hogy pl. miért használnak a röntgenszó kollimátoraként ólmot ($Z = 82$) és a bőrben sugárterhelést okozó lágy komponensek kiszűrésére kisebb rendszámú fémszűrőket (pl. Al : $Z = 13$), vagy a diagnosztikai módszerekben használt kontrasztanyagok kiválasztását. A (II.87) formula alkalmazásához természetesen ismerni kell a közeg rendszámát. Legtöbb esetben nem számolhatunk egyetlen tiszta komponenssel, pl. a szöveteknél sem. Ha azonban ismert a rendszer kémiai összetétele, a móltörtet w_i súlyfaktornak felfogva a közeghez egy „effektív” rendszámot rendelhetünk:

$$Z_{\text{eff}} = \sqrt[3]{\sum_{i=1}^n w_i Z_i^3}, \quad (\text{II.88})$$

ahol n = a komponensek száma, Z_i az i -edik komponens rendszáma.

A II.6. táblázatban néhány orvosi szempontból is fontos közeg effektív rendszámát és sűrűségét tüntettük fel. Látható, hogy a lágy szövetek és a levegő effektív rendszáma nagyon hasonló, pedig a röntgensugárzás elnyelése nyilvánvalóan jelentősen különbözik a két közegben. Nem szabad azonban elfelejtenünk arról, hogy Z_{eff} a τ_m tömeggyengítési együttható értékét szabja meg, a gyengítési törvényben azonban $\tau_m \rho$ szerepel. A sűrűségbeli jelentős különbség is okozhatja az abszorpcióképességek különbözőségét.

2.7. táblázat - II.6. táblázat. Néhány közeg effektív rendszáma és sűrűsége

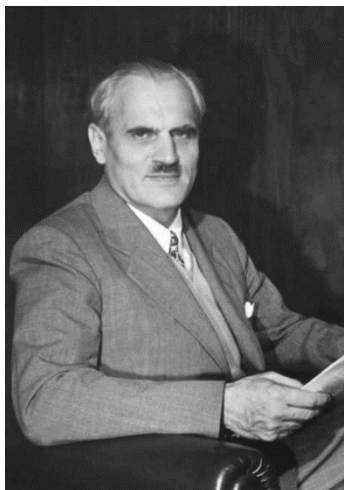
közeg	Z_{eff}	ρ (g/cm ³)
levegő	7,3	$1,3 \cdot 10^{-3}$
víz	7,7	1
lágy szövet	7,4	1
csontszövet	13,8	1,7-2

Compton-effektus. A valamely közegen áthatoló röntgenfoton gyakran az atomi kötélekhez tartozó elektronok közül a külsőkkel lép kölcsönhatásba. Ez a folyamat (II.58. ábra) úgy zajlik, hogy a röntgenfoton nem a teljes hf

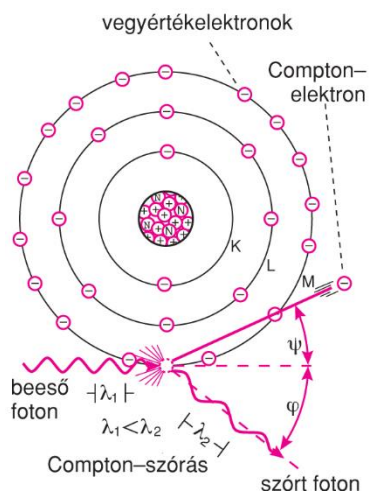
energiáját adja át az elektronnak, amellyel ilyen kölsönhatásba kerül, hanem annak csak egy részét. Az átadott energiahányad fedezi az elektron kiszakításához szükséges munkát ($E_{\text{köt}}$) és a mozgásához szükséges (kinetikai) energiát ($E_{\text{mozgási}}$).

A maradék hf' energiát hordozó foton a beeső foton pályájával ϕ szöget bezáró útvonalon halad tovább. (Vagyis a beeső, hf energiájú foton megszűnik létezni, helyébe az ennél kisebb hf' energiájú szórt foton lép.)

$$hf = E_{\text{köt}} + hf' + E_{\text{mozgási}} \quad (\text{II.89})$$



Arthur Holly Compton amerikai fizikus (1892–1962).



II.58. ábra. Compton-effektus

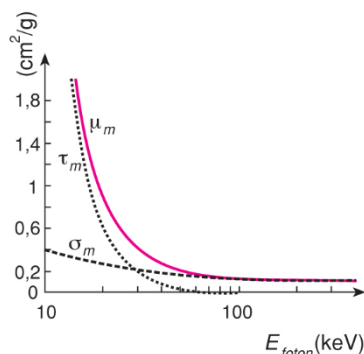
Felvetődik tehát a kérdés, hogy ez a szóródási jelenség miképpen járul hozzá az intenzitáscsökkenéshez, amelyet a közegen áthaladó sugárnyaláb keresztmetszetében elhelyezett detektorral észlelhetünk. (Ez a kérdés legfeljebb a másodlagos sugárzási jelenségek figyelembevétele miatt vetődik fel a fotoeffektus esetében, ahol a beeső foton megszűnik létezni, tehát az intenzitás nyilvánvalóan csökken.) Nyilvánvaló, hogy a ϕ szögben kilépő fotonokat nem észleli az eredeti irányban elhelyezett detektor, így a folyamat a röntgensugárzás irányában gyengülést eredményez. (A lendületmegmaradás törvényének segítségével a ϕ szög is meghatározható.)

A Compton-szórásnak is nevezett jelenség révén bekövetkező sugárintenzitás-gyengülést a $\sigma = \sigma_m \cdot \rho$ elnyelési együtthatóval jellemezzük. A fotoeffektussal és Compton-effektussal történő intenzitásgyengülést független eseményekként tekintve a kétféle jelenség gyengítési együtthatói összeadódnak:

$$\mu = \tau + \sigma \quad (\text{II.90})$$

A röntgensugárzás orvosi alkalmazásaiban a Compton effektus nem játszik akkora szerepet. σ_m a rendszámától igen gyengén függ, legfeljebb lineárisan, tehát az átvilágításkor kialakuló kontraszthoz e tekintetben nem járul hozzá jelentősen. A lágy szövetek viselkedését a röntgensugárzás elnyelődésében jól modellezi a víz közeg viselkedése. A σ_m és τ_m egymáshoz viszonyított értékeit a röntgendiagnosztika fotonenergia-tartományában a II.59. ábra mutatja. Látható, hogy lágy sugárzásnál a τ_m értékei messze meghaladják σ_m értékeit. Nagyobb fotonenergiáknál a σ_m dominál, de gyakorlatilag nem változik egy széles energiatartományban; a 0,2 cm²/g állandó értékkel jellemezhető.

A fentiekben tárgyalt, az eredeti röntgensugár-intenzitást csökkentő jelenségek mellett meg kell még említeni a klasszikus vagy koherens szóródást, amely a fotonok irányváltozását eredményezi az atomok elektronfelhőivel való energiavesztés nélküli kölsönhatás után. Az ennek megfelelő gyengítési állandó szintén additíven veendő figyelembe a μ eredő gyengítési együttható kialakításában.



II.59. ábra. A különböző tömeggyengítési együtthatók függése a fotonenergiáktól a víz esetében

„Lágy” és „kemény” röntgensugárzás

A (II.87) függvény alapján érthető, hogy a röntgensövből kilépő fékezési sugárzás hosszú hullámhosszúságú (kis fotonenergiájú) részét „lágy” röntgensugárzásnak nevezik. Az erős hatványfüggvény reláció miatt ugyanis ebben a tartományban a τ_m értéke igen megnő, azaz a sugárzás nem tud áthatolni a közegen. A „kemény” kifejezést szintén használják a nagy fotonenergiájú komponensek kismértékű elnyelődésére, azaz nagy áthatolóképességére utalva.

Pozitív és negatív kontrasztanyagok

A kontrasztanyagok abszorpcióképessége elüt a lágy szövetek abszorpcióképességétől, (nagyobb vagy kisebb) és ezért az általuk feltöltött testüregek (pl. bélcsatornák) alakja a röntgenképen a kontrasztkülönbség alapján megállapítható, vizsgálható (pl. elzáródások, lerakódások láthatók). A sugárgyengítés mértékét az egyes tartományok μ , ill. τ abszorpciós állandói határozzák meg, így az a fotoeffektus esetében $\alpha\tau = \tau_m \cdot \rho$ összefüggés alapján tervezhető.

A pozitív kontrasztanyagok nagy rendszámú atomokat tartalmaznak (pl. Ba, I), így a τ_m -et növelik jelentősen. A negatív kontrasztanyagok kis sűrűségű közegeket jelentenek (pl. levegő, CO₂-gáz), és így ρ csökkentésével a feltöltött tartomány elnyelését jelentősen csökkentik. Mindkét esetben a kontrasztanyaggal feltöltött térfogat elkülönül környezetétől a röntgensugár-gyengítés effektusa során.

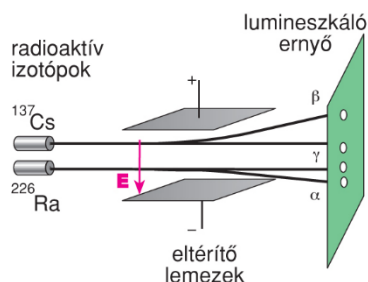
3.2. II/3.2. Magsugárzások, radioaktív izotópok

Közel egy időben azzal, hogy Röntgen felfedezte a róla elnevezett sugárzást, Becquerel különböző anyagok fluoreszcenciájával és foszforeszcenciájával foglalkozott. Megfigyelte, hogy különböző uránsók megvilágítás nélkül is bocsátanak ki olyan sugárzásokat, amelyek, hasonlóan a röntgensugárzásokhoz, fénnyel meg nem világított fényérzékeny lemezeket feketedést idéznek elő. Ez a sugárzás, amely a radioaktív sugárzás elnevezést kapta, a levegőben található atomokat ionizálja, nagy áthatolóképességű és bizonyos anyagokat fluoreszkálóvá tesz. A Curie házaspár uránszurokérből elválasztott egy olyan anyagot, amelynek radioaktív sugárzása egy új elemmel, a rádiummal kapcsolatos. A továbbiakban egyre újabb atomfajtákról mutatták ki, hogy radioaktív sugárzást bocsátanak ki magukból.

Radioaktív sugárzásból ólomblendéssel kiválasztott vékony sugárnyalábot mágneses vagy elektromos téren átvezetve a sugárzás három komponensre bomlik (II.60. ábra). Az α -sugarak eredeti irányuktól úgy térítődnek

el, mintha bennük pozitív töltésű részecskék terjednének. A β -sugarak az α -sugarakkal ellenkező irányban és könnyebben (ugyanolyan térerősség mellett nagyobb mértékben) térítődnek el – ezekben negatív töltésű részecskék terjednek. A γ -sugárzás elektromos és mágneses tereken irányváltoztatás nélkül halad át. Áthatolóképessége meghaladja a β -sugárzásét, amelynek áthatolóképessége viszont az α -sugárzásénál nagyobb.

Később egyértelmű bizonyítást nyert az a tény is, hogy a β -részecskék nagy sebességű elektronok, az α -részecskék He^{2+} ionok. A γ -sugárzás, ellentétben az előzőekkel, amelyek részecskesugárzások, elektromágneses sugárzás és általában α - vagy β -sugárzás kísérőjelensége.



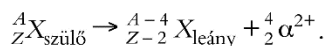
II.60. ábra. Radioaktív sugárzások eltérülése elektromos erőtérben. Mozdó töltéssel rendelkező részecskék elektromos és mágneses terekkel való eltérítéséből a részecskék fajlagos töltése (q/m) meghatározható. Ilyen mérések szerint az α -részecskék He^{2+} ionok, a β -részecskék pedig elektronok lehetnek. Természetesen ezekkel a mérésekkel a fenti megállapítások nem egyértelműen bizonyíthatók, mert ugyanaz az q/m hányados különböző töltés–tömeg kombinációkkal is biztosítható. A bizonyítást spektroszkópiai módszerrel végezték. Az α -sugárzást kibocsátó preparátumot olyan zárt edénybe helyezték, amelynek falán a sugárzás nem volt képes áthatolni. Elegendően hosszú idő után az edényben elektromos kisüléseket létrehozva a kibocsátott fény spektrumában a He vonalai kimutathatókká váltak.

3.2.1. II/3.2.1. A radioaktív bomlás módjai

A radioaktív sugárzás kibocsátása az atommag átalakulásának következménye. Ennek oka pedig az atommag I/1.5.4. pontban részletezett instabilitása. Az instabil mag az átalakulás során stabilabb állapotba kerül. Ez a folyamat a radioaktív bomlás. Mivel az atommag energiaállapotai éppúgy kvantáltak, mint az elektronburokban az elektron lehetséges energiái, megváltozása is csak diszkrét értékeket vehet fel.

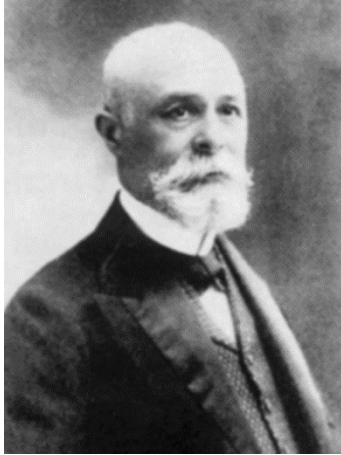
Az α -bomlás, α -sugárzás

α -bomlás esetén az atommag kétszeresen pozitív töltésű He atommag emittálása révén kerül stabilabb állapotba. Ez inkább a nagy rendszámú elemekre jellemző bomlási mód. Az α -sugárzás léte csak a kvantummechanika által értelmezhető és az I/1.3.2. pontban tárgyalt alagúteffektus alapján képzelhető el. Az α -bomlás során keletkező atommag, az ún. „leánymag” rendszáma 2-vel, tömegszáma 4-gyel alacsonyabb, mint a „szülő” magé volt:



(II.91)

Az α -bomlás során az energia és az impulzus általában csak két test (az α -részecske és a visszalökött nuklid) között oszlik meg. A két testre felírt energia- és impulzus-megmaradási törvények az α -részecske energiáját egyértelműen meghatározzák (lásd még a II.15. megjegyzést). Ezért az α -sugárzás spektruma vonalas, azaz a részecskék kinetikus energiája jól meghatározott érték.



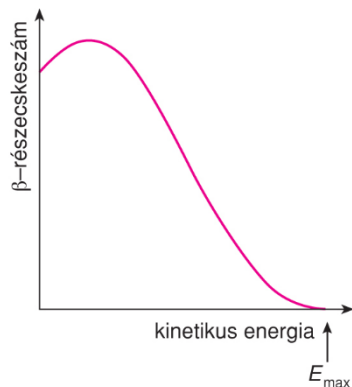
Antoine Henri Becquerel francia fizikus (1852–1908)

II.15. megjegyzés. Az α -részecskék sebessége

Az α -részecskék energiája kb. 0,4-8 MeV tartományba esik. Mivel a hélium atommag tömegszáma 4, a tömege közelítőleg $6,7 \cdot 10^{-27}$ kg (mivel a proton ill. neutron tömege kb. $1,67 \cdot 10^{-27}$ kg). Ebből következik, hogy a sebességük közelítőleg: 4–20 ezer km/s.

A β -bomlás, β -sugárzás

Mivel az atommag nem tartalmaz elektront (csak proton és neutron alkotja), a β -sugárzás egy, az atommagot alkotó részecske átalakulása útján keletkezik, ellentétben az α -sugárzással. További eltérést mutat a β -sugárzás spektruma. Az előzőek alapján szintén vonalas spektrumot várnánk, de a mérések szerint a spektrum folytonos (II.61. ábra). Ez nem volt értelmezhető az atommag instabilitása alapján.

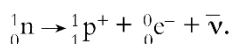


II.61. ábra. A β -részecskék energiaspektruma

Az ellentmondás feloldására feltételezték, hogy a β -bomlás során egy második részecske is keletkezik, amely a vele egyidejűleg emittált β -részecskével mindig ugyanazt a konstans bomlási energiát osztja meg. Az antineutrínónak ($\bar{\nu}$) nevezett részecske tömege sokkal kisebb, mint az elektron tömege, és elektromosan semleges (lásd *Az antianyag*, valamint *Pozitronannihiláció* részeket). A β -bomlás során az energia és az impulzus három részecske (a visszalökött nuklid, az elektron és az antineutrínó) között oszlik meg. Ennek a problémának az egyértelmű megoldásához a két megmaradási elv nem elegendő, emiatt a β -részecske energiájának eloszlása folytonos. Maximális energiájú a β -részecske (az ábrán E_{max} jelöli), ha minden energiát magával vihet, és minimális, ha a magreakció során felszabaduló kinetikus energián csak az atommag és az antineutrínó osztozik.

Előfordul, hogy az eseteknek csak egy részében vezet a β -bomlás a leánymag alapállapotába, az átmenetek egy másik része a leánymag egy gerjesztett állapotára (vagy állapotaira) vezet. Ilyenkor a mért β -energiaeloszlás két vagy több, különböző maximális energiájú β -spektrum eredője.

Összefoglalva a β -bomlás a következő sémával írható le:



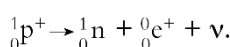
(II.92)

Mivel a neutron tömege egy kicsivel nagyobb, mint a protoné, a folyamat spontán módon végbemehet. A folyamat során az atommag kémiai tulajdonságai is megváltoznak, hiszen a rendszám eggyel nő.

A β -bomlásnak egy speciális változata a β^+ -bomlás, amelynek során elektronok helyett pozitronok lépnek ki az aktív magokból. Ezt a folyamatot neutrínó (ν) kilépése kíséri. A pozitronok tulajdonságai az elektronok tulajdonságaival egyeznek meg, csak negatív töltés helyett pozitív töltéssel rendelkeznek.

A magban éppúgy nincsenek pozitronok mint elektronok. A pozitron keletkezésénél egy proton átalakulása jelenti a mag stabilizálódását. Mivel a proton tömege kisebb, mint a neutroné, ezért ez a folyamat csak energiatöbblet esetében zajlik le.

Az orvosi gyakorlatban használatos pozitront emittáló preparátumokat mesterségesen, magreakciók keltése révén hozzák létre.



(II.93)

(Gyakorlati szempontból fontos megjegyezni, hogy a β^+ -bomláskor a magból kilépő pozitron igen rövid élettartamú. Amint az ütközések során kinetikus energiájának jelentős részét elvesztette, nagy valószínűséggel kölcsönhatásba lép egy elektronnal. Ezért a β^+ -bomlást mindig kíséri a $\beta^- - \beta^+$ szétsugárzás során keletkező két kb. 0,5 MeV energiájú γ foton kisugárzása (lásd II/3.2.3.). Ezt a jelenséget használják fel az izotópeloszlás meghatározására a pozitronemissziós tomográfiában (PET, lásd a VIII/4.4.2. részt).)

Az energetikailag instabil atommag protonfeleslegét úgy is csökkentheti, hogy a maghoz legközelebb levő elektronpálya (K-héj) egyik elektronjával lép kölcsönhatásba, amelynek során ez a pályaelektron megsemmisül és egy protonból neutron keletkezik. A jelenséget „K-befogásnak” vagy inverz β -bomlásnak nevezik.

A K-befogás eredményeképpen a K héjon elektronhiány áll elő, ennek megfelelően a jelenséget karakterisztikus röntgensugárzás kíséri (lásd még „Auger-elektronok kiváltása”).

Az antianyag

Az antineutrínó és a pozitron részei egy olyan részecskecsoportnak, amelyek általában azonos tulajdonságúak, mint a megfelelő, közönséges részecske, csak bizonyos tulajdonságot tekintve annak tükörképei. Így pl. a pozitron teljesen hasonló az elektronnak, kivéve töltését. Ugyanígy létezik antiproton, amely negatív töltésű. Felépíthető az anti-hidrogénatom, amelyben az antiproton körül kering a pozitron. Erre az atomra ugyanolyan fizikai törvényszerűségek érvényesek, mint a közönséges hidrogénatomra. Általában elmondható, hogy az antianyagból felépülő képzeletbeli univerzumban ugyanazok a törvényszerűségek írják le a jelenségeket, mint a sajátunkban. A mi világegyetemünkben csak közönséges anyag található, ha ugyanis anyag és antianyag kerül egymással kölcsönhatásba, az eredmény a kölcsönös és teljes megsemmisülés, annihiláció, azaz átalakulás energiává.

Pozitronannihiláció

A részecske és a megfelelő antirészecske találkozásakor a nyugalmi tömegüknek megfelelő $E = mc^2$ nagyságú energia elektromágneses sugárzás formájában szabadul fel. A kölcsönhatás csak megközelítőleg nyugalmi állapotban következik be, ezért a két részecske eredő impulzusa nagyon kicsi, gyakorlatilag nulla. Egy foton önmagában jelentős impulzussal rendelkezik, így az impulzusmegmaradási törvény miatt tehát két fotonnak kell keletkeznie, amelyek egymással 180° -ot bezárva távoznak. Ha a pozitron nem teljesen fékeződik le az annihiláció előtt, a keletkező fotonok által bezárt szög valamivel eltérhet a 180° -tól.

Auger-elektronok kiváltása

A K-befogást kísérő röntgensugárzás energiáját a K és az L héj energiakülönbsége szabja meg:

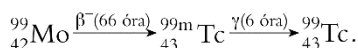
$$h \cdot f = E_K - E_L.$$

A hf energiájú foton ugyanazon atom elektronhéjában is elnyelődhet és ekkor egy monokromatikus (azonos energiával rendelkező) elektron, az Auger-elektron, lép ki az atom kötelékéből. Az ábrán bemutatott példában az M héjról kilépő Auger-elektron mozgási energiáját az $E = E_K - E_L - E_M$ összefüggéssel határozhatjuk meg. A folyamat eredményeképpen elektronhiány jön létre mind az L, mind pedig az M héjon. K-befogás révén kiváltott Auger-elektron-kibocsátást alacsony rendszámú nuklidok esetén figyelhetünk meg. A jelenség azonban ennél általánosabb, minden esetben fellép, mint a karakterisztikus röntgenfoton kibocsátásával versengő effektus.

γ -sugárzás

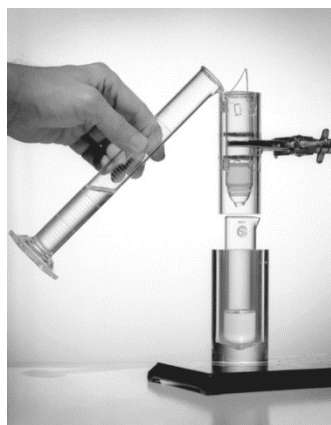
Gyakran előfordul, hogy a bomlás során keletkezett leánymag gerjesztett állapotban marad. A gerjesztett állapot természetesen instabil, és a mag foton emittálása útján szabadul meg fölös energiájától. A γ -foton kibocsátásakor lejátszódó magfolyamatot **magizomériának** nevezzük. Ez az elnevezés utal arra, hogy az átalakulásban sem a tömegszám, sem a rendszám nem változik. A folyamat hasonló a lumineszcencia esetéhez, de ott a fotonemissziót elektrongerjesztés előzi meg. Mivel a mag nukleonjainak energianívóit elválasztó energiakülönbségek jóval nagyobbak az elektronállapotokhoz tartozó energiaértékeknél, a kibocsátott foton energiája is nagyságrendekkel nagyobb. Az ilyen, jellegzetesen néhány száz keV, illetve MeV energiájú elektromágneses sugárzást nevezik γ -sugárzásnak. Mivel ebben az esetben csak a foton hagyja el a magot, a spektrum vonalás. (Az ilyen spektrumok például szcintillációs detektorral meghatározhatók, lásd a VIII/3.2. részben.)

Az α - és β -bomlást általában nagyon rövid idő alatt követi a foton kibocsátása. Ezért az izotóp preparátumok kevert sugárzást emittálnak, és a γ -sugárzást is az eredeti magnak tulajdonítjuk. A későbbiekben majd látjuk, hogy a diagnosztikában gyakorlatilag csak a γ -sugárzás hasznosítható. Ezért jelentősek azok a radioaktív bomlási jelenségek, amelyek során a bomláskor keletkezett gerjesztett állapotú metastabil mag hosszabb ideig maradhat fenn. Tipikus példa erre a Mo bomlása, amit a következő séma mutat be (az m index a metastabil állapotra utal):



(II.94)

A γ -sugárzó metastabil Tc izotóp hosszabb élettartama lehetővé teszi a metastabil atommagok elválasztását a „szülő” mag Mo-tól (lásd II.62. ábra). Így a leválasztott tiszta γ -sugárzó ${}^m\text{Tc}$ még a bomlási időn belül felhasználható. Az eljárás megvalósítására szolgáló eszközt „technéciumgenerátor”-nak nevezzük.



II.62. ábra. A technéciumgenerátor működése az első laboratóriumi példányon bemutatva. A Mo vízben nem oldódó ammónium-molibdenát (NH_4MoO_4) formájában kerül felhasználásra. Ebből a radioaktív bomlása következtében vízben oldódó ammónium-pertechnetát (NH_4TcO_4) keletkezik. (A jelenség oka az, hogy a technécium más elem lévén, mint a molibdén, kémiaailag is másként viselkedik.) Ha az így létrejött keveréket fiziológiás sóoldattal (NaCl) átmoszuk, akkor tisztán γ -sugárzó natrium-pertechnetát- (NaTcO_4) oldathoz jutunk, megszabadulva ezzel a β -sugárzó molibdéntől.

3.2.2. II/3.2.2. A radioaktív bomlás törvénye

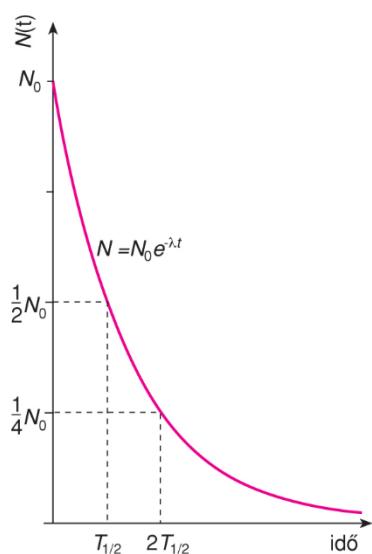
A kísérleti tapasztalatok azt mutatják, hogy egy homogén radioaktív preparátum sugárzásának intenzitása időben általában exponenciálisan csökken. Ha N elbomlatlan atommagot tartalmaz egy rendszer, akkor a megfigyelések szerint az időegység alatt elbomló atomok száma arányos N -nel:

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = -\lambda N. \quad (\text{II.95})$$

A negatív előjel arra utal, hogy az egyenlet bal oldalán álló mennyiség, amit **bomlási sebességnek** is neveznek, negatív, mivel az elbomlatlan magok száma csökken. Az egyenletben szereplő λ , a **bomlási állandó**. Természetesen ΔN -nek egész számnak kell lennie, de N -hez képest általában nagyon kicsinek. Emiatt N jó közelítéssel folytonosan változik, így a (II.95) egyenlet megoldható. (Ehhez hasonló egyenletet, illetve megoldást már láthattunk a II/1.1.3. fejezetben.) Az említett analógia alapján:

$$N = N_0 \cdot e^{-\lambda t}, \quad (\text{II.96})$$

ahol N_0 a $t = 0$ időben meglévő elbomlatlan atommagok számát jelenti (lásd a II.63. ábrát).



II.63. ábra. A radioaktív bomlás törvénye

A λ bomlási állandó a radioaktív anyag minőségére jellemző. Reciproka, $\tau = 1/\lambda$, megadja a radioaktív atommagok **átlagos élettartamát**, azaz azt az időt, ami alatt az atommagok száma a kezdeti érték e-ed részére csökken. Ehhez hasonló adat a **Tfelezési idő** is, amely idő alatt az elbomlatlan magok száma felére csökken.

A T és λ kapcsolata az (II.96) összefüggésből következik, ha N helyére $N_0/2$ -t, az idő helyére T -t helyettesítünk:

$$\frac{N_0}{2} = N_0 \cdot e^{-\lambda T}, \quad (\text{II.97})$$

ahonnan

$$\lambda T = \ln 2 \approx 0,693. \quad (\text{II.98})$$

A természetben előforduló radioaktív magok felezési ideje igen tág határok között változik: a szekundum törtrészei és a geológiai korok idejével összemérhető $\sim 10^{10}$ év között. Az igen rövid felezési idejű radioaktív anyagok jelenlétét az magyarázza, hogy a radioaktív bomlás eredményeképpen az anyamagból keletkező leánymag gyakran maga is radioaktív. Ily módon, ha létezik egy igen hosszú felezési idejű radioaktív anyag, akkor annak bomlástermékei, függetlenül azok (esetleg igen rövid) felezési idejétől, a természetben mindaddig megtalálhatók, míg a szóban forgó hosszú felezési idejű radioaktív magok mind el nem bomlottak (lásd „Radioaktív bomlási családok”).

A radioaktív anyagok mennyiségét és minőségét egyszerre jellemző adat az **aktivitás** (Λ), ami nem más, mint a negatív bomlási sebesség. Azt adja meg, hogy egységnyi idő alatt mennyi az elbomlott atommagok száma:

$$\Lambda = - \frac{\Delta N}{\Delta t} \quad (\text{II.99})$$

Egysége a becquerel (Bq). 1 Bq az aktivitása annak a radioaktív preparátumnak, amelyben a szekundumonkénti bomlások száma egy.

(II.95) szerint egy adott időpontban az aktivitás és az elbomlatlan atommagok száma arányos egymással:

$$\Lambda = \lambda N. \quad (\text{II.100})$$

Ebből az következik, hogy az aktivitás időbeli változása ugyanolyan, alakú, mint az $N(t)$ függvény (II.95), azaz:

$$\Lambda = \Lambda_0 \cdot e^{-\lambda t} \quad (\text{II.101})$$

ahol a Λ_0 kezdeti aktivitás λ pedig a bomlási állandó.

A radioaktív anyagokat ritkán lehet teljesen tisztán, inaktív anyagtól mentes (hordozómentes) formában előállítani. Ezért radioaktív készítmények jellemzésére nem mindig elegendő az aktivitás, emellett meg szokták adni a fajlagos vagy **specifikus aktivitást** is, ami nem más, mint a tömegegységre vonatkoztatott aktivitás. Egysége ennek megfelelően pl. Bq/g. Alkalmazzák a térfogategységre vonatkoztatott aktivitást is ez, az ún. **aktivitáskoncentráció**, ennek egysége pl. Bq/ml.

Radioaktív bomlási családok

A radioaktív mag (anyaizotóp) bomlásából előálló mag (leánymag) lehet akár radioaktív, akár stabil. Mivel a bomlások során a tömeg- és a töltésmegmaradás törvényei teljesülnek, az anya- és leányizotópok paraméterei egymással összefüggnek. A fentiekből következik, hogy hosszú felezési idejű, nehéz (nagy tömegű) radioaktív izotópok bomlásából egész sor radioaktív termék keletkezhet, amelyek egymással anya-leány izotóp viszonyban állnak. Ezen izotópok összességét radioaktív bomlási családnak nevezik. E családokon belül bármely két izotóp tömegszámának különbsége a 4-nek egész számú többszöröse. (A tömegszám csak az α -bomlás során változik meg.)

A természetben előforduló radioaktív magok három radioaktív családba, három bomlási sorba rendezhetők. Az egyes sorozatokban szereplő bármely mag tömegszámát (protonok + neutronok száma) egyszerű képlettel lehet megadni. A tórium bomlási sor őseleme a ^{232}Th , amelynek bomlástermékei alkotják a bomlási sort. A tömegszámformula $4n$, ahol n egész szám. Az urán-rádium bomlási sor $(4n + 2)$ őseleme az ^{238}U ($238 = 4 \cdot 59 + 2$), az aktíniumsor $(4n + 3)$ őseleme az ^{235}U . A még hiányzó, $4n + 1$ tömegszám képlettel jellemezhető bomlási sor a természetben már nem fordul elő, a transzuránokat és egyéb, mesterségesen előállított radioaktív anyagokat tartalmazza.

Ha egy tiszta radioaktív anyag bomlástermékeit nem távolítjuk el a preparátumból, a leánymagok száma egy ideig növekszik, és ezzel együtt nő a leánymagokkal kapcsolatos radioaktív sugárzás intenzitása is (ez esetleg azt is jelentheti, hogy a készítmény összaktivitása átmenetileg növekszik). Egy bizonyos idő után a leánymagok keletkezési és bomlási sebessége azonossá válhat. Ezt az állapotot radioaktív egyensúlynak nevezik. Az időegység alatt keletkező leánymagok számát az elbomló anyagok száma adja meg. Ha az anyagokat 1-es index, a leánymagokat 2-es index segítségével jelöljük, a radioaktív egyensúly azt jelenti, hogy $\lambda_1 N_1 = \lambda_2 N_2$.

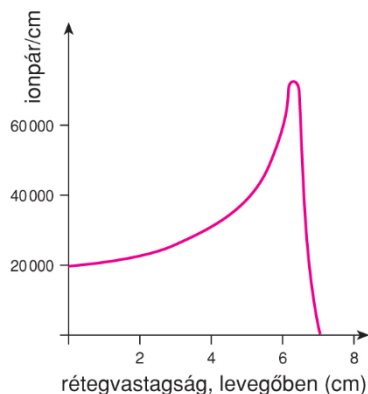
Hosszú, többtagú bomlási sorozat esetén, ha a legnehezebb elem, az „őselem” felezési ideje a legnagyobb, az egyensúly kiterjedhet az egész bomlási sorra.

Ha egy ilyen bomlási sor radioaktív egyensúlyba kerül, akkor $\lambda_1 N_1 = \lambda_2 N_2 = \lambda_3 N_3 = \dots$ és a sor minden tagja látszólag az őselem felezési idejével bomlik.

3.2.3. II/3.2.3. A magsugárzások kölcsönhatása atomi rendszerekkel

α -sugárzás

Az α -részecskék energiacsökkenése abszorbensen való áthaladás közben azzal kapcsolatos, hogy kölcsönhatásba lépnek a pályájuk mentén elhelyezkedő atomokkal, azokat ionizálják, illetve gerjesztik. Az α -részecske ionizálóképességét a pályája mentén létrehozott **lineáris ionsűrűséggel** jellemezzük. Ha a részecske l hosszúságú úton n ionpárt hoz létre, a lineáris ionsűrűséget az n/l mennyiség adja. Egy másik lehetséges mennyiség, ami az ionizáció mértékéül szolgál, a **lineáris energiaátadás** (Linear Energy Transfer, **LET**) vagy **fékezőképesség** (s), ami a leadott energia és az úthossz hányadosa $s = \Delta E/\Delta x$ (vagy $nE_{\text{ionpár}}/l$, azaz a lineáris ionsűrűség és az egy ionpár keltéséhez szükséges energia ($E_{\text{ionpár}}$) szorzata. (Levegőben egy ionpár keltéséhez átlagosan 34 eV energia szükséges.) Az ionizáció valószínűsége az α -részecske energiájától és a környező elektronok számától függ. Az α -részecskék ionizálóképessége pályájuk elején csaknem állandó, majd csökkenő energiájuk miatt meredeken növekszik a létrehozott ionsűrűség. A pálya legvégén, miután a részecskék elvesztették összes többletenergiájukat, a lineáris ionsűrűség hirtelen nullára csökken (lásd II.64. ábra).



II.64. ábra. Az α -sugárzás ionizálóképességének változása levegőben

Azt a távolságot, amit egy α -részecske adott közegben befut mialatt kezdeti E energiája a termikus értékre csökken, **hatótávolságnak** nevezzük. A nagyobb rendszámú elemeket tartalmazó abszorbensekben az α -részecskék már rövidebb út megtétele után lefékeződnek, hatótávolságuk kisebb.

Az α -részecskék ionizációs hatása a Coulomb-kölcsönhatáson alapul. Tekintettel arra, hogy az α -részecske tömege több ezerszer meghaladja az elektron tömegét, az elektronnal való kölcsönhatás az α -részecske mozgásának irányát gyakorlatilag nem módosítja. (Kivételt képez, amikor az α -részecske az atommaggal ütközik, és szóródik azon. Ez azonban nem túl gyakori esemény, ahogy Rutherford kísérletéből láthattuk, lásd az I/1.1.1. részben.) Ezért az α -sugárzás intenzitása a behatolás mélységével nem nagyon változik (természetesen a hatótávolság legutolsó szakaszát kivéve).

A természetes α -sugárzó izotópok α -részecskéinek energiája diszkrét érték, nagyságrendileg 0,4–8 MeV, hatótávolságuk levegőben néhány (2–9) centiméter, folyadékokban és lágy szövetekben pedig tized-mm nagyságrendű. Kísérleti tapasztalat, hogy a rövidebb felezési idejű α -sugárzó izotópok nagyobb energiájú és nagyobb hatótávolságú α -részecskéket emittálnak.

β -sugárzás

Előljáróban megjegyezzük, hogy az α -sugárzás kölcsönhatásainak leírásánál bevezetett mennyiségeket a β -sugárzás esetében is használhatjuk. Az α -részecskékkel ellentétben, a β -részecskék kis tömegük miatt elektronokon is szóródnak, így pályájuk zezugos. Ennek ellenére az abszorbensekben mért hatótávolságuk sokszorosán meghaladja az azonos energiájú α -részecskékét. Ennek az a magyarázata, hogy a β -részecske sebessége sokszorosán felülmúlja az azonos energiájú α -részecskék sebességét, mivel tömege kb. 8000-szer kisebb. Ezenkívül töltése is fele csupán az α -részecske töltésének, emiatt az α -részecskénél kisebb Coulomb-erőt fejt ki a közeli töltésekre, így a lineáris ionsűrűség kb. 1000-szer kisebb a β -részecske pályája mentén. Egy 2 MeV energiájú α -részecske levegőben mért hatótávolsága kb. 1 cm, azonos energiájú elektróné pedig kb. 10 m. Pályája mentén mindkét részecske azonos mennyiségű ionpárt hoz létre, mivel mindkét esetben azonos az ionizációként szükséges átlagos energia. De mivel a β -részecske sokkal hosszabb utat tesz meg, így a lineáris ionsűrűség sokkal kisebb.

A gyors elektronok pályájuk mentén nemcsak ionizációt okozhatnak. Az anyaggal kölcsönhatva annak belső elektronhéjain létrehozott elektronhiányok miatt karakterisztikus, fékeződésük miatt pedig fékezési röntgensugárzást is kelthetnek.

A β -bomlásból származó elektronok energiaspektruma folytonos, így nem meglepő, hogy az emittált elektronoknak nincs jól meghatározott hatótávolsága. A folytonos energiaspektrum miatt a β -sugárzást a maximális β -energiával (ami azonos a β -bomlás energiájával) szokás jellemezni. A természetes β -sugárzó izotópok maximális energiája csak néhány esetben haladja meg a 2 MeV értéket. A β -sugárzás abszorbenesen való áthaladással járó intenzitás csökkenése az exponenciális abszorpciótörvényt követi a felezési rétegvastagság 3-4-szereséig. Ezután az intenzitás csökkenés az exponenciális gyengülési törvénynél erősebben függ a rétegvastagságtól. Hét-nyolcszoros felezési rétegvastagság után az intenzitás megszűnik. Ez a rétegvastagság jelenti a sugárzás hatótávolságát, ami a gyakorlatban előforduló maximális energia értékek esetén annak lineáris függvénye (lásd II.7. táblázat). A táblázat adatai levegőre vonatkoznak. Szövetekben a hatótávolság természetesen sokkal kisebb, ^{32}P esetén is csupán néhány mm.

2.8. táblázat - II.7. táblázat. Két izotóp β -sugárzásának összehasonlítása

Izotóp	max. energia (keV)	max. ható távolság (levegőben)
^3H	18,125	5 mm
^{32}P	1710	6 m

γ -sugárzás

A röntgensugárzás elnyelődésének legfontosabb mechanizmusait az orvosi diagnosztika területén használt fotonenergia-tartományra (10–200 keV) vonatkozóan már tárgyaltuk (II/3.1.6.). A terápiás alkalmazásokban használt röntgensugárzás és γ -sugárzó izotópok ennél nagyobb fotonenergiákat jelentenek. A kb. 1 MeV fotonenergiánál nagyobb energiatartományban a kisebb energiáknál előforduló kölcsönhatási formák, a fotoeffektus és a Compton-szórás mellett a párkeltést is tekintetbe kell vennünk. Így az általános, sugárintenzitás-gyengülést leíró törvény gyengítési együtthatója a diagnosztikai röntgentartományhoz képest egy újabb taggal egészül ki [vö. (II.90)]:

$$\mu = \tau + \sigma + \kappa \quad (\text{II.102})$$

ahol κ a párkeltési mechanizmusból mint primer jelenségből származó intenzitás-gyengülés együtthatója.

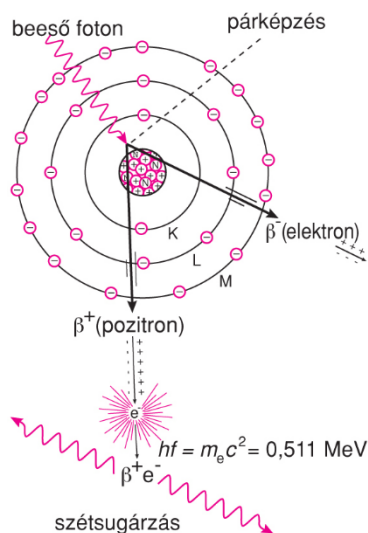
A „párkeltés” elnevezés a beeső foton által „életre keltett” elektron-positron pár megjelenését takarja. A folyamat lényegét a II.65. ábra szemlélteti. Nagy energiájú fotonok nehéz atommagokkal való kölcsönhatása vezethet olyan eredményre, hogy a természetből a foton eltűnik, és az általa képviselt energia pozitron-elektron pár formájában lesz „megtalálható” (Einstein-féle tömeg-energia ekvivalencia). Az elektron és a pozitron nyugalmi tömege az $E = m_0c^2$ összefüggés alapján kb. 0,5 MeV energiával egyenértékű, ezért a párképzés csak kb. 1 MeV fotonenergiák felett figyelhető meg. Bekövetkeztenek valószínűsége a fotonenergia növelésével nő.

A jelenség energiámérlege:

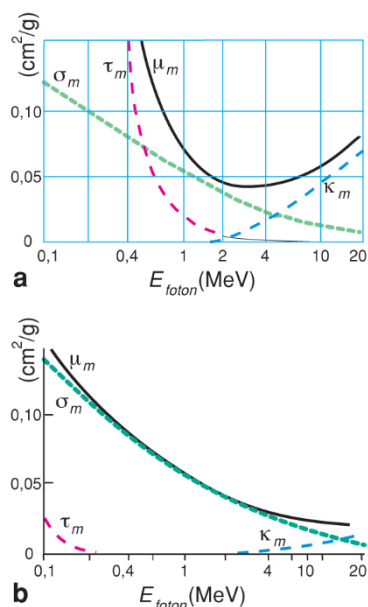
$$hf = 2m_0c^2 + 2E_{\text{mozgási}} \quad (\text{II.103})$$

Az atommag jelenlétét a lendületmegmaradási törvény teljesedése követeli meg. Ha a képződött pozitron lefékeződve egy elektronnal kölcsönhatásba lép, a párképzés inverz folyamata (szétsugárzás) játszódik le, a pozitron–elektron párból két kb. 0,5 MeV energiájú foton keletkezik (vö. II/3.2.1. β^+ -bomlás).

A $\mu_m = \mu/\rho$ tömeggyengítési együtthatónak és összetevőinek a fotonenergiától való függését a γ -sugárzó izotópokra jellemző energiatartományban a II.66. ábra mutatja a sugárvédelemben használt ólom és a lágyszöveteket modellező víz esetében. Érdekes felfigyelni arra, hogy mivel a fotoeffektus valószínűsége a fotonenergia növekedtével jelentősen csökken ($\tau_m \sim 1/(hf)^3$), a γ -tartományban μ_m értéke sokkal kisebb, mint a diagnosztikai röntgentartományban. Ezért használhatók jól diagnosztikai nyomjelzőként a γ -sugárzó izotópok, hiszen a sugárzás fotonjainak csak igen kis hányada nyelődik el a szervezetben. Így a sugárterhelés kicsi, és a sugárzás a szervezeten kívül is jól detektálható.



II.65. ábra. Párképzés és szétsugárzás



II.66. ábra. A tömeggyengítési együtthatónak és összetevőinek a fotonenergiától való függése a) ólom és b) víz esetében

Neutronsugárzás

Bizonyos magreakciók során neutronsugárzás léphet fel, mégpedig legtöbbször úgy, hogy az atommagot megfelelő részecskével bombázzák, és az így gerjesztett atommag felesleges energiájától neutronkibocsátás révén szabadul meg (lásd *Neutronok keletkezése*). A közegben haladó sugárzás neutronjai, töltésük nem lévén, nem képesek közvetlenül ionizálni pályájuk mentén a közeg molekuláit, lefékezésük során azonban közvetett módon mégis ionokat keltenek. A neutronok anyaggal való kölcsönhatását megszabja, hogy milyen energiával rendelkeznek. A különböző folyamatok során keletkező neutronok energiája széles tartományt ölel fel. A neutronok energiájukat rugalmas szóródás, rugalmatlan szóródás, neutronbefogás és maghasítás révén veszíthetik el.

Rugalmas ütközés során a neutron átadja energiájának egy részét az atommagnak. A folyamatot a klasszikus fizika rugalmas ütközésre vonatkozó egyenleteivel írhatjuk le. Az energiaátadás annál nagyobb mértékű, minél inkább megegyezik a két ütköző részecske tömege. Protonnal való centrális ütközés során (az álló és mozgó biliárdgolyó ütközéséhez hasonlóan) a neutron egy tételben leadhatja mozgási energiáját. Az így keletkezett nagy energiájú proton hatékonyan ionizálja a közeg molekuláit. A neutronsugárzás élő szövetekben megnyilvánuló hatását pontosan ez magyarázza, hiszen ez a kölcsönhatás nagyon valószínű.

Rugalmatlan ütközés során az atommag több energiát vesz át a neutrontól, mint az ütközésre vonatkozó egyenletekből következne, és az atommag gerjesztett állapotba kerül. A mag a felesleges energiától vagy γ -foton, vagy valamilyen részecske (például α -részecske) kibocsátása révén szabadul meg. E folyamatok 5 MeV vagy annál nagyobb energiájú neutronsugárzás esetén figyelhetők meg.

A neutronbefogás abban különbözik fogalmilag a rugalmatlan ütközéstől, hogy ebben az esetben a termikus neutron beépül az atommagba, és így keletkezik egy radioaktív izotóp. A gerjesztett nuklid felesleges energiájától radioaktív részecskék (α -részecskék, γ -fotonok, erősen ionizáló bomlástermékek) kibocsátásával szabadul meg. Az ilyen jellegű magreakciók kiváltására a neutronok különösen alkalmasak, hiszen semlegesek lévén könnyen behatolnak a magokba.

A nagy energiájú ($E > 100$ MeV) neutronok maghasítást (spalláció) képesek kiváltani. A hasítás során a magtöredékeken kívül több neutron és γ -foton is keletkezik. Ennek a folyamatnak egyre nagyobb a valószínűsége a neutron energiájának növekedésével.

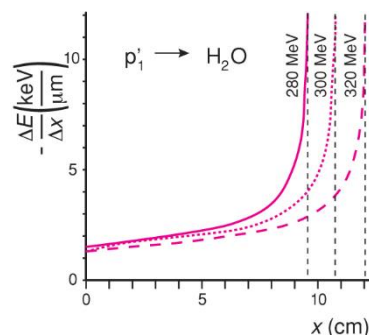
Mind a szóródások, mind pedig a magreakciók a neutronsugárzás gyengülését eredményezik. A μ gyengülési együttható ebben az esetben is függ az elnyelő közeg minőségétől és a részecskék energiájától. Élő szervezetek lágy szöveteiben a neutronsugárzás μ gyengülési állandója 1/m nagyságrendű.

Neutronok keletkezése

A nukleáris reaktorokban keletkező termikus neutronok energiája összemérhető a hőmozgás energiájával, kT -vel. A maghasítás során nemcsak termikus neutronok, hanem gyors, több MeV energiával rendelkező neutronok is felszabadulnak. 14 MeV körüli energiával rendelkező neutronok fúziós folyamatok során keletkeznek. 100 MeV vagy annál nagyobb energiájú neutronok a világűr különböző részein keletkeznek a csillagokban lejátszódó fizikai folyamatok során, illetve nagy teljesítményű gyorsítók segítségével kiváltott magreakciók folyamán.

Egyéb sugárzások

Nehéz töltött részecskék (protonok vagy nehéz ionok, például Na^+ , Ar^+) különböző médiumokban az α -részecskékhez nagyon hasonlóan viselkednek. Minél nagyobb a tömegszámuk, annál rövidebb a hatótávolságuk. Ez érthető, hiszen a nehéz ionok már az első néhány ütközésük során elveszítik minden elektronjukat, és az így keletkező sokszorososan töltött ionok nagyon nagy valószínűséggel hoznak létre ionizációkat, ami az energiájuk igen gyors csökkenését eredményezi. A nagy energiával a közegbe lépő töltött részecske a felülethez közeli rétegekben csak kevésbé fékeződik le, energiája nagy részét a teljes lefékeződést közvetlenül megelőzően adja át a közegnek (vö. II.64. ábra). Az elnyelt energia behatolási mélységtől való függését egy jellegzetes maximummal (Bragg-csúccsal) rendelkező görbe írja le (II.67. ábra). Az ábrán jól látható, hogy a különböző energiával rendelkező protonok lefékeződését leíró görbéken a Bragg-csúcsok különböző behatolási mélységhez rendelhetők (vö. IX/3.1.4.). A Bragg-csúcsokhoz tartozó behatolási mélységet hatótávolságnak hívjuk, mivel a Bragg-csúcs elérése után a részecskék termikus energiaszintre fékeződnek le. Azonos energiájú töltött részecskéket terápiás célra is lehet használni, hiszen a részecskék energiájának megváltoztatásával megszabhatjuk, hogy az energia nagy része milyen behatolási mélységnél adódjon át legnagyobb valószínűséggel a közeg molekuláinak.



II.67. ábra. Különböző energiájú protonok behatolása vízbe (Bragg-csúcsok)

3.2.4. II/3.2.4. Radioaktív izotópok felhasználása

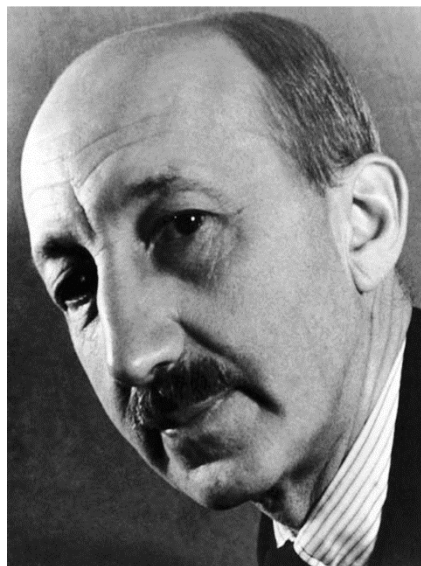
Az izotópoknak a biológiai kutatásban, valamint az orvosi gyakorlatban való felhasználása olyan széles és szerteágazó témakör, hogy annak teljes részletességű tárgyalása nem lehet célunk. Néhány példán keresztül csupán szemléltetni kívánjuk a főbb alkalmazási lehetőségeket.

Nyomjelzéses módszerek

A radioaktív nyomjelzéses technika igen effektív, a kutatásban és az orvosi gyakorlatban egyaránt széleskörűen alkalmazott módszer. Ha ugyanannak a kémiai elemnek radioaktív izotópját nagyobb mennyiségű stabil izotóppal összekeverjük, azok relatív aránya változatlan marad (legalábbis addig, amíg az eltelt idő a felezési időnél sokkal rövidebb). Ez a tény lehetőséget nyújt arra, hogy a szóban forgó elem koncentrációja különböző (fizikai, kémiai, biológiai) folyamatokban aktivitásmérésekkel követhető legyen.

Gyakran alkalmaznak ilyen módszereket az anyagcsere-folyamatok vizsgálatára is. Ilyen esetekben a kísérletekben felhasznált sejteket vagy baktériumokat olyan feltételek között (megfelelő közeg, hőmérséklet stb.) tartják, amely növekedésük és anyagcseréjük szempontjából optimális. A kísérlet egy meghatározott fázisában a kísérlet céljának megfelelő radioaktív komponenseket adnak a rendszerhez. A sejteket (baktériumokat) meghatározott idő eltelté után a radioaktív komponensektől elválasztják (például szűréssel vagy centrifugálással), és elvégzik rajtuk a kísérlet által megkívánt analitikai vizsgálatokat (lásd *Kétdimenziós kromatográfia alkalmazása $^{14}\text{CO}_2$ -beépülés vizsgálatára*).

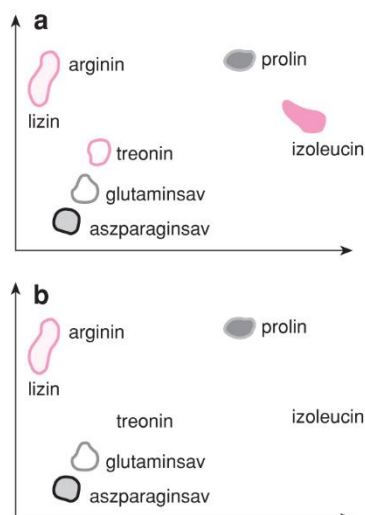
A sejtosztódás ugyanilyen stratégiával vizsgálható. Ha a sejteket ^3H -val (trícium) jelölt timidin jelenlétében tenyésztik, az újonnan szintetizált DNS-be beépülő radioaktivitás jelzi a proliferáció mértékét.



Hevesy György magyar fizikus (1885–1966). Hozzájárult az izotópok fogalmának tisztázásához, úttörője volt az izotópok alkalmazásának a biológiai és a botanikai kutatásban. A radioaktív izotóp nyomjelzéses módszerének feltalálásáért 1943-ban kémiai Nobel-díjat kapott.

Kétdimenziós kromatográfia alkalmazása $^{14}\text{CO}_2$ -beépülés vizsgálatára

A kromatográfiai szeparálás azon alapul, hogy a különböző anyagoknak különböző oldószerekben egymástól eltérő az oldhatósága. Ha aminosavak keverékét szűrőpapírra cseppentjük, a papírra adszorbeálódott aminosavakat egy-egy meghatározott oldószer különböző sebességgel viszi oldatba. Ez a megfigyelés szeparálási lehetőséget teremt; ha az adszorbeált aminosavakat tartalmazó szűrőpapír alját oldószerbe mártjuk, a kapillárishatás miatt az oldószer a szűrőpapíron emelkedni kezd, és az adszorbeált mintából a különböző aminosavakat különböző sebességgel viszi magával. A folyamat során általában az az eset áll elő, hogy a felvitt mintából egy-egy komponens teljes elúciója (kimosódása) megtörténik, mielőtt más komponensek elúciója egyáltalán elkezdődne. A futtatás végén minden komponens egy-egy „foltot” képez a függőleges futási irány különböző helyein. Ezután a szűrőpapírt 90° -kal elfordítva a futtatást más oldószer segítségével megismételve a komponensek oldhatóságától függő kétdimenziós „minta” áll elő, amelyben minden komponens a rá (és az oldószerekre) jellemző helyen lokalizálható. Radioaktívan jelölt minta esetén a kromatogram fotolemezre helyezhető, így az aktív foltok lokalizálhatók, a komponensek kvantitatív analízise pedig aktivitásméréssel biztosítható.



Az a) ábrán bemutatott autoradiogram glükóz és $^{14}\text{CO}_2$ jelenlétében növesztett *E. coli* (tisztított és emésztett) fehérjefrakciójának kétdimenziós kromatogramjáról készült. A b) ábrán bemutatott eredmények olyan hasonló kísérletből származnak, amelyet feleslegben lévő jelöletlen treonin jelenlétében végeztek. A két autoradiogram összevetéséből látható, hogy a jelöletlen treonin megakadályozta a ^{14}C -nek az izoleucinba való beépülését. A kísérlet eredménye arra utal, hogy az izoleucin szintézise treoninból közvetlenül történhet. A konklúziót arra alapozták, hogy a sejtfal az aminosavakra nézve permeabilis, a treonin bejut a sejtbe, és ott kompetícióba lép a glükózból, valamint CO_2 -ból szintetizált aminosavval.

Radioaktív izotópok alkalmazási lehetőségei a diagnosztikában

Az orvosi gyakorlatban a radioaktív izotópok diagnosztikai alkalmazásának négy fajtája bizonyult hasznosnak.

1. *In vitro laboratóriumi vizsgálatok.* A betegtől mintát veszünk (rendszerint vért), és ezt a laboratóriumban összehozzuk az izotóppal jelzett, specifikusan kötődő molekulákkal. A keletkező termékeket laboratóriumi módszerekkel szétválasztjuk, és az egyes komponensek radioaktivitását mérjük (kompetitív kötődési mérési eljárások). A radioaktivitás mérésének nagy érzékenysége lehetővé teszi a mintában kis mennyiségben jelenlévő anyagok (például hormonok) koncentrációjának nagy pontosságú meghatározását.

2. *Testkompartmentek térfogatainak meghatározása.* A beteg szervezetébe juttatott radioaktív izotópok segítségével lehet meghatározni például a test teljes víztérfogatát, a vérplazma térfogatát, a kicserélhető nátriumionok mennyiségét. Időfüggő méréseket is végezhetünk, amelyek segítségével meghatározható például a vörösvértestek átlagos élettartama, a vas- és a kalciumfelvétel kinetikája. A mérés során az egész test radioaktivitását, vagy az izotópbeadás után különböző időpontokban vett vér-, illetve vizeletminták radioaktivitását határozzák meg.

3. *Izotópeloszlás meghatározása* szervek alakjának, méretének, metabolikus aktivitásának jellemzése céljából. A szervezetbe bejuttatott, az egyes szervekben, sejtüregekben, kompartmentekben specifikusan felhalmozódó izotóp eloszlásának kétdimenziós vetületét határozzák meg gamma-kamera segítségével (lásd a VIII/3.2. részt). Ebben az esetben is lehetőség van az aktivitás időbeli változásának mérésére.

4. *Izotópos nyomjelzésen alapuló tomográfiai eljárások* (lásd a VIII/4.4. részt). Ezek segítségével a radioaktív izotópok térbeli, háromdimenziós eloszlását tudjuk meghatározni. [SPECT, single photon emission computed tomography (VIII/4.4.1.), PET pozitronemissziós tomográfia (VIII/4.4.2.).]

Az in vivo alkalmazott izotóp kiválasztásának fizikai szempontjai

Az alkalmas izotóp kiválasztásánál az alapvető orvosi, biológiai szempontokon kívül figyelembe kell venni azok fizikai tulajdonságait is. Ezt elsősorban az ionizáló sugárzások káros hatásai miatt a páciens védelme indokolja. Az alábbi megfontolások főleg diagnosztikai célú felhasználás esetében irányadóak. Terápiás eljárásban a cél gyakran éppen a sejtek elpusztítása. Ekkor másképpen kell mérlegelni a követelményeket, de ilyenkor is szempont a test egyéb részeinek védelme. Nézzük milyen paraméterekre kell tekintettel lennünk.

A sugárzás jellege. Mivel az emberi testből gyakorlatilag csak a γ -sugárzás képes kijutni, értékelhető információt az izotópok szervezetbeli eloszlásáról csak ez szolgáltat (lásd az α - és β -sugárzás hatótávolsága

szövetekben). Ezért a diagnosztikai alkalmazások esetében az ideális izotóp tisztán γ -sugárzó. Ebből a szempontból rendkívül jelentős a magizoméria jelensége, hiszen ennek végeredményeként tisztán γ -sugárzó izotóphoz jutunk. Ilyen viszonylag kevés van és azok sem mindig használhatók biológiai okok miatt (lásd technécium generátor, II/3.2.1. rész). Az elektronbefogás jelensége szintén fontos, hiszen ekkor is tisztán elektromágneses sugárzás keletkezik.

A felezési idő. A felezési idő jelentőségének megértéséhez figyelembe kell vennünk a bomlástörvény megállapításait, nevezetesen, hogy az aktivitás (Λ) egyenesen arányos az elbomlatlan atommagok számával (N) és az arányossági tényező a bomlási állandó (λ), ami viszont a T felezési idő reciprokával arányos:

$$\Lambda \sim N \cdot \lambda \sim N \cdot \frac{1}{T} \quad (\text{II.104})$$

Az összefüggés szerint azonos nagyságú aktivitás esetén (amit a jó detektálhatóság szab meg) a rövidebb felezési idejű izotópból kisebb mennyiségre van szükség. A páciens védelme megköveteli, hogy csak annyi izotópot juttassunk a szervezetbe, amennyi feltétlenül szükséges. Természetesen az alkalmazott izotópok felezési idejét alulról is limitálja a szervezetbe juttatás módja és a vizsgálat időtartama.

A rövid felezési idő további előnye az is, hogy így az izotóp jelentős része a vizsgálat ideje alatt a páciens szervezetében bomlik el (fizikai bomlás), megfelelő jelet szolgáltatva a méréshez, és csak kis mennyiség kerül a környezetbe biológiai úton.

A γ -sugárzás fotonenergiája. Mint azt már a röntgensugárzásnál láttuk, kis fotonenergia esetében a sugárzás gyakorlatilag már kis rétegvastagság mellett is teljesen elnyelődik. Mivel a sugárzásnak ki kell jutnia a szervezetről, hogy detektálhassuk, nagyobb energiák kívánatosak. Viszont túl nagy értékek esetében a detektorban sem nyelődik el, ami pedig a detektálás alapja. E kettős követelménynek is eleget kell tennie a megfelelő izotópnak.

Az orvosi gyakorlatban alkalmazott izotópok

A II.8. táblázatban összefoglaljuk néhány, a gyakorlat szempontjából jelentős radioaktív izotóp jellemzőit. A felsorolásban a fotonenergiát tüntettük fel, hiszen gyakorlatilag csak az elektromágneses sugárzás használható fel a mérés során. Diagnosztikai célokra γ -sugárzó izotópokat használunk, amelyeknek a fizikai és/vagy a biológiai felezési ideje rövid, hiszen így a nemkívánatos sugárterhelés lecsökkenthető. Terápiás célok esetén más szempontok érvényesülnek, ilyenkor a radioaktív izotópok célba juttatása jelenti a fő problémát és a nagy ionizálóképességű α -sugárzó izotópok is felhasználást nyernek (lásd a II/3.2.3. részt).

Számos olyan farmakológiai készítmény (farmakon) ismert, amely a (bio)kémiai sajátosságaitól függő módon meghatározott szövetekben szelektíven halmozódik fel. Ha ezeket a farmakonokat izotóppal jelöljük, **radiofarmakonokat** nyerünk, amelyek szervezeten belüli eloszlását tanulmányozva lehetőség nyílik a célszervek és szövetek strukturális és funkcionális vizsgálatára. A felhasznált aktivitások és radiofarmakonok mennyisége relatíve kicsiny, így azok nem befolyásolják lényegesen a tanulmányozott folyamatokat. A nukleáris medicina jelenlegi fejlettségi fokán a használt radiofarmakonok igazi nyomjelzőknek tekinthetők, nem váltanak ki hiperérzékenységi reakciókat (ellentétben a röntgenvizsgálatokban alkalmazott kontrasztanyagokkal).

A II/3.2.1. pontban említettük a ^{99m}Tc radioaktív bomlását, ami tiszta γ -sugárzó Tc-izotópot szolgáltat. A mindennapos nukleáris diagnosztikában a ^{99m}Tc -jelzés az egyik legelterjedtebben használt módszer, mivel ez a bomlás több, igen előnyös tulajdonsággal is bír. Amint láttuk a metastabil Tc-izotóp kémiai úton szeparálható. A tisztán γ -sugárzó technécium 6 órás felezési ideje rövid, ezért a megfelelő aktivitás eléréséhez ebből kis mennyiség is elegendő, emiatt a sugárterhelés nem túl nagy. Ez a felezési idő optimális az anya-izotóptól való kémiai izolálás és a radiofarmakon szintézisének elvégzéséhez is. Ugyanakkor az anyaizotóp hosszú felezési ideje ($T = 66$ óra) a radioaktív anyag viszonylag könnyű (nem túl gyakori) beszerzése szempontjából is kedvező. A nukleáris medicina gyakorlatában sokszor használnak még ^{67}Ga , ^{201}Tl , ^{123}I , ^{131}I és ^{111}In izotópot is.

2.9. táblázat - II.8. táblázat. Az orvosi gyakorlatban gyakran használt izotópok

izotóp	bomlás	T 1/2	E fo-ton (MeV)
^{11}C	β^+	20,3 p	0,511

II. rész – Sugárzások és
köölcsönhatásuk az „élő” anyaggal

¹³ N	β ⁺	10 perc	0,511
¹⁵ O	β ⁺	124 s	0,511
³² P	β ⁻	14,3 nap	0,695
⁵¹ Cr	e ⁻ be-fog.	27,8 nap	0,32
⁵⁷ Co	e ⁻ be-fog.	270 nap	0,122 0,136
⁵⁹ Fe	β ⁻	45 nap	1,099 1,192
⁶⁷ Ga	e ⁻ befog.	78,1 óra	0,093 0,184 0,296 0,388
⁸² Rb	β ⁺ e ⁻ befog.	1,3 perc	0,511 0,777
⁸⁹ Sr	β ⁻	50,5 nap	1,463
⁹⁹ Mo	β ⁻	66,7 óra	0,181 0,740 0,778
^{99m} Tc	metastabil	6,02 óra	0,140
¹¹¹ In	e ⁻ befog.	67 óra	0,172 0,247
¹²³ I	e ⁻ befog.	13 óra	0,159
¹²⁵ I	e ⁻ befog.	60 nap	0,027
¹³¹ I	β ⁻	8,06 nap	0,284 0,364 0,637
²⁰¹ Tl	e ⁻ befog.	73 óra	0,135 0,167

3.2.5. II/3.2.5. Az ionizáló sugárzások detektálása

A detektálási módszerek kivétel nélkül azon alapulnak, hogy a radioaktív sugárzás energiát hordoz, s bizonyos kölsönhatások révén meghatározott változásokat okoz. Ezeket a változásokat használják fel a részecskék észlelésére.

A γ -sugárzáson alapuló izotópdiaosztikai módszerekben a sugárdetektort úgy kell megválasztani, hogy a szerveztől vagy laboratóriumi vizsgálati mintából kijutott sugárzás intenzitásának, fotonenergiájának minél érzékenyebb mérését valósítsuk meg. Erre a célra kiválóan alkalmasak a scintillációs detektorok, amelyek a sugárzás fotonjaira fényfoton-emisszióval válaszolnak.

Scintillátorként szilárd és folyadék anyagok egyaránt alkalmazhatók. Ilyen anyagok: Cu- és Mg-tartalmú ZnS, Tl-tartalmú NaI, a folyadékok közül: antracén, stilbén, naftalén, 2,5-difenil-oxazol („PPO”); 1,4-di-[2-(5-fenil)-oxazolil]-benzol („POPOP”). Az orvosi diaosztikai mérésekben leggyakrabban a Tl-mal szennyezett NaI kristálydetektorokat használják.

A scintillációs detektorokban a fényimpulzus nagysága arányos az ionizációt kiváltó energiával, az impulzusok száma pedig arányos a preparátum aktivitásával. A scintilláción alapuló eszközök működését és felhasználását egy későbbi fejezetben (VIII/3.2.) tárgyaljuk.

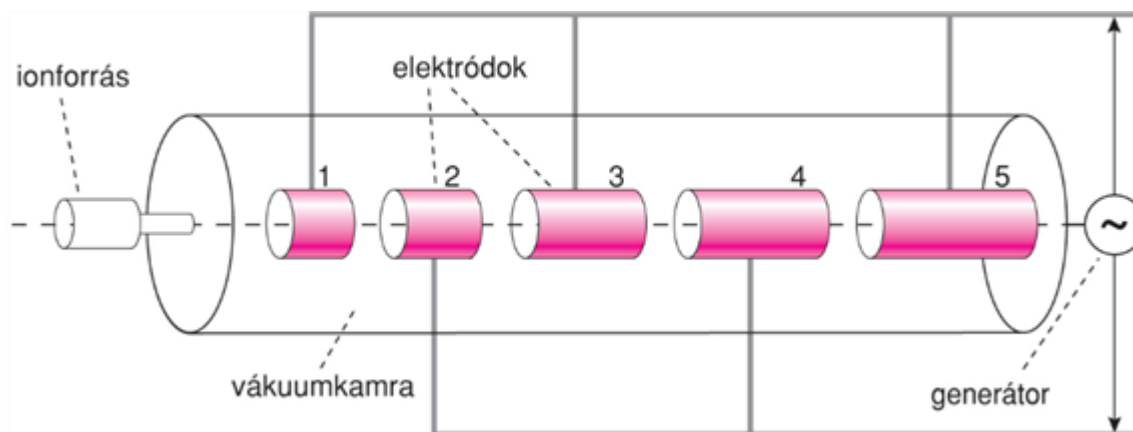
3.2.6. II/3.2.6. Részecskegyorsítók az orvostudományban

Az atommagok szerkezeti vizsgálatához, speciális radioaktív izotópok előállításához, valamint sugárterápiás célra gyakran van szükség nagy energiájú, „gyors”, töltött részecskékre. A részecskegyorsításra elektromosan töltött részecskék esetében elektromos és mágneses tereket használnak fel. Viszonylag egyszerű eszközökkel elő lehet állítani ilyen célra akár néhány millió voltos potenciálkülönbséget is. (Az ennél nagyobb feszültségek elérésének határt szab az elektródok közötti elektromos kisülés.) Az alábbiakban a gyakorlatban használt megoldások alapvető típusait ismertetjük.

Lineáris gyorsítók

Lineáris gyorsítókbán a töltéssel rendelkező részecskék gyorsítása egy generátor viszonylag kis feszültségének több ciklusban való kihasználásával megy végbe. A II.68. ábrán a lineáris gyorsító elvi felépítése látható. Töltött részecskékre potenciálkülönbséggel rendelkező elektródok között gyorsítóerő hat. Ismeretes, hogy elektromos vezetőkkel körbezárt térrészben az elektromos erőtér zérus. A proton (vagy egyéb gyorsított részecske) az ionforrást elhagyva az 1. számú elektród felé gyorsul. A hengeres elektród belsejében, az elektromos tér hiányában, a proton egyenes sebességgel halad. Az 1. és 2. elektród közötti térben ismét gyorsító elektromos tér van, mert a részecskének az elektródon való áthaladása közben a váltakozó feszültségű generátor polaritást vált. A sikeres gyorsítás feltétele, hogy a generátor polaritásváltozásai szinkrónban legyenek a részecskéknek az elektródok közötti térben való, illetve az elektródokon belüli mozgásával.

Az állandó frekvencia, valamint a gyorsulómozgás miatt a gyorsítócső mentén egyre hosszabb elektródokat alkalmaznak. Az is természetes, hogy a részecskék csak „kis adagokban” gyorsulnak, a generátorfeszültségnek elvileg is csak minden második félperiódusa használható ki (a valóságban annak is csak törtrészei). Ezzel a módszerrel 50 – 60 MeV protonenergiák érhetők el. Konstruáltak lineáris gyorsítót nehéz ionokra is, a sugárterápiában pedig a lineáris elektrongyorsítókat alkalmazzák. Ez utóbbi esetben a nagy energiájú elektronnaláb segítségével a röntgensőhöz hasonlóan, a fékezési sugárzás mechanizmusával röntgenfotonokat váltanak ki. Ezek a röntgenfotonok nagy energiával rendelkeznek, és a sugárterápiában képesek helyettesíteni a kobaltágyú γ -fotonjait.



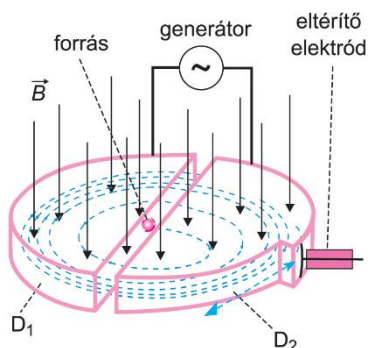
II.68. ábra. Lineáris gyorsító

Ciklotron

Nagy energiájú részecskék előállítására alkalmas gyorsító a ciklotron is, amelyben a gyorsítás mágneses tér segítségével körpályán történik (a tényleges pálya alakja inkább a spirális formához hasonlít). A mágneses tér a részecskék sebességének abszolút értékét nem befolyásolja, csak a körmozgás létrehozásához szükséges centripetális erőt szolgáltatja, a tér által a mozgó töltésekre kifejtett Lorentz-erő segítségével (lásd *A ciklotronban fellépő Lorentz-erő következményei*).

A berendezés alapelve a II.69. ábrán látható. A duánsoknak nevezett D betű formájú „kamrafelek” elektródként szolgálnak. A gyorsítandó ionok az ionforrásból az elrendezés geometriai középpontjánál jutnak az elektródok gyorsítóterébe, és a megfelelő polaritású elektród kontúrjának eléréséig gyorsulnak. A duánsokon belül nincs elektromos tér, itt a részecskék a rajz síkjára merőleges irányú mágneses térben állandó sebességgel körpályán mozognak. Egy félkörív befutása után ismét eléri a duánsok közötti elektromos teret, amely a mozgással szinkrón módon félfordulatonként polaritást vált. Ennek frekvenciája a Lorentz erőből és az elrendezésből adódóan állandó, ezért a részecskékre a D_1 – D_2 közötti térben minden áthaladásnál gyorsítóerő hat. A gyorsítóciklusok számának növelésével az elérhető energia nem növelhető minden határon túl, mert nagy sebességek esetén a relativisztikus tömegnövekedés miatt a részecske mozgása és a generátor frekvenciája közötti szinkronitás megszűnik. Ennek korrigálására van lehetőség a mágneses tér vagy a frekvencia változtatásával. Az így működő, továbbfejlesztett ciklotronokat szinkrotronnak (szinkrociklotron), illetve fazotronnak nevezik.

Az orvosi gyakorlatban a ciklotronok egyes típusait rövid élettartamú, elsősorban pozitront emittáló izotópok előállításra használják. Ezek az izotópokat generáló ciklotronok olyan helyeken találhatóak meg, ahol modern diagnosztikai eljárásként PET- (pozitronemissziós tomográf) készüléket alkalmaznak. Ezek közepes teljesítményű (50 MeV) berendezések. (Lásd még *A részecskegyorsítók, mint a molekuláris szerkezetkutatás eszközei*.)



II.69. ábra. A ciklotron szerkezeti felépítése

A ciklotronban fellépő Lorentz-erő következményei

A körpálya befutásához szükséges idő a kerületből és a részecske pálya menti sebességéből számítható.

$$T = \frac{2\pi r}{v}$$

Az egyenletből a sebesség a $qvB = \frac{mv^2}{r} \Rightarrow v = \frac{rqB}{m}$ összefüggés segítségével kiküszöbölhető, s így, mivel a részecske ω szögsebessége $2\pi/T$ -vel egyenlő $\omega = \frac{qB}{m}$.

A részecskegyorsítók mint a molekuláris szerkezetkutatás eszközei

A gyorsítók nem csak a részecskefizikában, illetve a nagy energiájú orvosi terápiában hoztak sok újat. A töltéssel bíró gyorsított részecskék igen intenzív elektromágneses sugárzásokat hoznak létre a spektrum szinte valamennyi hullámhossztartományában. Ezeket a sugárzásokat fel lehet használni például a makromolekulák szerkezetvizsgálatára. A röntgenkristallográfiától a kitűnő időfelbontású fluoreszcenciás vizsgálatokon át ezek a ciklotronok és napjainkban főleg szinkrotronok mellett kiépített mérőhelyek jelentős segítséget nyújtanak a biológiailag fontos molekulák tulajdonságainak és szerkezetének vizsgálatában. A keringő töltött részecskék hatására keletkező sugárzások nem folytonosak, hanem kb. 50–100 femtoszekundumos impulzusokban lépnek ki, amely időtartomány lehetővé teszi például a pikoszekundumos élettartamú jelenségek igen pontos vizsgálatát. Az ugyancsak melléktermékként keletkező nagy energiájú sugárzások pedig elemek aktivációs spektroszkópiái vizsgálatát segítik elő.

4. II/4. Dozimetria

A dozimetria feladata a különböző fajtájú ionizáló sugárzások olyan jellegű mérése, amelynek alapján a biológiai hatásra következtetni lehet. Erre az előzetes következtetésre mind a terápiás beavatkozásoknál, mind a sugárvédelem kialakításánál szükség van. Alapvető tapasztalat, hogy az ionizáló sugárzások olyan mértékben fejtenek ki biológiai hatást, amilyen mértékben energiájuk a testszövetekben ionizációs energiává alakul át. A dozimetria feladata tehát a testszövetekben ionizációs energiává átalakult sugárzási energiának mérhető mennyiségekkel való összekapcsolása, és az elnyelt energia alapján becslést adni a várható biológiai hatás mértékére.

Az α és a β sugárzás **közvetlenül**, a röntgen, a γ -fotonok, a neutronok **közvetveionizálnak** (önmaguk csak csekély változást idéznek elő, a hatást az általuk kiváltott másodlagos részecske, pl. szekunder elektron idézi elő). Mind a külső (testünkön kívüli), mind a szervezetünkbe került radioaktív izotópok által besugárzott szövetekben az ionizáló sugárzás előbb fizikai és kémiai jelenségeket okoz. Ha a sérülés nem javítható (reparálódik), a sejt biokémiai reakcióinak megváltozásán, vagy mutációk létrejöttén keresztül vezethet a sejtek, szövetek, szervek, ill. az egész szervezet károsodásához, esetleg pusztulásához. Az ionizáló sugárzások hatásának kitett személyekben a biológiai változások kialakulása az expozícióhoz képest időben elnyújtva – órák, hetek, hónapok, évek, sőt, esetleg csak évtizedek múltán – figyelhető meg. Érezhető, hogy a sugárzások biológiai hatásai egy rendkívül szerteágazó területet jelentenek. Sok esetben nagymértékben összetett és összetettsége miatt nehezen megismerhető folyamatokról van szó. Ez tükröződik a területen belül használatos fogalmak és megközelítések sokféleségében is, mivel a tudományos fejlődés során a jelenségek újabb fontos tulajdonságai váltak ismertté. Általában jellemző, hogy kevés a terület egészére alkalmazható megállapítás, minden esetben gondosan kell ügyelni a jelenség és a közelítések pontos meghatározására, amelyek az egyes összefüggéseket, definíciókat alkalmazhatóvá teszik. Bevezetésként a **sugárhatások osztályozásának szempontjait soroljuk fel.**

A sugárhatás mechanizmusa az emberi szervezetben részleteiben nem tisztázott. A biológiai károsodás kialakulásában elsődlegesen az ionizáló sugárzások előbbieken említett hatásai játszanak szerepet. A biológiai következmények szempontjából azonban nem minden molekula ugyanolyan fontos. A „találat”, azaz a közvetlen hatás – energiaelnyelődés érheti magát a biológiai szerepet betöltő molekulát (pl. a DNS-t), és abban jön létre változás, ebben az esetben **direkt sugárhatásról** beszélünk. Azonban akkor is bekövetkezhet biológiai károsodás, ha nem ezt a molekulát érinti elsődlegesen, hanem egy kevésbé érdekeset (pl. a vizet). Ebben az esetben a károsodás legtöbbször nem is jelenne meg, mert a nagyon sok vízmolekula között ennek az időleges megváltozásnak nincs döntő szerepe. Azonban különböző reakcióutak révén a hatás áttevődhet a biológiai szempontból fontos molekulákra, és ugyanolyan következménye lehet, mint az előző esetben (lásd *Vízaktiválási elmélet*). Ilyenkor beszélünk **indirekt sugárhatásról**.

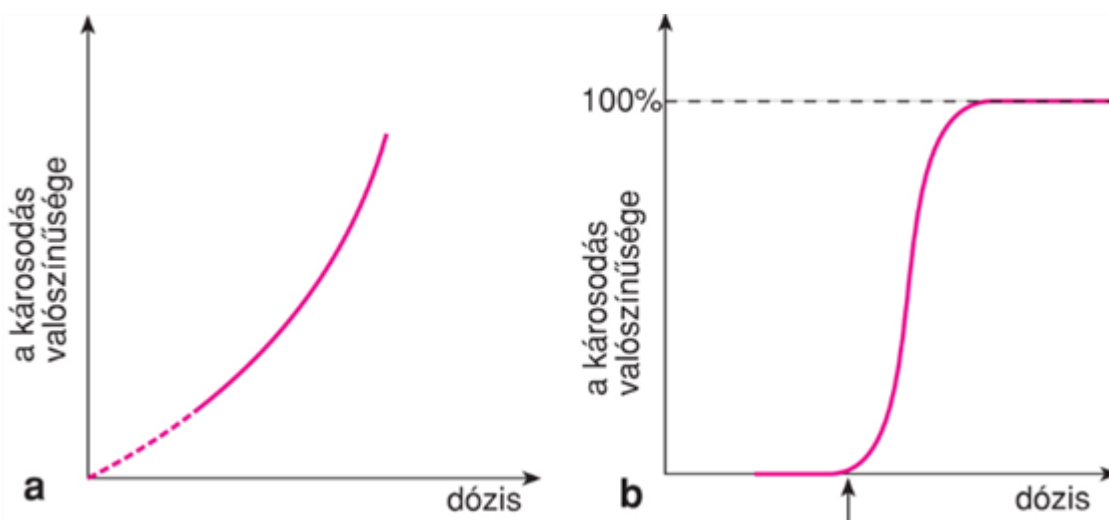
Feltételezzük, hogy a sejtek szintjén mind a direkt, mind az indirekt sugárhatás érvényesül. Az egysejtű élőlényekhez képest – azokra vonatkozik már csak populációs okokból is a legtöbb vizsgálat – az emberi szervezetben sokkal bonyolultabb kölcsönhatások jöhetnek létre. A véráram a sugársérülés során esetleg

felszabaduló biológiailag aktív vegyületeket a hatás helyéről elviheti, így távolhatás is létrejöhet. A sugárhatás a károsodás mértékétől függően lehet **reverzibilis** vagy **irreverzibilis**. Az irreverzibilis sugárkárosodás sugársérülést, sugárbetegséget okoz, amely lefolyását tekintve lehet **akut** vagy **krónikus**.

Gyakorlati szempontból döntően fontos a sugárzások biológiai hatásának (sugárkárosodásnak) és az elszennvedett sugárterhelés mértékének (dózisának) kapcsolata. Magasabb rendű élőlényeknél természetesen nem várható, hogy egy 0-tól kezdődő széles dózistartományban a két mennyiség közötti összefüggés ugyanolyan legyen. Vannak azonban olyan jelenségek és dózistartományok, ahol a kapcsolat jellege alapján a sugárkárosodás két alapvető mechanizmusát lehet elkülöníteni. Ez a két család a **sztochasztikus** és a **determinisztikus** sugárkárosodások családja.

Sztochasztikus hatás. Molekuláris, vagy sejtes szinten minden sugárkárosodási jelenség sztochasztikus. Ez annyit jelent, hogy a károsodás valószínűsége a sugárterheléssel nő (II.70a ábra) a károsodás minősége (súlyossága) azonban nem függ a sugárterheléstől. Az egész szervezet szintjén pl. a daganatos megbetegedések vagy az utódokban megjelenő károsodások tartoznak ide, valószínűleg azért, mert ezek közvetlenül a genetikai anyag sérüléseinek molekuláris jelenségeiből következnek. Sztochasztikus sugárkárosodás esetén nem lehet megállapítani a sugárterhelés egy alsó határértékét, ami alatt egyáltalán nem következik be károsodás. Ugyancsak nem mondható meg előre, hogy az azonos dózist kapott személyek közül kinél jelentkeznek majd évek múlva a sugárkárosodás, és kinél nem. Egy adott lakossági csoport adott mértékű sugárterhelésével járó **kockázat** becslését a károsodás valószínűségnek megadásával lehet elvégezni (lásd II.16. megjegyzés).

Determinisztikus hatás. Az élő szervezet egyes szerveinél, szövettípusainál, meg lehet figyelni olyan károsodási tüneteket, amelyek csak nagyobb mértékű sugárterheléseknél jelentkeznek. Ezek a szövetek, szervek működőképesek maradnak mindaddig, amíg az elpusztult sejtek mennyisége el nem ér egy bizonyos határt (**küszöbdózis**). A II.70b ábrán bemutatott függvénnyel jellemezhető sugárkárosodást determinisztikus hatásnak nevezzük. Ilyen jelenségeknél az elszennvedett dózis nagyságával a károsodás súlyossága is fokozódik. A determinisztikus sugársérülések közé tartozik pl. a fehérvérsejtek számának csökkenése, a bőrpír, átmeneti, illetve maradandó sterilitás, és az ún. sugárbetegség jellemző tünetei. Determinisztikus sugárkárosodás minden személyen bekövetkezik a küszöbdózis felett. A nagymértékű sugárterhelések determinisztikus hatását használjuk ki akkor, amikor terápiás célból daganatok sejtjeit pusztítjuk el.



II.70. ábra. A sztochasztikus a), valamint a determinisztikus b) sugárhatás bekövetkezési valószínűsége és az elszennvedett sugárdózis közti összefüggés

Vízaktiválási elmélet

Ha híg vizes oldatokat teszünk ki ionizáló sugárzás hatásának, akkor a radioaktív sugárzás sokkal nagyobb valószínűséggel ionizálja a vízmolekulákat, mint az oldott anyag molekuláit. Ez természetes, hiszen az ionizáló részecske (foton) nagyobb valószínűséggel találkozik a jóval nagyobb számban jelen lévő vízmolekulákkal, mint az oldott anyag molekuláival.

⇒ A sugárzás energiájának abszorpciója első lépésben a vízmolekulák ionizációjához vezet: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + e^-$

⇒ A keletkezett pozitív ion OH^\cdot gyökök képződéséhez vezethet: $\text{H}_2\text{O}^+ \rightarrow \text{H}^+ + \text{OH}^\cdot$

⇒ míg az elektronok a vízmolekulákkal H[?] gyökök (hidrogén atomok) létrejöttét eredményezhetik: $e^- + H_2O \rightarrow H^? + OH^-$

⇒ A H[?] és OH[?] gyökök létrejöhetnek gerjesztés révén is, a gerjesztést követő disszociáció során: $H_2O \rightarrow H_2O^* \rightarrow H^? + OH^?$

Az így keletkező elektronoknak külön biológiai jelentősége van, ugyanis polarizálva a környezetükben található vízmolekulákat, stabilizálódnak.

Ezek a hosszú életű hidratált elektronok nagy távolságra eljuthatnak, s reagálhatnak a biológiailag fontos oldott molekulákkal. A biológiai jelentőségű termékek, „vízgyökök”: e^-_{viz} , H[?], OH[?]. A H[?] és OH[?] rekombinációja H₂, H₂O, és H₂O₂ molekulákat eredményezhet.

A H[?] és OH[?] gyökök a biológiai molekulán (R–H) mint oxidáló és redukáló anyagok a következő változásokat hozhatják létre: $R-H + H^? \rightarrow R^? + H_2$ $R-H + OH^? \rightarrow R^? + H_2O$

$R-H + H^? \rightarrow R-H_2^?$ $R-H + OH^? \rightarrow R-HOH^?$

Az így keletkező szerves gyökök intramolekuláris folyamat révén irreverzibilis károsodáshoz vezethetnek.

II.16. megjegyzés. *A kockázat fogalma*

Természettudományos megközelítésben a kockázat egy adott hatás egy bizonyos mértékű kedvezőtlen következményének valószínűsége. Figyelembe kell vennünk azonban azt a tényt, hogy egy súlyosabb következmény esetében a kisebb valószínűség társadalmi megítélése is jelentős mértékű lehet. Ezért a kockázat definíciójának két fő szempontja: a nemkívánatos következmények valószínűsége, és a következmények természete és súlyossága.

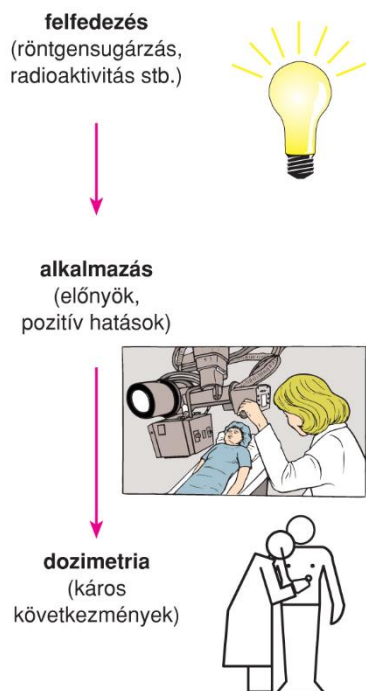
A kockázat az egészség, a környezet és az anyagi javak károsodásának – bizonyos esetekben bekövetkező – valószínűsége, figyelembe véve a károsodás természetét és nagyságát is. Értéke 0 és 1 között változik. 0 ha az esemény nem következik be, 1 ha biztos, hogy bekövetkezik.

A meghatározásból kitűnik, hogy a kockázat meghatározása meglehetősen bonyolult feladat.

4.1. II/4.1. Dózisfogalmak

1928 előtt a sugárzás dózisának nem volt egysége, dózis helyett a röntgensóvel megvalósuló expozíció körülményeit jellemezték (idő, feszültség, áramerősség). Ez nem volt kielégítő, hiszen a röntgensóveket nem kalibrálták, a feszültség- és áramerősség-mérési eljárások is elég primitívek voltak. Alternatívaként gyakran a bőrdózszt (erythema, bőrpír) alkalmazták. Ez az a sugárdózis, ami szükséges volt ahhoz, hogy a beteg bőrén (illetve sajnos gyakran a sugárforrás kezelőjének bőrén) erythemát okozzon. Ez a módszer sem volt megfelelő a dózis mérésére, hiszen a bőrrythema dózisértéke egyénenként változott, illetve függött attól is, hogy a test melyik részén vizsgálták a bőrpír képződését.

A civilizáció fejlődése során sok fontos felfedezés révén az emberiség megváltoztatja környezetét. Azonban minden találmánynak, előnyös tulajdonságai mellett, káros következményei is vannak (II.71. ábra). Így történt a röntgensugárzás, illetve a radioaktivitás felfedezése után is. A röntgensugárzást azonnal alkalmazták kórházakban, és óriási jelentősége volt és van ma is a diagnosztikában. Hamarosan az is kiderült, hogy súlyos egészségkárosító hatása lehet. Felfedezése előtt ilyen probléma nem merült fel, hiszen természetes környezetünkben számottevő röntgenforrás nincs. Hasonló a helyzet a radioaktív sugárzások tekintetében is. Ilyen és valószínűleg növekvő problémákkal küzdünk a természetben nem található és ezért a természetes lebontási folyamatokba nem illeszkedő kemikáliák, ill. napjainkban az UV sugárzás vonatkozásában. Elsősorban a megelőzés szerepét kell kiemelni, de fontos a már bekövetkezett károsodás súlyosságának felmérése is a terápiás kezelések szempontjából. Mindezen problémák hozták létre a dozimetria tudományát, és indokolják fontosságát (lásd még *A dózis széleskörűen használt fogalom*).



II.71. ábra. Felfedezéseink jelentős kedvező hatásai mellett gyakran komoly káros következményeikkel is számolni kell. A károsítóhatás mértékének becslése a dozimetria feladata, elsődlegesen a megelőzés céljából.

Az első részben részletesen tárgyaljuk az ionizáló sugárzások dozimetriáját. Ezt az indokolja, hogy ez a legrégebben kialakult és ezért a legnagyobb tapasztalatokkal rendelkező ága a dozimetriának. A fejezet végén említést teszünk a nem ionizáló sugárzások és a vegyszerek károsító hatásának becslési lehetőségeiről is.

Első lépésként alkalmas mennyiségeket, ún. dóziszfogalmakat kell kialakítani, amelyek felvilágosítást nyújtanak a várható következmények súlyosságát illetően. Ehhez nagy vonalakban át kell tekintenünk a károsodás kialakulásának legfontosabb lépéseit. Mint minden sugárzásban, az ionizáló sugárzásokban is energia terjed. Mai ismereteink szerint – és nincs okunk más feltételezésre – ennek az energiának csak az a része okoz bármilyen, így negatív hatást is, amely elnyelődik az emberi szervezetben. Ennek az energiának többféle hatása figyelhető meg: egyrészt hővé alakul, másrészt különböző változásokat idéz elő az anyagban. Legfontosabb következmény az ionizáció, amelyből elnevezésük is származik. Az elnyelődés fizikai lépései után a keletkezett termékek változatos kémiai reakciókban vehetnek részt. A kémiai reakcióknak biológiai következményei lehetnek. Egészségkárosító hatás szempontjából természetesen a biológiai következmények fontosak, amelyek a fenti kémiai reakciók eredményei.

A dózis széleskörűen használt fogalom

A dózis fogalma rendkívül összetett; pontos definíciója, a hozzá kapcsolódó értelmezésbeli, mérési problémák túlmutatnak a fejezet és a biofizika tantárgy keretein. A következőkben csak olyan mélységben adjuk meg a dózis definícióját, ami a biofizikai tanulmányok során előforduló problémák megválaszolásához nélkülözhetetlen.

A *dózis*, mint a fizikai és kémiai behatás nagyságát leíró jellemző definíciókban a fizikai kölcsönhatás következtében felvett energiát, azaz a teljesítménynek és az időnek a szorzatát értelmezzük. A dózis definíciójakor két lényeges tulajdonságot szoktak még megemlíteni: 1.) additivitás; 2.) linearitás. Amit matematikailag a legegyszerűbben így adhatunk meg: $D \sim D_1 + D_2$ és $D = k \cdot D_0$ ahol D_1 és D_2 két külön-külön alkalmazott dózis; k egy szorzófaktor és D_0 egy adott dózis.

A fenti definíciókban hallgatólagosan feltételezzük azt, hogy teljesül a **reciprocitás törvénye**, amit például úgy tudnánk megfogalmazni, hogy azonos dózist feltételezve nagyobb teljesítménynek rövidebb idő alatt, ugyanakkora hatása van, mint kisebb teljesítménynek hosszabb idő alatt.

Számtalan példát lehetne felhozni arra, hogy a fenti definíciókban megfogalmazott feltételek nem mindig teljesülnek a biológiai rendszerekben kiváltott hatásokra. Mind az additivitás, mind a linearitás csak bizonyos

tartományokra érvényes abban az értelemben, hogy a fizikai, kémiai behatások következményeként a kiváltott hatás nem lesz egyenesen arányos a fizikai vagy kémiai ártalom dózisával.

II.17. megjegyzés. *Testszövet felmelegedése elnyelt energia hatására*

Mint később látni fogjuk (lásd II/4.6.6. rész II.13. táblázat), átlagosan kb. 6-8 J energia elnyelődése 1 kg testszövetben gyakorlatilag halálhoz vezet. Ha ugyanez az energia teljes mértékben melegedésre fordítódik, az ismert

$E = mc\Delta t$ összefüggés alapján

($c_{\text{szövet}}$ kb 4 kJ/kg) megbecsülhető, hogy mindössze $1 \cdot 10^{-3} \text{ C}^\circ$ felmelegedést okoz. Ilyen mértékű változás mérése nagyon nehéz feladat elé állítja a technikát (magyarul csak igen nagy nehézségek árán lehet megmérni), tehát a hőhatás nem jól használható mérési célokra.

4.1.1. II/4.1.1. Fizikai dóziszfogalmak

A dozimetria alapvető célja az, hogy a biológiai hatással összefüggő fizikai mennyiséget definiálja, és mérhető mennyiségekkel kapcsolja össze. Már az előzőekben megállapítottuk, hogy a szervezetben **elnyelt energia** az a fizikai mennyiség, ami a biológiai hatáshoz vezet. Ennek alapján definiálták az **elnyelt** vagy **abszorbeált dózist**. Meghatározásához nem elegendő csak a sugárzásból elnyelt energiát figyelembe venni, ugyanis nem mindegy, hogy ez az energia mekkora anyagmennyiségben fejti ki hatását. Így a dózis definíciója a következő: egységnyi tömegű test által elnyelt energia. Jele: D

$$D = \frac{\Delta E}{\Delta m} \quad (\text{II.105})$$

Mértékegysége: J/kg = Gy azaz gray. A definícióban nem tüntettünk ki semmilyen sugárzást és anyagot, ezért minden sugárzásra és minden anyagra érvényes dózismennyiség. Az elnyelt energia mérése az általa kiváltott hatásokon alapszik. Magának az elnyelt energiának a meghatározása, annak viszonylag kis értéke miatt nem egyszerű (lásd II.17. megjegyzés).

Később látunk példákat mérési módszerekre (lásd II/4.2. rész), amelyek egyik legegyszerűbb típusa a sugárzás által kiváltott ionizáció mérése. A kiváltott töltések mennyiségének meghatározása egyszerű elektromos mérési feladat, pontos módszerek már régóta rendelkezésre állnak.

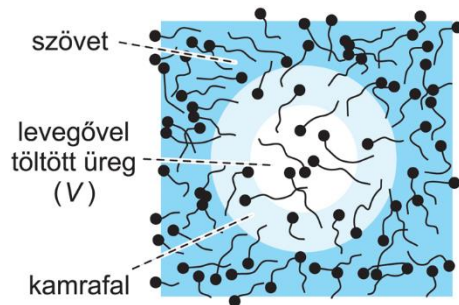
Mivel az ionizáló sugárzás által keltett töltések mennyiségét a testszövetben és általában folyadékokban nehéz megmérni (ahol már eleve sok töltés van jelen, mozgékonyaságuk, szabad úthosszuk kicsi) ezért gáz halmazállapotú anyagban célszerű a mérést elvégezni. Legegyszerűbb a mérést levegőben megvalósítani. Az így mérhető mennyiséget a következő módon definiálták: Egységnyi tömegű levegőben röntgen-, vagy gamma-sugárzás által elektronegyensúly esetében kiváltott pozitív vagy negatív töltések mennyisége. Jele: X , elnevezése **besugárzási dózis**.

$$X = \frac{\Delta Q}{\Delta m} = \frac{1}{\rho} \frac{\Delta Q}{\Delta V} \quad (\text{II.106})$$

Mértékegysége: C/kg. A fenti definícióban az **elektronegyensúly fogalma** magyarázatra szorul. Megértéséhez vegyük szemügyre a II.72. ábrát. A mérés során a besugárzás hatására a V mérőtér fogatban, illetve azon kívül is keletkeznek szekunder elektronok, amelyek átlagosan egy adott távolságot tesznek meg a levegőben, illetve a környezetben, mielőtt termikus sebességre lassulnak. Eközben természetesen egy részük elhagyja a V térfogatot, illetve másik részük belép abba. Amit tulajdonképpen mérünk, az a szekunder elektronok által kiváltott ionizáció. Elektronegyensúlyról akkor beszélünk, ha a V térfogatóból kilépő, és abba belépő elektronok száma megegyezik. Legegyszerűbben akkor valósul meg, ha a levegőt levegő veszi körül. A gyakorlatban a kamrafal anyaga az ionizáció szempontjából hasonló tulajdonságú, mint a levegő, ún. levegő-ekvivalens anyag, és elegendően vastag, ezért a szövetben keletkezett elektronok nem jutnak be az üregbe.



Louis Harold Gray angol fizikus (1905–1965)



II.72. ábra. Az elektronegyensúly értelmezése. A fekete pontok szekunder elektronokat, a vonalak azok útját szemléltetik

Mivel a biológiai hatások a szövetekben elnyelt dózissal arányosak, célunk annak meghatározása. Ezért a besugárzási dózist csak akkor érdemes mérnünk, ha át tudjuk számítani az előbbibe, vagy a mérési adatok alapján elfogadható becslést tudunk adni a szövetekben elnyelt dóziszra. Vegyük figyelembe, hogy mekkora energia szükséges egy ionpár létrehozásához levegőben. Ez ismert érték, átlagosan kb. 34 eV. Ennyi energia elnyelését jelenti egy elektronnnyi negatív töltés keltése. Figyelembe véve, hogy $1 \text{ eV} = 1,610^{-19} \text{ J}$ a levegőben elnyelt dózis a besugárzási dóziszból mint mérési eredményből meghatározható:

$$D_{\text{lev}} = f_0 \cdot X \quad \text{és} \quad f_0 = 34 \text{ J/C.} \quad (\text{II.107})$$

A levegő és a testszövet azonban eltérő tulajdonságokat mutat a sugárzással szemben, ezért a károsodás mértékére a szövetekben elnyelt dózis lesz a mérvadó. Az eltérést korrekciós tényezőként a mérési eljárástól függően vehetjük figyelembe (lásd *Az elnyelt dózis kapcsolata a tömeggyengítési együtthatóval és a tömegfékezőképességgel*).

Az elnyelt dózis kapcsolata a tömeggyengítési együtthatóval és a tömegfékező képességgel

Kis energiák esetében ($< 0.6 \text{ MeV}$, „fotondetektor”) a röntgen-, illetve gammasugárzás elnyelésének folyamatában van különbség a szövetek és a levegő között. Az elnyelt energiák úgy aránylanak egymáshoz, mint a megfelelő tömeggyengítési együtthatók (μ_m), ha az összehasonlított térfogatelemekben a sugárzás intenzitása azonos, azaz

$$\frac{D_{\text{szövet}}}{D_{\text{levegő}}} = \frac{\mu_{m,\text{szövet}}}{\mu_{m,\text{levegő}}}$$

Az 1. táblázatban néhány szövetre megadjuk a megfelelő értékeket.

Nagy energiák esetében ($> 0,6$ MeV, „elektron-detektor”) a kamrában és a környezetében a **szekunder elektronok** sűrűsége megegyezik, de a levegő és a szövetek fékezőképessége (s) (más néven LET, lineáris energiaátadás, lásd II/3.2.3. rész) eltérő az elektronokra nézve. Ezért ebben az esetben az elnyelt dózisos aránya a tömegfékező képességek (s_m) arányával lesz egyenlő:

$$\frac{D_{\text{szövet}}}{D_{\text{levegő}}} = \frac{S_{m,\text{szövet}}}{S_{m,\text{levegő}}}$$

A 2. táblázat példaként bemutatja a szén esetében a korrekciós tényezőket.

A fenti arányosságok a következőképpen mutathatók meg.

a) A gyengülési törvény (II.10) alakjából kiindulva, az alábbi lépéseken keresztül jutunk el az arányossághoz:

$$\Delta J \sim \mu J \Delta x \text{ felhasználva az intenzitás definícióját és a sűrűséggel mindkét oldalt elosztva } \frac{\Delta E}{\rho A \Delta t} \sim \frac{\mu}{\rho} J \Delta x,$$

$$\frac{\Delta E}{\Delta m} \sim \mu_m J \Delta t, \quad \frac{\Delta E}{\Delta V} \sim \mu_m J \Delta t, \quad \text{azaz } D \sim \mu_m J \Delta t.$$

Tehát az abszorbeált dózis egyenesen arányos μ_m -mel.

b) A fékezőképesség definíciójából kiindulva a következő lépések vezetnek az arányossághoz: $\frac{\Delta E}{\Delta x} = s$ a jobb

oldalt A/A -val bővítve, és mindkét oldalt Δx -szel megszorozva $\Delta E = \frac{A}{A} s \Delta x$, majd mindkét oldalt Δm -mel

osztva kapjuk, hogy $\frac{\Delta E}{\Delta m} = \frac{1}{A} s \frac{\Delta V}{\Delta m}$, azaz $D = \frac{1}{A} \frac{s}{\rho} = \frac{1}{A} s_m$, vagyis, ebben az esetben a D egyenesen arányos s_m -mel.

2.10. táblázat - 1. táblázat. Szövetek levegőre vonatkoztatott tömeggyengítési együttható

E foton (MeV)	$\mu_m, \text{szövet} / \mu_m, \text{levegő}$	
	Lágyszövetek	Csontok
0,1	1,07	3,54
0,2	1,08	2,4
0,4	1,10	1,25

2.11. táblázat - 2. táblázat. Szén levegőre vonatkoztatott tömegfékező képessége elektronok esetén

E elektron (MeV)	$S_m, \text{szén} / S_m, \text{levegő}$
0,1	1,016
0,3	1,007
1,0	0,985
3,0	0,946

4.1.2. II/4.1.2. Biológiai dózisfogalmak

Korábban (lásd a II/4. részt) felhívtuk a figyelmet arra, hogy a biológiai hatás közvetlenül az elnyelt energiával kapcsolatos és leírást adtunk arra, hogy az elnyelt dózist hogyan lehet reális mérési adatokból megbecsülni. Az ismertett gondolatmenetek és összefüggések azonban nem minden esetben elegendők arra, hogy az elnyelt energiából a biológiai károsítóhatás kockázatát megbecsüljük. Ezért további, tapasztalatokon alapuló statisztikai elemzés után korrekciós tényezők bevezetésére volt szükség. Az alábbiakban ismertett mennyiségek bevezetésénél a legáltalánosabb helyzet leírására is gondoltak, azaz pl. arra, hogy többféle sugárhatás együttes biológiai következményei is megbecsülhetők legyenek. Az egyszerűség kedvéért feltételezték, hogy a sugárzások hatásai egymástól függetlenek és ezért összeadódnak, és hasonló elv érvényesül a szövetek érzékenysége tekintetében is.

2.12. táblázat - II.9. táblázat. A sugárzási súlytényezők (w_R) értékei különböző sugárzások esetén

Sugárzás és energiatartomány	w_R	
Fotonok	1	
Elektronok	1	
Neutronok, ha $E_N < 10$ keV	5	
E_N : 10 keV–100 keV	10	
E_N : 100 keV–2 MeV	20	
E_N : 2 MeV–20 MeV	10	
$E_N > 20$ MeV	5	
Protonok, $E_p > 2$ MeV	5	
α részecskék, nehéz magok	20	

Egyenértékűdózis. Legyen $D_{T,R}$ a T szövetben az R sugárzásból származó elnyelt dózis. A különböző sugárzások eltérő biológiai hatásosságát egy „sugárzási súlytényezővel”, w_R vesszük figyelembe. Ennek az értékét láthatjuk a II.9. táblázatban különböző sugárzások esetén. Az így bevezetett új fogalom az **egyenértékűdózis**, jele: H .

$$H_T = \sum_R w_R \cdot D_{T,R} \quad (\text{II.108})$$

Mértékegysége J/kg vagy sievert (Sv).

Látható, hogy pl. az α -sugárzást igen komoly súlyfaktoral kell figyelembe venni. Ezt ellensúlyozza azonban az a tény, hogy a hatótávolsága még levegőben is nagyon rövid. A terápiás célokra felhasználható neutronok esetében a súlyfaktor által jelzett megnövekedett hatékonyság a részecskeenergiával is változtatható.

Effektív dózis. Miután megkaptuk a T szövetben a különböző sugárzások által okozott károsító hatás mértékét jellemző értéket, az egész testet érintő károsító hatás nagyságát jellemző érték kiszámításához figyelembe vesszük azt a biológiai tapasztalatot, hogy a különböző szövetek nem egyforma mértékben érzékenyek a sugárzásra. Megfigyelések szerint az osztódó és differenciálatlan sejtekre sokkal nagyobb mértékű a sugárzások hatása, mint másokra. Ezt és egyéb tényezőket vesz figyelembe a testszöveti súlyfaktor (w_T), amelynek értékét a különböző szövetféleségekre a II.10. táblázat foglalja össze. A w_T a besugárzott T szövet vagy szerv viszonylagos sztochasztikus károsodásának valószínűségét fejezi ki. Ezen súlytényezők összege:

$$\sum_T w_T = 1 \quad (\text{II.109})$$

Mindezek alapján az egész testet ért károsító hatás mértékére jellemző **effektív dózist** a következőképpen számoljuk ki.

$$E = \sum_T w_T \cdot H_T \quad (\text{II.110})$$

Jele: E , mértékegysége szintén sievert.

2.13. táblázat - II.10. táblázat. Testszöveti súlytényezők (w_T)

Szövet	w_T
Gonádok	0,20
Vörös csontvelő	0,12
Vastagbél	0,12
Tüdő	0,12
Gyomor	0,12
Húgyhólyag	0,05
Emlő	0,05
Máj	0,05
Nyelőcső	0,05
Pajzsmirigy	0,05
Bőr	0,01
Csontfelszín	0,01
Egyéb	0,05

II.18. megjegyzés. Közölt dózis

Nagy energiájú, indirekt úton ionizáló sugárzás esetében a beeső sugárzás energiavesztesége nem azonos az anyagban elnyelt energiával, mert a másodlagos sugárzás is olyan nagy energiájú lehet, hogy kilép a térfogatelemből, amelyre az elnyelt dózist értelmeztük. A kilépő, el nem nyelődött sugárzás természetesen energiát is visz magával. Ilyen esetekre vezették be a közölt dózis vagy kerma (kinetic energy released in material) fogalmát.

A közölt dózis (D_k) közvetve ionizáló sugárzás által a besugárzott anyag térfogatelemében felszabadított összes töltött részecske kezdeti kinetikai energiájának és a térfogatelem tömegének a hányadosa, ahol ΔE a Δm tömegű anyaggal közölt kinetikai energia. Egysége a gray (Gy). Mérése kalorimetriás úton lehetséges.

4.1.3. II/4.1.3. Származtatott dóziszfogalmak

Kollektív dózis. A kollektív dózis ismert létszámú embercsoport összesített sugárdózisa az egész testre (kollektív effektív dózis) vagy egyes szervekre számítva (kollektív egyenértékdózis) egy adott sugárzásból egy bizonyos időtartam alatt. Ha N_i személy E_i effektív dózist szenvedett el, akkor a kollektív dózist az

$$S = \sum_i N_i \cdot E_i \quad (\text{II.111})$$

összefüggés adja meg, amellyel adott népességsoport sugárterhelését jellemezzük. Hasonlóképpen lehet meghatározni a T szervre vonatkozó S_T kollektív egyenértékdózist, ekkor az egyenletben a $H_{T,i}$ egyenértékdózist kell alkalmazni:

$$S_T = \sum_i N_i \cdot H_{T,i} \quad (\text{II.112})$$

Dózisteljesítmény. A dózisokból származtatható mennyiségek közül megemlítjük a dózisteljesítményt, amit az a tény indokol, hogy a biológiai válasz az időbeli lefolyástól is függ. Kis dózisteljesítményeknél a biológiai károsodás általában kisebb. Ha a dózisteljesítmény csökken, a besugárzási idő meghosszabbodik, és ezáltal több idő áll rendelkezésre a nem halálos károsodások helyreállítására. A dózisteljesítmény a megfelelő dózis és annak az időtartamnak a hányadosa, amely alatt a dózist az illető elszenvedte. Mértékegysége: pl. Gy/év, mSv/óra, mSv/év stb. (Lásd a II.18. megjegyzést is.)

4.2. II/4.2. Dózismérő eszközök

A dózismérő eszközök olyan detektorok, amelyeknél a sugárérzékelés alapjául szolgáló fizikai jelenség és a mért jel nagysága összekapcsolható az azonos sugárzás hatására elnyelt dózissal. Az alábbiakban néhány, gyakrabban használt eljárást ismertetünk. Szerencsés módon egy igen egyszerűen és olcsón megvalósítható fizikai mérés, a sugárzás keltette ionizáció mértékének mérése olyan adatokat szolgáltat, amelyekből jó közelítéssel a szövetekben elnyelt energia nagysága megbecsülhető. Így a gázionizációs detektorok doziméternek tekinthetők. Ha már van egy fajta doziméterünk, akkor más, fizikai mérési módszer is használható, hiszen a különböző fajta mérési eredmények összehasonlításával kalibrálhatjuk az új eszközt. Ilyen alapon különböző fajta dozimétereket szoktak felsorolni, amelyek más-más hatások alapján jellemzik a sugárzások energiáját, fajtáját és intenzitását, kijelzőjükön azonban a sugárzás dózisékat mutatják.

4.2.1. II/4.2.1. Gázionizáción alapuló eszközök

Ha egy ilyen detektort radioaktív sugárzás ér, a becsapódó részecske a már ismert mechanizmusok szerint ionizációt hoz létre, töltéseket választ szét a detektor anyagában. A töltéshordozókat megfelelő elektromos erőterrel össze lehet gyűjteni, s a töltésmennyiség mérhető. Ha az összegyűjtött töltés által kiváltott impulzusoknak csupán a számát mérik, a detektort ért részecskék számát határozzák meg. A detektorok működtethetők olyan módon is, hogy a begyűjtött töltések mennyisége arányos a becsapódó részecskék energiájával. Az így működő detektorok segítségével tehát a beérkező részecskék száma mellett azok energiája is meghatározható.

A II.73. ábrán egy gáztöltésű kamrát mutatunk be. A külső henger (amely egyúttal elektródként is szolgál) által körbezárt térrészbe megfelelő töltőgázt juttatnak. A henger tengelyében, a külső hengertől elszigetelten, egy vékony drót alkotja a másik elektródot. A beérkező radioaktív sugárzás ionizációt hoz létre a töltőgázban, az ionokat az elektródok elektromos tere szétválasztja, a felgyűlt töltések a külső áramkörben áramimpulzust keltenek, amely az R ellenálláson egy feszültséjelet hoz létre. A detektor típusát (ionizációs impulzuskamra, proporciónális számláló, GM-cső stb.) a töltőgáz minősége, nyomása és az alkalmazott feszültség szabja meg.

Egy ionizációs detektorban a beérkező részecskék által keltett áramimpulzusoknak az alkalmazott feszültségtől való függése a II.74. ábrán látható.

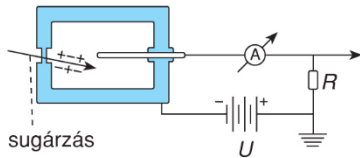
Gyakran használt eszköz, a kisméretű és egyéni dózismérésre használható gyűszükamra. Kis mérete és egyszerű kezelése, kiértékelése teszi lehetővé széles körű felhasználását. Másik ilyen általánosan használt és talán jobban ismert mérőműszer a Geiger–Müller- (vagy röviden GM-) cső. Nagy feszültségének köszönhetően könnyen detektálható, viszonylag nagy elektromos impulzusokat szolgáltat.

Az alapvető elrendezésben, amikor egy ellenálláson kialakuló áram nagyságát mérjük, dózisteljesítmény-mérőként használhatóak. A mért elektromos áram ugyanis a az egységnyi idő alatt keletkezett töltésekkel arányos, ami viszont az időegység alatt mért dózissal, azaz a dózisteljesítménnyel lesz összefüggésben.

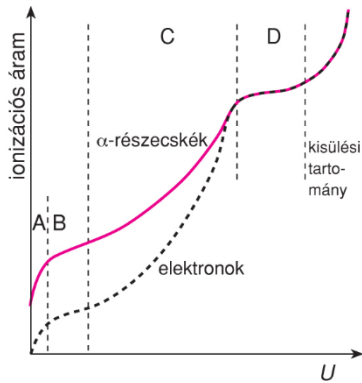
Ha dózist szeretnénk mérni, akkor egy megfelelő eszközzel össze kell gyűjtenünk a mérési idő alatt keletkezett töltéseket. Erre a célra a legegyszerűbb elektronikai eszköz egy kondenzátor. Ilyenkor a kondenzátoron mért feszültség lesz arányos a dózissal.



Rolf Maximilian Sievert német fizikus-orvos (1896–1966)



II.73. ábra. Ionizációs kamra



II.74. ábra. Az ionizációk számának függése a feszültségtől. Kis feszültségeknél (A) a részecske által létrehozott ionok viszonylag kis sebességgel mozognak a megfelelő elektródok felé, így nagy a rekombináció lehetősége. Emiatt a keletkezett ionok egy része nem detektálható. A begyűjtés hatásfoka a feszültség növelésével javul. A B tartományban a begyűjtés hatásfoka $\sim 100\%$. Jól látható, hogy ebben a tartományban a nagyobb ionizálóképességű α -részecskék nagyobb áramot, illetve impulzusamplitúdót hoznak létre, mint a β -részecskék. Ennek alapján a részecskék megkülönböztetése is megvalósítható. A térerősség további növelése a C (proporcionális tartomány) szakaszban azt eredményezi, hogy a primer ionizáció során keletkezett töltéshordozók annyira felgyorsulnak, hogy ütközések révén szekunder ionizációt képesek létrehozni, így a detektor anyagában egy lineáris töltéserősítés következik be. A térerősséget tovább növelve elérjük a D, úgynevezett Geiger-tartományt, ahol a primer ionizációt követő töltéssokszorozódás az egész detektoranyagra kiterjedő kiszülést eredményez. Ebben a tartományban működnek a GM- (Geiger–Müller-) csövek.

4.2.2. II/4.2.2. Filmdoziméterek

Az ionizáló sugárzások kémiai hatásán alapulnak a fénképészeti film megfeketedésén alapuló eszközök. (Becquerel első megfigyelése is ezen alapult). Széles körben elterjedt mint egyéni dózismérő eszköz. A film

megfeketedése „arányos” a réteget ért sugárzás dóziséval. Problémát jelent azonban, hogy a feketedés csak kis tartományban tekinthető lineárisnak és mértéke nagymértékben függ a sugárzás fajtájától, energiájától. Így nehézséget okoz a kiértékelés, amikor többkomponensű ionizáló sugárzás által elszenvedett dózist szeretnénk megbecsülni. Ezért kielégítő kiértékelése általában egy központi helyen, erre felkészült laborban történik. Az egyes sugárzástípusok hatásának elkülönítését a film egyes részei fölé helyezett különböző abszorbensek teszik lehetővé.

4.2.3. II/4.2.3. Termolumineszcens doziméterek

A termolumineszcencia-jelenség megértéséhez az alapismereteket a VI/3.3. részben találhatjuk. Röviden összefoglalva a detektorként használt, megfelelően szennyezett kristályos anyag (például LiF(+Mg+Ti) vagy CaSO₄(+Dy) azon tulajdonságát használjuk fel, hogy ionizáló sugárzás hatására az anyagban egy metastabil energianívón felhalmozódnak a gerjesztett elektronok, amelyek alapállapotba – az átmenet tiltott volta miatt – igen kis valószínűséggel kerülhetnek vissza. Ezek az elektronok gyakorlatilag „csapdába” esnek, és huzamosabb ideig maradnak ebben az állapotban.

A méréshez a detektor anyagából (mikrokristályos por) igen kis mennyiség elegendő. További előnyt jelent az is, hogy az energia elnyelődése és az elnyelt energia mérése térben és időben különválasztható. Az expozíció után az adott mennyiségű detektoranyagot a mérőműszerbe helyezzük, ahol felmelegítjük a kristályos port. Az átlagos termikus energia növekedésével az elektronok gerjesztett állapotba való visszatérésének a valószínűsége is megnövekedik. Elegendően magas hőmérséklet elérése után gyakorlatilag az összes csapdába esett elektron feljut a gerjesztett állapotba, ahonnan az alapállapotba való visszatérés megengedett. Az elektronok bizonyos hányada foton kibocsátása közben tér vissza az alapállapotba, és a keletkezett fotonokat fotoelektron-sokszorozó segítségével megszámlálva az elnyelt dózissal arányos mennyiséget kapunk.

Az idők folyamán a detektorként használt kristályos anyagok nagy választékát alakították ki, és a mérési módszer egyszerűsége miatt széleskörűen alkalmazzák.

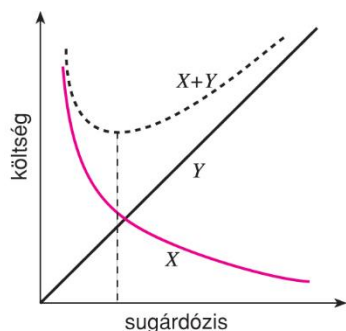
4.3. II/4.3. Sugárvédelem

Az ionizáló sugárzással szembeni védelmet nemzetközileg elfogadott előírások szabályozzák. Ez a Nemzetközi Sugárvédelmi Bizottság (ICRP) tevékenységének tulajdonítható. Az ICRP ajánlásai minden olyan emberi tevékenységre és gyakorlatra vonatkoznak, amelyek sugárexpozícióval járnak.

4.3.1. II/4.3.1. A sugárvédelem szempontjai a nemzetközi ajánlásokban

Egy tevékenység indokoltsága. Sugárveszélyes tevékenység csak akkor végezhető, ha indokolt, azaz ha a nettó haszna pozitív. Orvosi gyakorlatban ez azt jelenti, hogy a diagnosztikai, terápiás eljárás várható orvosi előnye nagyobb, mint az ionizáló sugárzás használatával járó kockázat. Érdeemes odafigyelni arra, hogy az egyre korszerűbb vizsgálati eljárásoktól – pl. számítógépes rétegvizsgálatok – származó sugárterhelés jóval nagyobb, mint amely például a korszerű berendezésekkel végzett hagyományos röntgenvizsgálatokkal jár.

A védelem optimalizálása. A sugárvédelem mai filozófiájának feltételezése, hogy minden – bármilyen kicsi – dózis együtt jár valamekkora kockázattal. A vita ugyan még tart, de ennek megfelelően nem elég dóziskorlátot felállítani, hanem foglalkozni kell a dózisok lehetséges csökkentésével is az ésszerűség határáig. A költségeket a sugárterhelés (dózis) függvényében megadó két ellentétesen változó függvény összegének egy adott dózisonál minimuma lesz. A sugárterhelés csökkentése, azaz a sugárvédelem javítása csak a kiadások jelentős növelésével érhető el. Másrészt a sugárterhelés növekedésével az egészségkárosító hatás kockázata, illetve annak anyagi ellenértéke növekedik. Általában mondható, hogy olyan kicsi legyen egy adott sugárveszélyes tevékenység során elszenvedett dózis, amilyen kicsi ésszerűen csak elérhető, figyelembe véve az adott ország gazdasági, szociális helyzetét is. Ez az ún. ALARA-elv (As Low As Reasonably Achievable) (II.75. ábra).



II.75. ábra. Az ALARA-elv alapját szolgáló kockázatfüggvények. Az ábrán látható Y egyenes, a dózis növekedésével együtt nagyjából lineárisan növekedő egészségkárosodás gyógyítási, szociális és egyéb költségeit, míg az X görbe a megelőzésre, a sugárvédelemre, a környezeti terhelésként jelentkező dózis csökkentésére fordított, a lineárisnál sokkal gyorsabban csökkenő költségeit mutatja. (Itt költség alatt nemcsak pénzben kifejezhető értékeket kell érteni, hanem pl. a társadalom vélekedését az atomerőművekről stb.) A két függvény eredője alapján lehetséges az optimalizálás

Egyéni dóziskorlátok alkalmazása. A harmadik alapelv célkitűzése, hogy ne érje az egyéneket és utódaikat elfogadhatatlan valószínűségű károsodással járó sugárterhelés. A megvalósítás módja dóziskorlátok állítása két besugárzási kategóriára, a foglalkozásszerűen sugárforrásokkal dolgozóakra és a lakosság egyedeire vonatkozóan. A dóziskorlátokat a II.11. táblázat foglalja össze. A **dóziskorlát nem határérték**, ami a biztonságos és a nem biztonságos feltételek között húzódik, hiszen a kockázat egyenesen arányos az effektív dózissal. Bizonyos dózisszint alatt azonban a kockázat elhanyagolhatóan kicsi. Ugyanakkor **a dóziskorlát nem megengedett dózis**, ameddig el lehet menni a sugárterheléssel. A sugárterhelés indokoltságát mindig mérlegelni kell.

A sugárvédelem igen fontos alapelve, hogy a sugárterhelést az ésszerűen megvalósítható legkisebb szinten kell tartani. A munkát úgy kell megszervezni, hogy a sugárveszélyes tevékenység normál körülmények között ne okozhasson determinisztikus károsodást, a foglalkozási sugárterhelés révén létrejövő sztochasztikus károsodás kockázata pedig ne legyen nagyobb, mint az általános ipari balesetek kockázata, azaz 10^{-4} haláleset/év. A lakosság esetében pedig a kockázat kisebb legyen, mint 10^{-5} haláleset/év. A különbség abból adódik, hogy a munkavállalók önkéntesen vállalják a kockázatot, továbbá érdekükben számos munkavédelmi intézkedés történik.

2.14. táblázat - II.11. táblázat. Sugárvédelmi dóziskorlátok

	Foglalkozási (mSv/év)	Lakossági (mSv/év)
Effektív dózis	20 *	1
Egyenértékdózis (szemlencse)	150	15
Egyenértékdózis (végtag/bőr)	500	50

*5 év átlagában, de maximum 50 mSv/év. (Terhes nőkre, tanulóakra külön megszorítások vonatkoznak)

4.3.2. II/4.3.2. A sugárzások forrásai

A következő részben áttekintjük, hogy honnan származhat az emberi szervezetet érő ionizáló sugárzás, és ez mekkora egészségügyi kockázatot jelent egy átlagos ember esetében. A lehetséges forrásokat négy csoportba soroltuk be.

Természetes környezet. Természetes környezetünk minden része tartalmaz radioaktív izotópokat. (Amikor ezt a könyvet olvassuk, a könyv anyaga szintén bocsát ki sugárzást, az emberi test aktivitása kb. 8600 Bq.) A sugárzás egy része a levegőből származik. Ebben is legnagyobb hányadot az egyetlen gáz halmazállapotú radioaktív anyag a ^{222}Rn képviseli. Ezenkívül jelentős mennyiségű sugárzást emittál a ^{40}K izotóp. Mindezek együttes és átlagos dózisteljesítményének mértéke kb. 2-2,5 mSv/év. (Csak zárójelben jegyezzük meg, hogy itt

csak a sugárzás károsító hatásával foglalkozunk. A természetes környezet sugárzásának hatása azonban lehet pozitív is. Mivel mutációkat is kiválthat, fontos szerepe lehet, pl. a változatosság fenntartásában.) A II.12. táblázat felsorol néhány lehetséges forrást, és az ahhoz rendelhető átlagos dózisteljesítmény-értéket. Ezek az értékek természetesen attól is függenek, hogy milyen helyen vagyunk, milyen anyagból épült a házunk stb. Mai ismereteink szerint ennek a dózisonak nem mutatható ki károsító hatása.

2.15. táblázat - II.12. táblázat. Néhány természetes, a környezetben található forrásból származó sugárzás okozta sugárterhelés átlagos éves mértéke

sugárzás forrása	H (mSv)
kozmosz sugárzás	~ 0,4
környezet	1–4
Ra (inkorporált)	0,1–0,5
Rn (inkorporált)	0,3–2,5

Foglalkozás során fellépő sugárzások. Ez és a következő csoportokba tartozó források már az emberi civilizáció fejlődésének termékei. A foglalkozás során viszonylag kevés ember kerül kapcsolatba ionizáló sugárzással, orvosi tevékenység körében ezek közül is a legtöbben röntgensugárzás kapcsán érintettek. Alapvető cél természetesen ebben az esetben az egészségkárosodás veszélyének minél alacsonyabb szinten tartása. Mivel teljes mértékben csak akkor tudjuk elkerülni a károsodás lehetőségét, ha egyáltalán nem használjuk az ionizáló sugárzások nyújtotta diagnosztikai és terápiás eszközöket, a cél a veszély minimalizálása. Ennek érdekében használják az ún. foglalkozási korlátot, amelyet már az előzőekben megemlítettünk. Természetesen determinisztikus hatás esetében ez nem lehet nagyobb, mint a küszöbdózis (lásd a II/4 részt). Mivel az érvényes foglalkozási korlát jóval az ismert küszöbdózisok alatt van, ez leginkább a sztochasztikus hatások kockázatát csökkenti. Ennek mérésére szolgálnak a személyi doziméterek.

Orvosi tevékenységgel kapcsolatos sugárterhelés. Látszólag az előző csoportba tartozó terület, de ebben az esetben nem az ott dolgozók sugárterheléséről, hanem a betegeket érő sugárzásról beszélünk. Természetesen minden olyan vizsgálat, amely során röntgensugárzással vagy radioaktív anyaggal kerül kapcsolatba a páciens, bizonyos mértékben növeli a sugárterhelést. A II.13. táblázatban megadjuk néhány vizsgálat során elszennvedett dózis nagyságát. A táblázatból látható, hogy a korszerű számítógépes tomográfiai módszer jelentős előnye mellett jóval nagyobb sugárterhelést jelenthet a páciens számára. Mindez megnöveli az orvos felelősségét a páciens iránt, ugyanis megfontolandó minden ilyen vizsgálat előírása. Legfontosabb szempont annak figyelembevétele, hogy mekkora előnnyel jár az elvégzése. Összevetve ezt azzal a kockázattal növekedéssel, amit a vizsgálat jelent, el kell dönteni, hogy szükséges a vizsgálat, vagy van egy célravezető alternatív módszer. Mindezek szintén alátámasztják, hogy az orvos számára elengedhetetlenek az ionizáló sugárzásokkal kapcsolatos, ezen belül is a dozimetria által nyújtott alapvető ismeretek.

2.16. táblázat - II.13. táblázat. Néhány az orvosi tevékenységgel kapcsolatos sugárterhelés átlagos nagysága

vizsgálat helye	hagyományos felvétel (mSv)	CT felvétel (mSv)
mellkas	0,2	7,8
koponya	0,1	1,8
hasi	1,2	7,6

Nukleáris balesetek, katonai felhasználás. Legutoljára kerül sor egy olyan lehetőségre, amely a radioaktív anyagok talán legtöbb vitát kiváltó felhasználási területe. Egyrészt a *katonai célú felhasználásuk* során atombomba-robbanás után jelentős mennyiségű radioaktív anyag kerül a környezetbe, a légkörbe. Jelenleg ez a

lehetőség minimális mértékű problémát jelent, mivel nemzetközi egyezmények biztosítják a földfelszíni atombomba-robbantások tilalmát. De az „atomkorszak” kezdetén jelentős mértékű radioaktív hulladék került a légkörbe a kísérleti robbantások során. Mindez kb. a kétszeresére növelte a háttérsugárzás mértékét. Jelenleg már nincs jelentős hatása ezeknek a korai kísérleteknek.

A nukleáris ipar és ezen a területen bekövetkező balesetek következményei. A nukleáris ipar a radioaktív anyagok előállításával és ennek energiatermelésre történő felhasználásával, valamint a visszamaradó hulladék tárolásával foglalkozik. A sugárvédelem célja éppen annak biztosítása, hogy mindezek során az egészségkárosodás mértéke ne növekedjen kimutathatóan. A működés közben fellépő zavarok vagy balesetek során azonban a sugárvédelmi célok sérülnek és a baleset mértékétől függően több-kevesebb radioaktív anyag kerülhet a környezetbe.

Legsúlyosabb ilyen esemény az 1986-ban, az ukrajnai Csernobilban bekövetkezett katasztrófa volt. Ekkor a nukleáris erőmű egyik 1000 MW-os reaktora felrobbant („szerencsére” egy ilyen reaktor robbanása nem nukleáris robbanás, hanem „csupán” a túlmelegedés hatására bekövetkező gőzrobbanás). A szerencsétlenség során jelentős mennyiségű radioaktív anyag került az erőmű környezetébe és a légkörbe. A légköri szennyezés nagyságára jellemző, hogy szinte az egész északi féltekén kimutatható volt a reaktorból származó radioaktív szennyeződés. Természetesen a különböző helyeken eltérő mértékben, a távolságtól és az aktuális széljárástól függő módon. Hatásai jelenleg is és még hosszabb távon is kimutathatóak lesznek.

4.4. II/4.4. A sugárhatás dóziszfüggése

Az ionizáló sugárzások egyes biológiai hatásainak tanulmányozása során a dózis függvényében vizsgálják a biológiai objektumok adott formájú károsodását. A sugárhatás kvantitatív jellemzésére felhasználhatják az egyedek (vírusok, baktériumok, sejtek, élő szervezetek) túlélési hányadát, a mutációk gyakoriságát, a biológiai molekulák (enzimek, nukleinsavak) aktivitásának változását. A vizsgálatok menete az, hogy ún. **dózis–hatás görbék**et határoznak meg, amelyet úgy kapunk, hogy a vízszintes tengelyen a sugárdózist, a függőleges tengelyen pedig a sugárkárosodást (inaktivációt) nem szenvedett egyedek (objektumok) számának (N) és az összes egyed (objektum) számának (N_0) hányadosát (N/N_0) tüntetjük fel (logaritmikus léptékben). Ezt a diagramot gyakran **túlélési görbének** is nevezik. Ennek oka az, hogy a vizsgált sugárhatás sokszor éppen az életképesség megszűnése. Bizonyos esetekben a dózis–hatás görbe logaritmikus ábrázolásban egyenest ad, legtöbbször azonban elég bonyolult görbét kapunk. A sugárkárosodás mechanizmusát a dózis–hatás görbéhez illesztett elméleti modellek paraméterei (pl. sérülési valószínűség) által tudjuk jellemezni. Az elmélet alapján kapott függvény és a mért adatok egyezése egyúttal a mechanizmus értelmezésének a helyességét is bizonyítja (lásd *Példák a dózis–hatás görbék értelmezésére*).

A klasszikus találatelmélet nagyon jó megközelítéssel tudta leírni a biológiai makromolekulák és a mikroorganizmusok viselkedését a sugárzás hatására. A szövettenyésztés elterjedése után, az emlőssejtekkel végzett kísérletek során, egyre több olyan eredmény halmozódott fel, amelyeket már a „több céltábla, több találat” elmélettel sem lehetett értelmezni.

A klasszikus találatelmélet hibái abból fakadnak, hogy a molekuláris mechanizmusokat messzemenően elhanyagolja. Az eredeti elmélet megfogalmazásakor csak a találatok száma és azok eloszlása szerepel, a biológiai hatás létrejöttében szereplő folyamatokról semmilyen feltevés nélkül. Általában nem veszi figyelembe az időt mint a sugárhatást befolyásolható egyik tényezőt. Elhanyagolja azt a tényt is, hogy az emlőssejtekben javítómechanizmusok korrigálhatják a sugárzás által kiváltott molekuláris sérüléseket. Problémát jelent az is, hogy a fizikai találatokhoz, különösen több találat esetén, nem rendelhető egyértelműen egyetlen biológiai hatás, és a biológiai hatások nem mindig cserélhetők fel. (Egy találat okozhat mutációt a sejtben, vagy meg is ölheti a sejtet. Mutációt szenvedett sejtet ért újabb találat meg is ölheti a sejtet, de egy megölt sejtben újabb találat már nem vált ki mutációt.) Ugyanakkor különösen nagy dózisonál megfigyelhető, hogy a dózis–hatás görbe meredeksége jelentősen megnő, és ezeket a változásokat a korábbi modellek nem tudják értelmezni. Nyilvánvalóvá vált, hogy az emlőssejtek vizsgálata során meghatározott dózis–hatás görbék értelmezésére új modellt kell felállítani, amely figyelembe veszi a sugárhatás kifejlődésének molekuláris mechanizmusát.

Példák a dózis–hatás görbék értelmezésére

Találatelméletek

A sugárzások károsító hatásának leírására Dessauer (1922) dolgozta ki a találatelméletet. Az elmélet céltáblaelméletnek (target theory) vagy direkt hatás elméletnek is nevezhető. Az elmélet szerint a sugárhatás

akkor következik be, ha az ionizáló részecske mint egy lövedék eltalálja a biológiai objektumot, a céltáblát. A háromdimenziós „céltábla” egy térrészt, térfogatot jelent, amelyen nem csupán keresztül kell haladni egy „lövedéknek”, de ott ionizációt is létre kell hoznia. Ez a „találat” (hit). A legegyszerűbb esetben az inaktivációhoz egy találat szükséges. Az elmélet továbbfejlesztése során a sugárhatásnak kitett objektumon bizonyos esetekben több „céltáblát” (target) feltételeztek, amelyek mindegyikét meghatározott számú találatnak kell érnie az inaktiváció létrejöttéhez. A találatelmélet (hit theory) vezetett a sugárdózis nagysága és az általa okozott biológiai hatás közti összefüggés legtöbb részletének felderítéséhez.

a) Egy „céltábla”

Jelölje V a sugárérzékeny térfogatot („céltáblát”), i pedig az egységnyi térrészben létrejött ionizációk, „találatok” számát D dózis esetében. Az ionizációk száma igen nagy, azok helye egymástól független, s annak a valószínűsége, hogy egy adott ionizáció éppen egy meghatározott „céltábla” térfogatába esik, igen kicsi. A Vi szorzat a V térfogatban D dózis mellett keletkezett ionizációk átlagos számát (várható értékét) adja meg. Ezek értelmében a Poisson-eloszlás segítségével fejezhetjük ki annak a valószínűségét (P_n), hogy D dózis esetén a V térfogatot éppen n találat érte:

$$P_n = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} = \frac{(Vi)^n}{n!} e^{-Vi}.$$

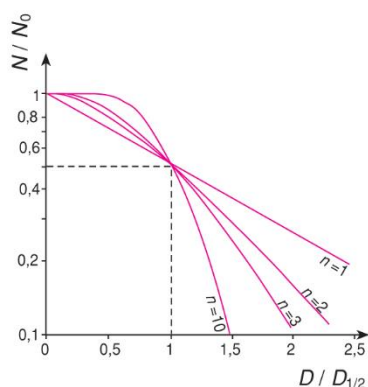
Az egységnyi térrészben létrejött ionizációk száma (i) egyenesen arányos a sugárzás dóziséval (D), ezért a D egységének alkalmas megválasztásával az összefüggés a következő formában is írható:

$$P_n = \frac{(VD)^n}{n!} e^{-VD}.$$

Ha n találat kell egy objektum inaktiválásához, akkor minden objektum, amely $n-1$ vagy ennél kevesebb találatot kapott, „túlélő”, azaz aktív marad (nem mutatja a vizsgált károsodást). Ennek megfelelően a túlélési hányad, azaz a túlélési valószínűség (az 1, 2, 3, ..., $n-1$ találatot kapott egyedekre alkalmazva a Poisson-formulát):

$$\frac{N}{N_0} = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(VD)^k}{k!} e^{-VD}.$$

Az 1. ábrán a radioaktív sugárzás dózis–hatás görbéit ábrázoltuk egy céltábla, több találat esetén. Ha az inaktiváláshoz szükséges találatok száma (n) nagyobb, mint 1, akkor a túlélési görbe (lineáris ábrázolásban) szigmoid lefutásúvá (fordított S alakúvá) válik. Logaritmikusan ábrázolásban a görbének annál kifejezettebb „válla” van, minél nagyobb a szükséges találatok száma. Meg kell jegyezni, hogy a görbék azért metszik egymást az $(N/N_0) = 0,5$ értéknél, mert itt a dózis egysége a **félhalálos dózis**, a $D_{1/2}$, amelynél az objektumok fele inaktiválódik.



1 ábra. A radioaktív sugárzás dózis–hatás görbéi egy „céltábla”, több találat esetén

Speciális esetekben, ha az inaktiváláshoz egyetlen találat elegendő, akkor a k értéke 0, és mivel $(VD)^0=1$, valamint $0!=1$, a túlélési görbét a következő összefüggés írja le:

$$\frac{N}{N_0} = e^{-VD}$$

Ez az „egytalálatos görbe” exponenciális lefutású, de ha a dózist (D) lineáris, a túlélési hányadost (N/N_0) pedig logaritmikus léptékben tüntetjük fel, akkor egyenest kapunk ($n = 1$).

b) Több „célta” (target), több találat

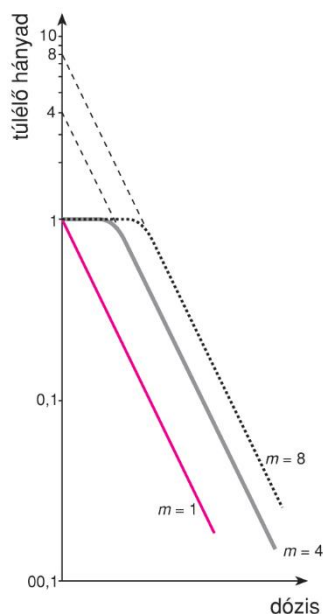
A találatelmélet matematikai formulái kiterjeszthetők olyan objektumok sugárkárosodásának leírására is, amelyekben több mint 1 sugárérzékeny struktúra (target) van. Ha az azonos sugárérzékeny térfogattal rendelkező targetek száma m (és az objektum inaktiválásához az összes (m) target sérülése szükséges), és mindegyik targetben n számú találat (hit) kell az inaktiváláshoz, akkor az inaktiválási (nem túlélési) hányadot a valószínűségek szorzási tétele értelmében az:

$$\frac{N}{N_0} = \left[1 - \sum \frac{(VD)^k}{k!} e^{-VD} \right]^m$$

egyenlet írja le. Ha az egyes targetek különböző számú találatra szükséges az inaktiváláshoz, akkor minden egyes targetre külön ki kell számítani a megkívánt találati számnak megfelelő valószínűséget, és ezeket összeszorozva, a fenti módon kapjuk meg az inaktiválási hányadot.

A 2. ábrán azt mutatjuk be, hogyan lehet meghatározni több, egytalálatos targettel rendelkező objektum túlélési görbéiből a targetszámot. Az ábra görbéi a fenti egyenletből $n = 1$ esetre származtatható túlélési görbéket mutatnak be. D nagy értékei mellett (amikor $e^{-VD} < 1$) igaz az alábbi lineáris közelítés a túlélő hányadra:

$$\ln \frac{N}{N_0} = \ln m - VD.$$



2. ábra. A radioaktív sugárzás dózis–hatás görbéi több „célta” és több találat esetén

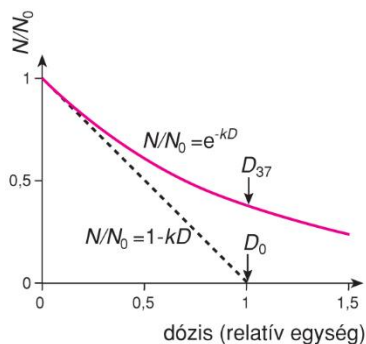
A target(ek) számát (m) az alábbi egyenletnek megfelelő egyenesek által a függőleges tengelyen kimetszett szám adja meg.

c) Az indirekt sugárhatás kinetikája (vízaktiválási elmélet)

Korábban már foglalkoztunk a vízaktiválási elmélettel, amely szerint, nagy számuk miatt, a vízmolekulák az elsődleges célpontok. A reakciók során keletkezett vízgyökök felelősek a kialakuló változásokért. A biológiai hatás tehát indirekt úton, a vízmolekulák közvetítésével jön létre.

Ha a vízgyökök csak egyszer reagálhatnak minden egyes oldott molekulával (az okozott változás kizárja az újabb reakciót), akkor a „túlélési görbét” – itt nem részletezett megfontolások alapján – a következő összefüggés adja (szaggatott vonal a 3. ábrán):

$$\frac{N}{N_0} = 1 - kD$$



3. ábra. Indirekt sugárhatás dózis-hatás görbéje kétféle mechanizmus esetén

Ezt a kinetikát főleg kis molekulák esetén találjuk. Ilyen például a következő átalakulás:



Ebben az esetben a dózis-hatás görbe (szaggatott vonal) $N/N_0 = 0$ értékre extrapolálva adja a D_0 értékét. Ez az a legkisebb dózis, amelynél már minden molekula károsodik. Ha a gyökök véletlenszerűen, azonos valószínűséggel reagálnak az adott molekulákkal, akár sértetlenek, akár már károsítottak, akkor a túlélési görbét a következő összefüggés adja (folytonos vonal az ábrán).

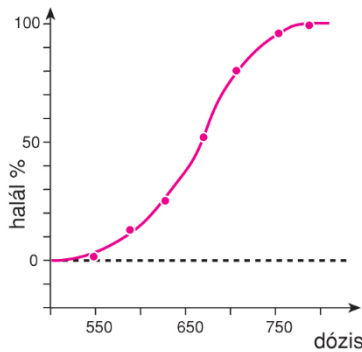
$$\frac{N}{N_0} = e^{-kD}$$

Ez az egyszerű összefüggés természetesen csak akkor érvényes, ha az inaktiválódást már egyetlen sérülés létrehozza. A k értéke nem jelent molekularis méretet, a koncentrációtól függ. A biológiailag fontos makromolekulák (enzimek, DNS) vizes oldatokban besugározva általában a fenti kinetikát követve inaktiválódnak.

d) Emlősök túlélési görbéi

Ha emlősöket, például egereket besugározunk, és figyeljük az állatok egy bizonyos időn belül történő elhullását, akkor más típusú görbét kapunk, mint amelyeket az előzőekben leírtunk. Egy egér pusztulásához nem elegendő egyetlen ionizáció az állat szervezetében. Ezért a dózist növelve eleinte egyetlen állat sem pusztul el a megfigyelési idő alatt. Tovább növelve a dózist, egyes állatok már elpusztulnak, mások nem.

A sugárkárosodási görbéből származtatott túlélési görbe az előzőekhez hasonló féllogaritmusos ábrázolásban sem ad egyenest. Így az igen nagy találati számokra kapott görbékhez hasonlít, nagy „vállal”, ami arra utal, hogy a hatás (elhullás) jelentkezéséhez igen sok találat kell. A hatás különböző dózisoknál történő jelentkezése döntően az egyedek sugárérzékenységében meglévő különbségnek (biológiai variabilitás) és nem a találatok véletlenszerű eloszlásának tulajdonítható.



4. ábra. Emlősök halálozási görbéje

4.5. II/4.5. A sugárhatás molekuláris elmélete

4.5.1. II/4.5.1. DNS-károsodás

A DNS a sejtekben található legnagyobb molekula, ezért a legsérülékenyebb. Azoknál a dózisonál, amelyek már sejtosztódást gátló sérüléseket okoznak a DNS-ben, a kisebb molekulák még nem szenvednek jelentős károsodást.

Már a klasszikus sugárbiológiai kísérletek során is számos bizonyíték halmozódott fel arra vonatkozólag, hogy a sérülés szempontjából az elsődleges céltábla-molekula a DNS. Egyszerű organizmusoknál, mint például bakteriofágoknál és vírusoknál, kvantitatív összefüggés áll fenn a DNS-sérülések és az organizmus biológiai aktivitása között.

Magasabb rendű organizmusoknál azonban már nem ennyire egyszerű kvantitatív összefüggést találni a DNS sérülése és a biológiai aktivitás elvesztése között, de azért az egyértelműen megállapítható, hogy az egyszálú és a kettős szálú DNS-lánc-törések korrelálnak az aktivitás csökkenésével.

Az ionizáló sugárzások által okozott sérülések közül legnagyobb jelentőségűek az egyes és kettős láncú törések. A bázisokon okozott sérülések rendszerint nem okoznak lánc-törést, és az enzimatis folyamatok gyorsan és hatékonyan kicserélik a sérült bázisokat.

A kétszálú töréseknek sokkal komolyabb következményei vannak a sejtre nézve. Ebben az esetben nem áll rendelkezésre a megfelelő szekvencia, így a javítási próbálkozások nagy hibákkal terheltek. A hibák felhalmozódása mutációkhoz s gyakran a sejtek reprodukációs képességének elvesztéséhez vezet (lásd *A DNS-molekula lánc-töréshez vezető sérülései*, *A DNS-sérülések javító mechanizmusai*, valamint *A DNS-sérülésén alapuló molekuláris modell*).

A DNS-molekula lánc-töréshez vezető sérülései

Az ionizáló sugárzások DNS-re gyakorolt direkt hatását könnyű észlelni mint kötésfelszakadást vagy gyökképződést az energia elnyelésének helyén. A vízből képződő gyökök révén megvalósuló indirekt hatás jóval bonyolultabb. Mind a direkt, mind az indirekt sugárhatás változatos sérüléseket hozhat létre a DNS-molekulán. Ezek a sérülések több kategóriába esnek.

- A purin- és a pirimidinbázisok funkcionális csoportjai irreverzibilisen sérülnek, emiatt a DNS megkettőződése során nem a megfelelő bázis épül be az új DNS-láncba (pontmutáció lehet az eredménye).
- A purin- és a pirimidinbázisok sérülése olyan mértékű is lehet, hogy a bázisok teljesen eltűnnek a DNS-ből, bázismentes helyek keletkeznek.
- Gyöktranszfer révén a bázisokon képződő gyökök eljutnak a dezoxiribózfoszfátészter lánchoz, és ott száltörést okoznak.
- A sérülés közvetlenül is elvezethet a DNS egyik szálának töréséhez. A későbbiek során erre, mint egyszálú lánc-törésre hivatkozunk.

- Ha egymáshoz megfelelő közelségben két vagy több száltörés fordul elő, ezek együttes hatása a DNS kettős szálának töréséhez vezethet (kettős szálu törés).

A DNS-sérülések javítómechanizmusai

A DNS-sérülések javítómechanizmusának (reparáció) aktivitása összefügg az adott sejtek túlélésének megnövekedésével. Azok a sejtek, amelyeknél valamilyen ok miatt a DNS-reparáció mechanizmusa hibás, sokkal nagyobb sugárérzékenységet mutatnak, mint vad típusú megfelelőik. A DNS-reparációt gátló vegyületek növelik a sejtek sugárérzékenységét.

A különböző DNS-károsodások helyreállítására a szervezet különböző enzimátikus javítórendszerekkel rendelkezik, amelyek bizonyos szintű károsodásig képesek helyreállítani az eredeti DNS-struktúrát. E javítómechanizmusok között olyanok is találhatóak, amelyek nem feltétlenül biztosítanak hibamentes helyreállítást. Ez azt jelenti, hogy a „helyreállított” DNS információtartalma különbözhet az eredetiétől, így olyan mutációk is bekövetkezhetnek, mint például a cAMP szintjének növekedését eredményező mutáció a *Drosophyla melanogaster* esetében.

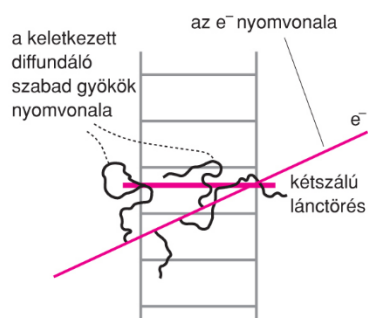
A hidroxilgyökök a DNS-molekula dezoxiribózzsárával reagálnak elsősorban. SH-csoporttal rendelkező molekulák (például glutation) jelenlétében a sérülés kémiai úton regenerálható. Oxigén jelenlétében a sérülés megmaradhat, sőt száltöréshez is vezethet. A DNS-molekulán belül létrejövő egyszálu törések nem feltétlenül végzetesek a sejtre nézve, hiszen az enzimátikus javítófolyamatok ezt a hibát is képesek korrigálni. A hibás rész kivágása után az ép szál mintaként való felhasználásával az eredeti sértetlen DNS-szerkezet visszaállítható. Ilyen egyszálu törések nemcsak sugárzási károsodás révén fordulnak elő, ezeket a hibákat egyéb ágensek, pl. vegyszerek is kiválthatják. Az enzimátikus javítófolyamatok e hibák kiküszöbölésére jöttek létre.

A DNS-sérülésén alapuló molekuláris modell

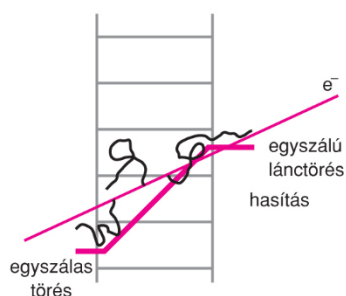
Chadwick és Leenhouts 1981-ben bevezetett egy modellt, amelynek segítségével a klasszikus (fizikai) találatelméletek hibáit korrigálni lehetett. A kutatók modelljüket molekuláris modellnek nevezték el, de a modell elterjedése után mint lineáris-négyzetes modell vált ismertté.

A modell a következő feltevéseken alapszik:

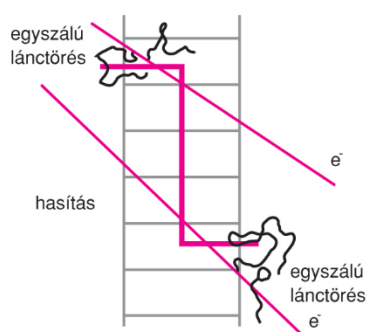
- A sejten belül vannak olyan kritikus jelentőséggel bíró molekulák, amelyek épsége a sejtek reprodukciós képességének fenntartásához elengedhetetlen.
- Ez a kritikus molekula a kettős szálu DNS, a kritikus sérülés pedig a kettős szálu törés.
- A sugárzás direkt vagy indirekt hatásának eredményeképpen a DNS-szálakon kötések szakadnak fel.
- A DNS-molekulán elszenvedett sérüléseket bizonyos körülmények között molekuláris mechanizmusok ki tudják javítani (repair), és a reparáció mértékétől függően a sugárzás végső biológiai hatása is módosul.
- A reparáció lehet fizikai-kémiai rekombináció, töltéstranszfer-folyamat, kémiai restitúció (például glutation jelenléte) és enzimátikus javító mechanizmus.



kétszálú lánctörés kialakulása egy lépésben



két egyszálú lánctörés kialakulása egyetlen ionizáló részecske hatására



két független esemény együttes hatása

DNS-lánctörések kialakulása ionizáló sugárzás hatására

Látható, hogy a modell hidat próbál verni a sugárzás energiaátadásának fizikai folyamatai és a DNS-molekulán a reparáció jelenlététől, illetve hiányától függően létrejövő biológiai hatások között. Maga az elmélet közvetlenül nem tartalmazza az időt mint paramétert, de a modellben fontos szerepet betöltő (és ismert vagy becsülhető időigényű) enzimikus javítómechanizmuson keresztül az idő impliciten jelen van a modellben.

A kétszálú törések létrejöhetnek egy lépésben, a direkt vagy indirekt sugárhatás következtében egyidejűleg történhet a két lánctörése. A kétszálú töréseket kiválthatja két szomszédos egyszálú törés kooperatív kölcsönhatása. Kísérleti adatokból, valamint a hidrogénhidkötések erősségének elemzéséből megbecsülhető, hogy milyen közel kell lenni két egyszálú törésnek ahhoz, hogy a kooperációs kölcsönhatás révén végül is kétszálú DNS-törés jöjjön létre. Tizenkét bázispárnyi távolságon belül létrejövő egyszálú törések vezethetnek kétszálú törésekhez. Az ábra kétszálú lánctörések kialakulásának lehetséges mechanizmusait mutatja. Az ábrán látható, hogy az egyszálú törések egymástól függetlenül is létrejöhetnek két független ionizáló részecske hatására.

A modell alapján a sejtek csökkenő reprodukciós képességének az okai a DNS-molekulán megfigyelhető kettős szálú törések. Az ábrán feltüntetett sémáknak megfelelően a DNS kettős láncú törései kétféleképpen valósulhatnak meg.

Egyrészt egy sugárzási eseményen belül, amikor a két lánc egyszerre törik el. Másrészt két független esemény következtében, amikor az egyes szálak külön-külön törnek el két sugárzási esemény során. Ebben az esetben a két törésnek időben és térben megfelelő közelségben kell lenni, hogy kettős láncú törés jöjjön létre.

A molekuláris modell levezetése során a DNS kettős láncú törésére vezető mechanizmusok bekövetkezési valószínűségeit határozzák meg a különböző módosító tényezők figyelembevételével. A részletes levezetést nem kívánjuk tárgyalni, csak a végső képletet adjuk meg:

$$S = e^{-(\alpha D + \beta D^2)}$$

illetve logaritmikus formában:

$$\ln S = -(\alpha D + \beta D^2)$$

ahol S a túlélési hányad (N/N_0), D a dózis, α és β a molekuláris paramétereket (például kritikus kötések száma, a kötések sugárérzékenysége, az egyes és kettős szálú törések megoszlása stb.) tartalmazza.

A logaritmikus egyenlet linearizált változata kényelmesebben kezelhető a kísérleti eredmények elemzése során. Az egyenlet mindkét oldalát osztjuk a dózissal és ábrázoljuk az $(\ln S)/D$ -t a D dózis függvényében. A kapott egyenes tengelymetszete $-\alpha$ -val, az egyenes meredeksége pedig $-\beta$ -val egyezik meg.

$$\frac{\ln S}{D} = -\alpha - \beta D$$

A modellt leíró egyenlet első tagja (αD) az egy lépéses kettős láncú törések létrejöttének valószínűségével arányos, a másik tagja, βD^2 pedig a két különböző láncon egymástól függetlenül létrejövő egyszálú törések megfelelő térbeli és időbeli közelségének együttes előfordulási valószínűségével arányos. (Csak emlékeztetésül: független események együttes bekövetkezési valószínűsége az egyes események valószínűségének szorzata.) Az egyenletből jól látható, hogy miért nevezték a molekuláris modellt lineáris-négyzetes modellnek, a dózis egyrészt elsőrendű kitevővel, másrészt négyzetes kitevővel is szerepel.

A lineáris-négyzetes modell segítségével a dózis–hatás görbékét sokkal pontosabban lehetett illeszteni. Míg a klasszikus találatelméletekkel az alacsony, illetve a nagyon nagy dózisoknál megfigyelt viselkedést nem lehetett megmagyarázni, addig a lineáris-négyzetes modell ezekben a dózistartományokban is jól alkalmazható. Külön előnye a modellnek, hogy a segítségével kapott paraméterek reális molekuláris mechanizmusokat takarnak.

4.5.2. II.4.5.2. Fehérjék károsodása

Bár a fehérjék sugárkárosodása egyaránt bekövetkezhet direkt, valamint indirekt módon, mégis az indirekt hatások játszanak döntő szerepet. A OH-gyökök gyorsabban reagálnak az aromás és a kéntartalmú aminosavakkal, mint a metionin, cisztein és cisztin. Az utóbbiakat a hidratált elektron is erősen károsítja. A direkt sugárhatás során a károsodás legtöbbször a glicin alfa-szénatomjánál jön létre, vagy a cisztein, cisztin aminosav kénatomjánál.

A különböző enzimek a sejtekben a legkülönbözőbb koncentrációkban vannak jelen. Ráadásul az enzimek állandóan újraképződnek, ezért bizonyos enzimek károsodása az egész sejt szempontjából lényegtelen lehet. Másrészt nem zárható ki, hogy nagy sugárérzékenységű enzimek kis koncentrációban vannak jelen a sejtben. Ezek sérülése a sejtmetabolizmus teljes felborulásához vezethet. Meg kell jegyezni, hogy ilyen enzimek jelenlétét még nem sikerült kimutatni.

Az enzimek *in vivo* nagyobb sugárérzékenysége azt sugallja, hogy a sejtekben egyéb mechanizmusok is hozzájárulhatnak a károsodáshoz. Ilyen mechanizmus lehet más strukturális elemek, mint például a sejtmembrán károsodása (lásd II.19. megjegyzés).

II.19. megjegyzés. *Egyéb makromolekulák károsodása*

Természetesen nemcsak a nukleinsav- és a fehérjeállomány sérülése jelenti a sugárkárosodást. Egyéb makromolekulák (például lipidek) károsodása is bekövetkezhet. A molekuláris szintű károsodás pedig egész sejtstruktúrák (például membrán, különböző sejtalkotó részek stb.) károsodásához, sőt az egész sejt pusztulásához vezethet.

4.5.3. II.4.5.3. A szervezet szintjén jelentkező tünetek

Lényeges különbség van a lokális és az egész testet ért sugárzás által kiváltott károsodás között. Egyes szervek védelme (például kis állatokon a máj és a lép letakarása ólomlemezzel) egésztest-besugárzás esetén is jelentősen csökkenti a kockázatot. Az egésztest-besugárzás a legveszélyesebb. Az a sugármennyiség, amely egésztest-besugárzás esetében az esetek felében halálhoz vezet, a felületi bőrretekben, ha nem túl nagy területet ér, csak erythemát okoz. A röntgenorvosok és a baleseti sebészek kezén gyakori volt régebben a krónikus lokális sugárártalom okozta fekély. A sugárhatásnak kitett felületen a dózis nagyságától függő gyorsasággal napok vagy hetek alatt az égési sérüléshez hasonló, nehezen gyógyuló fekélyek keletkeznek. A bőr függelékai igen érzékenyen reagálnak a besugárzásra. A kopaszság, a szőrzet kihullása már aránylag kis dózisoknak is velejárója, és a dózistól függően lehet ideiglenes vagy végleges.

A vérképző szervekre gyakorolt sugárhatás a vérkép elváltozásában, főleg a fehérvérsejtek számának csökkenésében mutatkozik. Nagyobb sugáradag hatására a vörösvértetek száma is csökken. A vérképelváltozások akut vagy krónikus jellegűek lehetnek. A csont- és idegszövetek kevésbé érzékenyek ugyan, mégis bizonyos esetekben csontártalmak (sorvadás, daganatok) lépnek fel, illetve fejfájás, fáradtságérzés, szédülés jelentkezik. Az utóbbiak eredete nem teljesen tisztázott.

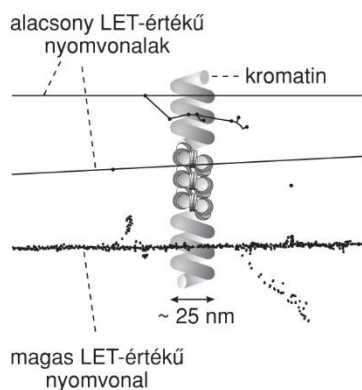
4.6. II/4.6. A sugárhatást befolyásoló tényezők

Az aktuális sugárérzékenységet nagymértékben befolyásolják a besugárzás előtti, alatti és utáni környezeti feltételek. Ezek az ún. sugárhatást módosító tényezők három csoportba sorolhatók: fizikai (a sugárzás fajtája, dózisteljesítmény, dóziszfracionálás, hőmérséklet), kémiai (oxigénhatás, víztartalom, sugárzással szembeni érzékenyítő és védő vegyületek stb.) és biológiai tényezők (sejtciklus állapota, sejtbiológiai képességek stb.).

4.6.1. II/4.6.1. A sugárzás minősége

Az élő szervezetben kialakuló biológiai változások mértéke kapcsolatban van a sejtek, szövetek által elnyelt energiámmennyiséggel. Minthogy csak az elnyelődő fotonok, illetve részecskék váltanak ki biológiai választ, a rendkívül nagy energiájú és ezért a testszövetekben kisebb mértékben elnyelődő kemény röntgen- és gamma-fotonok kevésbé „hatásosak”, mint a nagyszámú iont létrehozó és rövid úthosszon elnyelődő részecskesugárzás (α , β , neutron).

Ennél a pontnál ismét hangsúlyozni kívánjuk az ionizációs sűrűséggel összefüggő lineáris energiaátadás (LET) fontosságát. A II.76. ábra jól demonstrálja, hogy a kis LET-értékkel rendelkező részecske pályája mentén az egyes ionizációs események olyan messze helyezkednek el egymástól, hogy kicsi annak a valószínűsége, hogy egy eseményen belül egyből kettős láncú törés jöjjön létre. Nagy LET-értékkel rendelkező részecske pályája mentén az egyes ionizációs események olyan sűrűn következnek be egymás mellett, hogy a kromatinon belül könnyen kettős láncú törést hozhatnak létre egy lépésben. Nagy LET-értékkel rendelkező részecskékkel történő besugárzás esetén a dózis-hatás görbék válla éppen ezért tűnik el, hiszen a kettős láncú törések már kis dózis esetén is számottevő valószínűséggel következnek be.

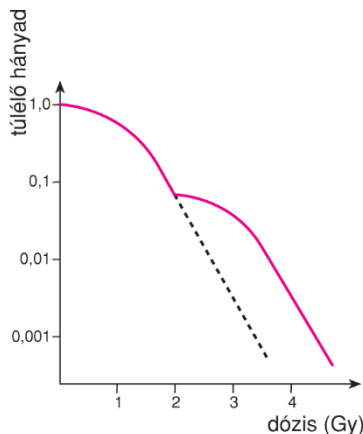


II.76. ábra. A kromatin és az ionizációs sűrűség viszonya kis és nagy fékezőképességgel (LET) rendelkező sugárzások esetén

4.6.2. II/4.6.2. Időfaktor

A biológiai rendszerek sugárérzékenysége attól is függ, hogy a sugárdózist milyen időtartamon belül abszorbeálják. A sugárzás intenzitásának – adott dózis leadásához szükséges idő reciprokának – növekedésével nő a sugárérzékenység is. A dózist felosztva bizonyos időközökre és dóziszrészekre, a sugárrezisztencia növelhető. Ezt a módszert nevezzük frakcionálásnak. A sugárdózis frakcionálásának a rosszindulatú daganatok gyógyításában nagy jelentősége van. A frakcionált besugárzás biológiai hatását a frakciók nagysága és a köztük eltelt idő erősen befolyásolja (II.77. ábra). Az ábrán jól látható, hogy ha a dóziszgörbe lineáris szakaszán az újabb dózis közlése előtt több órát várunk, a sejtek túlélési képessége jelentősen megnő.

Minél több részre bontjuk a dózist, és minél több idő telik el a dóziszrészek leadása között, annál kevésbé veszélyes az összdózis hatása a biológiai objektumra. A sugárérzékenység „ciklusos” változásának oka a sérüléseket javító mechanizmusok sejtciklussal változó intenzitása. Az időfaktor megmutatja, hogy adott frakcionálási tényezők esetén a frakcionáltan adott dózis mekkora egyszerre leadott dózissal felel meg biológiai hatását tekintve. Az időfaktor értéke egyedenként, szövetenként, szervenként változik. Ez lehetővé teszi, hogy az egyes szövetek között sugárérzékenységekben meglévő különbséget növeljük. Az időfaktor létezése azt a logikus következtetést vonja maga után, hogy a sejtek a két dózisfrakció leadása közötti időben bizonyos mértékig regenerálódhatnak. Ez csökkenti a leadott összdózis eredményességét. Az időfaktor miatt a frakcionált besugárzás azt a látszatot kelti, mintha a besugárzott objektum sugárérzékenysége csökkent volna.



II.77. ábra. A dózis frakcionálásának hatása a túlélési görbére

4.6.3. II/4.6.3. Anyagcsere és hőmérséklet

Az élő szervezetek sugárérzékenysége függ a szervezet anyagcsere-intenzitásától is. Az élénkebb anyagcserét folytató szerveken, sőt sejteken belül az egyes sejtalkatrészek közötti élénkebb anyagcsere-folyamatokat a sugárzás lényegesen könnyebben megzavarja, mint a lassú anyagcseréjű biológiai rendszerek működését.

A magasabb hőmérséklet fokozza az anyagcserét. Az alacsony hőmérséklet védőhatásának a lényege az, hogy az anyagcsere-folyamatokat lelassítja, ezáltal azok károsodása nehezebben jön létre, illetve több idő van a károsodás esetleges molekuláris szintű javításához.

A sugárkárosodás kifejlődésében valószínűleg közrejátszik az anyagcsere szabályozásának a károsodása is. Erre utal az is, hogy néhány kulcsfontosságú enzim szabályozófunkciója fél-egy nagyságrenddel sugárérzékenyebb, mint katalitikus aktivitása.

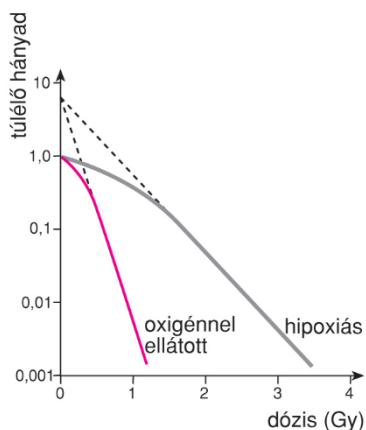
4.6.4. II/4.6.4. Az oxigén hatása

Az O_2 hatása a sugárzás vízaktiválási elméletével igen jól magyarázható. Az O_2 jelenléte elősegíti a reakcióképes szabad gyökök, valamint a rendkívül ártalmas H_2O_2 keletkezését. Az O_2 hatása legszembetűnőbben röntgen- és γ -sugárzás esetében tapasztalható. Az O_2 parciális nyomásának a csökkentése vagy teljes megszüntetése (nitrogénatmoszféra) csökkenti a sugárhatást. A sejten belül és a szervekben a sejt közötti állományban is meghatározott O_2 -telítettségi szint van, amelyet a szerv anyagcseréje szab meg. A sejtek, illetve

a szervek O_2 -telítettségének a foka nagyjából párhuzamos azok sugárérzékenységevel. Ugyanakkor meg kell jegyeznünk, hogy az O_2 -túlnyomás nem mindig fokozza a sugárérzékenységet (lásd még *Kísérleti eredmények az oxigén-hatás igazolására*).

Kísérleti eredmények az oxigénhatás igazolására

Az *Escherichia coli* baktérium aerob, illetve anaerob körülmények között mutatott sugárérzékenysége között 5 nagyságrend a különbség! Emlőssejtek esetén is megfigyelhető az oxigén koncentrációjára való érzékenység, normális oxigénkoncentráció mellett a sejtek jóval érzékenyebbek a sugárhatásra, mint hipoxiás körülmények között (lásd ábra). Ezt a körülményt a rákos szövetek besugárzásakor is figyelembe kell venni, hiszen a rákos szövetek vérellátottsága nem olyan jó, mint a normál szöveteké, ezért ott rendszerint hipoxiás körülmények vannak. Az oxigén hatása annyira szembeszökő, hogy Fritz-Niggli (1958) ennek alapján próbálta magyarázni a különböző sejtek és szövetek sugárérzékenysége közötti különbséget.



Az oldat oxigénkoncentrációjának hatása a túlélési görbére

4.6.5. II/4.6.5. Sugárzás ellen védő anyagok

A sugárzás mint fizikai hatás az alapjelenségek szintjén nem specifikus. Nem tesz különbséget a sejt egyes alkotórészei, illetve az egyes szervek között. A különböző sugárérzékenység nem fizikai jellegű. A fizikai hatást legfeljebb az befolyásolja, hogy vannak olyan biológiai anyagok (sejtmag, DNS, enzimek stb.), illetve az anyagcsere olyan fázisai, amelyek károsodása az egész biológiai objektum életképessége szempontjából nagyobb veszélyt jelent. A sugárhatás elleni védekezés első és legfontosabb szempontja a megelőzés. A radioaktivitás és a röntgensugárzás hatásának kitett emberek csökkentett munkaidőben, szigorú biztonsági előírások betartása mellett dolgoznak. Ma már ismerünk olyan anyagokat, amelyek a sugárhatás előtt injekció vagy tablettá formájában a szervezetbe juttatva csökkentik a sugárérzékenységet.

4.6.6. II/4.6.6. Biológiai tényezők

Ebbe a csoportba tartoznak mindazon folyamatok, amelyek hatással vannak a sejtek biokémiai, fiziológiai állapotára. Ha egy mikroorganizmust friss táptalajra oltanak át és az idő függvényében ábrázolják a mikrobák számát, a szaporodási görbe három szakaszra különíthető el (log, exponenciális, stacioner). Ha különböző időben vesznek mintát besugárzásra, akkor a biológiai válaszok is különbözni fognak. Az esetek többségében az exponenciális szakaszból származó mikroorganizmusok sugárérzékenysége a nagyobb.

A sugárérzékenység azonban nemcsak a sugárzás fajtájától, de a besugárzott biológiai objektumtól is függ. A különböző állati és növényi egyedek különböző sugárérzékenységgel rendelkeznek (II.14. táblázat). Ezen túlmenően egy egyedben belül a különböző sejtalkotó részek, sejtek, szövetek és szervek sem egyenlő mértékben érzékenyek a besugárzás iránt (II.15. táblázat). Nem sokkal az ionizáló sugárzás felfedezése után kimutatták, hogy a ráksejtek, de általában a gyorsan osztódó sejtek sugárérzékenyebbek, mint a lassúbb anyagcserejű szövetek. Mielőtt a XX. század beköszöntött volna, bőrrákot már gyógyítottak sugárkezeléssel.

2.17. táblázat - II.14. táblázat. Különböző fajok félhalálos dózisa

Faj	Félletális dózis (Gy)

II. rész – Sugárzások és
kölsönhatásuk az „élő” anyaggal

Kutya	3–4,3
Majom	5
Egér	4–6,5
Ember	5–8
E. coli	5,6
Denevér	150
Élesztő	300
Amőba	1000
B. mesentericus	1500
Paramecium	3000

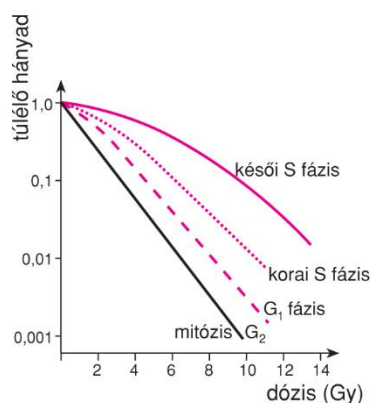
2.18. táblázat - II.15. táblázat. A legfontosabb szövetfélések sugárérzékenység alapján felállított sorrendje

1.	nyirokszövet
2.	fehérvérsejtek, csontvelői éretlen vörösvérsejtek
3.	gyomor-, béltraktus nyálkahártyái
4.	ivarsejtek
5.	bőr osztódó sejtrétege
6.	erek
7.	mirigyszövetek, máj
8.	kötőszövet
9.	izomszövet
10.	idegszövet

A megfigyelések alapján a következő szabályokat állították fel: A röntgen-sugarak annál intenzívebben hatnak a sejtekre, minél nagyobb fokú azok szaporodási készsége, minél hosszabb a sejtmag osztódási periódusa és minél kevésbé rögzített a sejtek morfológiája, illetve működése. Más szóval ez azt jelenti, hogy **minél kevésbé differenciált egy sejt, annál nagyobb a sugárérzékenysége**. Ezt a szabályt a sejtek alaktani megfigyelése alapján állapították meg. A szabály – bár számos módosítással – nagyjából még ma is érvényes. Természetesen felállításának az időpontjában a mai modern vizsgálati módszerek hiányában nem jöhettek rá arra, hogy a sejtek sugárkárosodást szenvedhetnek, működésük károsodhat akkor is, ha morfológiai elváltozást nem lehet kimutatni.

Az osztódó sejtek sugárérzékenysége nagymértékben függ attól, hogy a sejtek a sejtciklus melyik fázisában vannak. Bár a sugárérzékenység sejtciklustól való függése elég nagyfokú biológiai variabilitást mutat a sejtek fajtájától függően, néhány általános érvényű szabályt azért fel lehet állítani (II.78. ábra). Valamennyi sejt vonal esetében a sejtek az M és G₂ fázisban voltak legérzékenyebbek a sugárzásra. Rákos sejtek kezelésében végeredményben a sejteknek ezt a tulajdonságát használják fel, feltételezve, hogy a rákos sejtek gyorsabban osztódnak, mint a károsítani nem kívánt normál sejtek. Legtöbb sejt vonal a sejtciklus S fázisának vége felé a legkevésbé érzékeny a radioaktív sugárzásra. A sugárzás természetesen a sejtciklus időbeli lefolyására is hatást gyakorol, a besugárzott sejtek átmenetileg a G₂ fázisban állnak meg.

Hunt és munkatársai kimutatták, hogy ha patkányok elhárító feltétlen reflexét olyan alacsony sugárdózissal társítják, mint például $2,5 \cdot 10^{-3}$ C/kg, akkor feltételes reflex alakulhat ki, amelynek feltételes ingere a sugárzás. Ez amellől szól, hogy a központi idegrendszer igen érzékenyen reagál a sugárzásra. A morfológiai elváltozás egymagában nem lehet mérvadó a sugárkárosodási, de különösen nem a sugárérzékenységi sorrend megállapításakor. Természetesen a központi idegrendszer óriási funkcionális tartalékokkal – hibajavító kapacitással – rendelkezik, és a funkcionális sugárkárosodást alacsony dózistartományban jól kompenzálhatja.



II.78. ábra. A sugárhatás sejtciklustól való függése

4.7. II/4.7. A nem ionizáló sugárzások és a vegyszerek hatásai

Elsősorban a környezetvédő mozgalmak révén vált általánosan ismertté az a tény, hogy az emberi tevékenység következtében az ionizáló sugárzásokon kívül más környezeti tényezők is lehetnek egészségre károsító hatásúak. Az összes egészségkárosító hatást egybefoglalva **környezeti ártalmakról** beszélünk. Ez a kifejezés azt is magában foglalja, hogy egy adott környezeti ártalom vizsgálatakor, pl. ólomszennyezés, nemcsak a közvetlenül érintett lakosságot, hanem a növény- és állatvilágot, sőt a talaj és a vizek szennyezettségét (ún. földi ökológiai rendszert) is vizsgálnunk kell.

Megkülönböztethetünk fizikai és kémiai ártalmakat. Fizikai ártalomként elsősorban a sugárzásokat (a különböző fotonenergiájú elektromágneses sugárzásokat, a részecskesugárzásokat, a hangot, ultrahangot) tekintjük. Kémiai ártalomként az anyagokat, vegyületeket, atomokat tekintik, amelyek az élőlények biokémiai folyamatainak keresztül fejtik ki hatásukat. A hatás kifejtéséhez természetesen szükséges egy elsődleges lépcső, ami a legtöbb esetben adszorpciós, abszorpciós folyamat. Ezt követheti az adott károsító anyag feldúsulása egy adott szövetben, sejtben, vagy többé-kevésbé specifikus kötődése létfontosságú makromolekulához, pl. DNS-hez, fehérjéhez. Ez az elsődleges lépcső hasonló, mint a primer ionizáció az ionizáló sugárzásoknál, amennyiben ez az a primer kölsönhatás, ami a fizikai vagy kémiai ártalom kialakulásához szükséges (lásd még *A környezeti ártalmakról*).

A környezeti ártalmakról

1. Környezeti ártalmak általános leírása

Természetes eredetűnek tekintjük mindazokat a károsító anyagokat, amik az emberi beavatkozás nélkül jelennek meg. Vulkánkitöréskor a levegőbe jutó mérgező gázok, pernye vagy a Föld felszínét elérő UV sugárzás, a primer és szekunder kozmikus sugárzás szolgálhat példaként a természetes környezeti ártalmakra. Ebben az értelemben minden olyan más anyagot, ami az emberi tevékenység következményeként fejt ki hatását, *mesterséges eredetűnek* tekinthetünk. Számos esetben – gondoljunk pl. az ózonnra – a forrást mindkét oldalon megtaláljuk. Az ózon egyrészt a légkörben természetes úton is keletkezik, ugyanakkor számos ipari eljárás

melléktermékeként, szintén nem elhanyagolható mennyiségben bejut például a levegőbe. Nemcsak a különféle ipari tevékenységek mellékterméke lehet káros hatású. Közismert, hogy a növényvédő szerek igen nagy hányada, hacsak nem valamennyi, nemcsak az emberekre, de gyakran hasznos rovarokra, madarakra, kisméltősökre is veszélyes.

A fizikai és kémiai ártalmakon kívül egy másik osztályozás szerint megkülönböztetünk *légköri, vízi és talajszennyezést*, értelemszerűen attól függően, hogy a szennyező anyag hol található. Például a higanyt, illetve vegyületeit mindhárom helyen megfigyelték; a növényvédő szerek maradványait általában talaj- és vízmintákban találhatjuk meg. A radon, gáznemű lévén, elsősorban a levegőben és a radontartalmú ásványokkal érintkező talajvízben mutatható ki. Az ipari hulladékok feldolgozása során az üzemek törekszenek arra, hogy a veszélyes hulladékot valamilyen szilárd vagy folyadék fázisú abszorbens segítségével megkössék, s a megfelelő feldolgozási, a káros vegyület természetes lebomlásáig ebben a formában tárolják.

A fizikai és a kémiai ártalmak osztályozásakor abból a feltételezésből indulnak ki, hogy a primer kölcsönhatás típusa egzakt módon megállapítható, azaz rendelkezünk olyan éles felosztással a fizikai és kémiai kölcsönhatások között, amit minden esetben alkalmazhatunk. Ez azonban nem minden esetben egyértelmű, hanem igen sokszor korábbi megállapodások alapján mondjuk az egyik kölcsönhatásról azt, hogy kémiai, míg egy másiktól, hogy fizikai. Tipikus példa erre az az eset, amikor nem szükségszerűen alakul ki stabil kémiai kötés két molekula között, de a fellépő intermolekuláris kölcsönhatások – pl. ion-ion, ion-dipól, dipól-dipól kölcsönhatások – biztosítják a folyamatot, azaz molekulák, atomok vagy ionok között kialakuló kölcsönhatással állunk szemben.

A *dózis* mint a fizikai és kémiai behatás nagyságát leíró jellemző definiálásakor felhasználhatjuk az ionizáló sugárzásoknál megismert fogalmakat. Ebben az értelemben dózis alatt a fizikai kölcsönhatás következtében felvett energiát, vagy (mivel ez nem mindig mérhető) a besugárzott *felületi teljesítménynek és az időnek a szorzatát* értelmezzük. A kémiai reakciók során a koncentráció az a mennyiség, ami meghatározza a reakció sebességét, a termék keletkezett össz mennyisége pedig *a koncentráció és a reakcióidő szorzatától* függ. Ez a magyarázata annak, hogy a kémiai behatások leírásakor a (*kémiai*) *dózist* mint a *koncentrációnak és az időnek a szorzatát* tekintjük.

2. A környezeti ártalmak hatásainak általános leírása

A környezeti ártalmak hatásainak általános leírásakor három fő problémakörrel foglalkoznak: a) a biológiai hatás kialakulásának folyamata a primer kölcsönhatástól kiindulva; b) miképpen függ a biológiai hatás mértéke a környezeti ártalom nagyságától/erősségétől; c) hogyan függ a biológiai hatás a környezeti hatás további jellemzőitől.

Az előző megjegyzést szem előtt tartva bármilyen hatás kialakulásához értelmezhetünk egy primer kölcsönhatást, ami fizikai, vagy kémiai kölcsönhatás lehet. Ezt követi általában egy fizikai-kémiai folyamat, majd biokémiai reakciók láncolata, ami elvezethet egy adott biológiai hatás kialakulásához. A környezeti ártalom kialakulásának folyamatában nemcsak az egyes részfolyamatok jellege különbözik, hanem általában az egyes részfolyamatok időskálája is eltérő. Míg a primer kölcsönhatás rövid idő alatt – általában rövidebb, mint 0,1 ms alatt – bekövetkezik, a fizikai-kémiai folyamat a szekundum, perc időtartományban játszódik le. Ennél is hosszabb lehet a biokémiai folyamatok lezajlása, s a biológiai hatás kialakulása esetleg még hosszabb, akár órák vagy napok, sőt több év is eltelhet a környezeti ártalom biológiai hatásának megjelenéséhez.

A környezeti hatások vizsgálatokor egyrészt a behatás nagyságát, például a napsugárzás, vagy radioaktív háttérsugárzás intenzitását, másrészt a kiváltott biológiai hatást szokás mérni. Elegendően nagy számú mérés alapján lehetőség van arra, hogy a behatás mértéke és a hatás nagysága közötti kapcsolatot akár függvényyszerű összefüggés formájában megadjuk. A külső behatások sokfélesége, a biológiai rendszerek lehetséges válaszreakcióinak sokrétűsége a magyarázata annak, hogy jelenleg még messze vagyunk egy egységes leírástól. Az ionizáló sugárzások és a különböző elemek, vegyületek által okozott károsodásokat tanulmányozzák legrégebb óta. Az ezeken a területek felhalmozott tapasztalatokat, fogalmakat alkalmazzák az újabb környezeti károsodásokra is. Így, például a légköri és vízszennyezésekre bevezették a maximálisan megengedett koncentrációját az adott vegyületeknek, anyagoknak, ami még nem okoz egészségkárosodást. A maximálisan megengedett koncentráció egyben megfelel annak a minimális behatásnak, ami még nem vagy csak minimálisan károsítja a szervezetet. Az epidemiológiai tanulmányokban gyakran alkalmazzák még a D_{37} , illetve D_{50} dózisértékeket, amelyek megfelelnek annak a dózissal, melyek 37, illetve 50 százalékos túlélést eredményeznek ($37\% = \frac{100\%}{e}$).

3. Fizikai dózis – biológiailag hatásos dózis – hatásspektrum

Tegyük fel, hogy olyan környezeti behatást vizsgálunk, amelynek jellemzéséhez nem elegendő csupán a behatás nagysága, hanem egy másik adat is szükséges. Gondoljunk például az elektromágneses sugárzásra vagy a hangra: ezekben az esetekben az intenzitás mellett a frekvencia is szerepet játszhat. Ilyenkor azt tapasztalhatjuk, hogy ugyanakkora „dózsit” alkalmazva, a frekvencia változtatásával a biológiai hatás mértéke jelentősen változik – pl. 1 kHz-es hang sokkal kisebb intenzitását meghalljuk már, mint egy 50 Hz-es hangét; bizonyos szagokra, illatokra sokkal érzékenyebbek vagyunk, mint másokra. Ezekben az esetekben, a dózis – mint a behatást jellemző mérték – és a biológiai hatás között nincs egyértelmű az összefüggés. Érdemes tehát bevezetni egy „fizikai” dózsit valamint egy biológiailag hatásos dózsit. A fizikai dózis jellemzi a forrás, a behatás erősségét, a biológiailag hatásos dózis pedig a biológiai hatást. Az ionizáló sugárzásoknál már megismert fogalmakhoz, az egyenértékűdózsishoz (H), vagy effektív dózsishoz (E) hasonlóan bármely más környezeti ártalomra értelmezhetjük a biológiailag hatásos dózsit.

Az UV sugárzás biológiai hatásainak kísérleti vizsgálatakor már az 1930-as években rájöttek arra, hogy az UV-C sugárzás sokkal nagyobb csíraölő hatással rendelkezik, mint pl. az UV-B vagy UV-A komponensek. Tehát a biológiai rendszer érzékenysége a hullámhossz függvényében változó; azaz egységnyi UV-intenzitás, különböző hullámhosszúság mellett eltérő nagyságú biológiai hatást vált ki. Ennek a jelenségnek a leírása a következő gondolatmenettel lehetséges.

Egy UV-forrás által egy adott λ hullámhossz $\Delta\lambda$ környezetében kibocsátott „fénynek” a felületegységre merőlegesen beeső intenzitást jelöljük $J_E(\lambda)$ -val. (Lehet ez például a Nap által kibocsátott UV sugárzás spektruma a Föld felszínén mérve.) A spektruma a szokásos $\Delta J/\Delta\lambda$ mennyiség hullámhossztól való függését jelenti. E mennyiség mértékegysége pl. $W/(m^2\cdot m)$.

Jelöljük s -sel azt a biológiai hatást, amit egységnyi fizikai dózis vált ki. s mértékegysége pl. fototermékek száma/(J/m^2), ha a DNS sérülését vizsgáljuk UV sugárzás hatására. A különböző hullámhosszak mellett meghatározott $s(\lambda)$ értékeket nevezik **spektrális érzékenységeknek**, magát az $s(\lambda)$ függvényét pedig **hatásspektrumnak**.

Egy adott λ hullámhosszúság körüli $\Delta\lambda$ tartományban Δt idő alatt, egységnyi felületen kiváltott biológiai hatást, ΔH -t, a következő módon definiáljuk: $\Delta H = J_E(\lambda) s(\lambda) \Delta t$.

Osszuk fel egy UV forrás, pl. a Nap vagy UV lámpa, spektrumát $\Delta\lambda_i$ tartományokra, s jelöljük J_{Ei} -vel, az i -dik $\Delta\lambda_i$ intervallumban, a sugárforrásból a vizsgált felületre merőlegesen beeső intenzitást. Ebben a kiválasztott tartományban a vizsgált biológiai hatás érzékenységét jelöljük s_i -vel. Így ugyanebben a tartományban Δt idő alatt a hatás $H_i = J_{Ei} s_i \Delta t$.

Ha a teljes UV-tartományban akarjuk leírni a biológiai hatást, és feltesszük, hogy ezek függetlenek egymástól, akkor egyszerűen összegeznünk kell az összes $\Delta\lambda_i$ tartományra és az időtartamra. A t idő alatt kiváltott H

biológiai hatást nevezzük **biológiailag hatásos dózissnak**: $H = t \sum_i H_i = t \cdot \sum_i J_{Ei} \cdot s_i$ feltéve hogy a vizsgált teljes időtartam alatt a sugárforrás intenzitása nem változik. H egysége ebben az esetben mindig az adott biológiai hatás.

Az UV sugár hatásának fenti példájában a biológiailag hatásos dózis és a behatás mértéke között függvényszerű kapcsolat volt. Igen gyakran találkozhatunk azonban olyan környezeti behatásokkal, amelyek hatásai nem írhatók le függvényszerű kapcsolattal; például a dohányzás és a tüdőrák gyakorisága, az alkoholfogyasztás és a májkárosodás. Ugyanakkor epidemiológiai, statisztikai vizsgálatok segítségével megadható az, hogy egy adott környezeti behatás veszélyes-e számunkra vagy sem. Azokat a behatásokat, amelyek (mint környezeti ártalmak) káros hatással lehetnek az egészségünkre **rizikófaktoroknak** nevezik.

3. fejezet - III. rész – Transzportjelenségek élő rendszerekben

Transzportjelenségeken olyan folyamatokat értünk, melyek során bizonyos anyagok, illetve mennyiségek (pl. tömeg, elektromos töltés stb.) térbeli eloszlása megfigyelhető módon átrendeződik, leegyszerűsítve: „egyik helyről a másikra szállítódik”. Transzportjelenség pl. a folyadékok és gázok áramlása, az elektromos áram, a részecsketranszport, azaz a diffúzió stb. Ezek mind az életfolyamatok alapjait jelentik, ezért orvosi jelentőségük nyilvánvaló.

A transzportfolyamatokban a szállítás mechanizmusa kétféle lehet. Az egyikben a mennyiséget hordozó részecskék kollektíven vándorolnak, ez a legtöbbször közvetlenül makroszkopikusan is megfigyelhető, pl. egy folyadék áramlásakor. A másikban a részecskék „egyéni”, egymástól lényegében független mozgásai révén – amit még mikroszkopikusan sem figyelhetünk meg – jön létre a makroszkopikusan mégis észlelhető átrendeződés. Ez utóbbi folyamatra példa a diffúzió.

A fejezet első részében az egyes transzportfolyamatokat külön-külön tárgyaljuk, majd egy általános formalizmust adunk leírásukra.

A transzportfolyamatoknak lényeges energetikai vonatkozásai vannak, hiszen bármely mennyiség transzportja (lásd pl. az elektromos áramot) egyúttal energiát is jelent. Ezekkel foglalkozunk a fejezet további részében.

Végül egy orvosi szempontból fontos speciális rendszeren, a sejtmembránon keresztül zajló transzportfolyamatokkal és azok következményeivel zárjuk a fejezetet.

1. III/1. Folyadékok és gázok áramlása

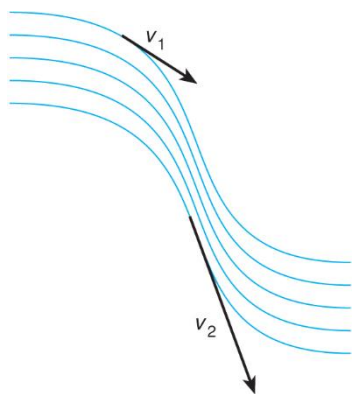
Az élethez szükséges anyagok felvételében és a szervezet különböző részeibe történő viszonylag gyors eljuttatásában fontos szerepet játszanak a makroszkopikus áramlások (légzés, vérkeringés). E folyamatok törvényszerűségeinek megismerése céljából foglalkozunk a következőkben folyadékoknak és gázoknak csövekben történő áramlásával.

1.1. III/1.1. Alapfogalmak és alapegyenletek

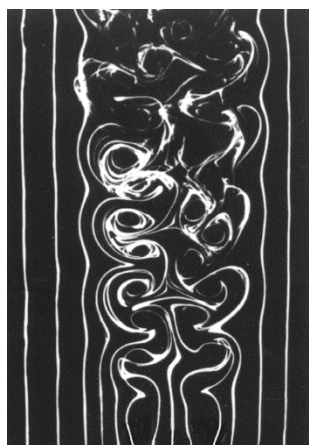
A folyadékok közönséges nyomásokon összenyomhatatlanoknak tekinthetők. A gázok természetesen összenyomhatók, de azok a kis nyomáskülönbségek, amelyek a szervezetben előfordulnak (például légzésnél néhány száz Pa), alig változtatják meg a gáz sűrűségét. Ebben az értelemben a gázokat is összenyomhatatlanoknak tekinthetjük. Tárgyalásunkban az egyszerűség kedvéért legtöbbször csak folyadékokról beszélünk, de a fenti feltétel mellett eredményeink gázokra is vonatkoznak.

Az áramlási viszonyokat az **áramvonalakkal** szemléltethetjük: az áramvonal érintője egy adott pontban megmutatja az áramlási sebesség irányát, az áramvonalak sűrűsége pedig a sebesség nagyságát (III.1. ábra).

Az áramvonalakat láthatóvá is tehetjük, ha a cső valamely keresztmetszetének (a sebességviszonyok által meghatározott) pontjaiban jól látható festéket juttatunk az áramló folyadékba. Ilyenkor a festékcsíkok mutatják az áramvonalakat. Egy ilyen kísérlet eredményét mutatja a III.2. ábra. Kis áramlási sebességnél a festett folyadék nem keveredik a színtelennel, a folyadék mintegy „rétegekben” áramlik (ez valósul meg a cső szélén). Ilyenkor **réteges**, vagy **lamináris áramlásról** beszélünk. Egy bizonyos kritikus sebességet (v_{krit}) túllépve azonban a festett folyadékréteg határvonala elmosódik, keveredés, bonyolult, rendezetlenül kavargó áramlás lép föl (ez figyelhető meg a cső közepén). Az ilyen áramlást **gomolygó** vagy **turbulens áramlásnak** nevezzük. Miután fiziológiásan a szervezetben a réteges áramlások az uralkodóak, tárgyalásunk a továbbiakban erre az áramlási fajtára vonatkozik. Később, a III/1.4. szakaszban azonban röviden visszatérünk a kritikus sebesség meghatározására és a turbulens áramlás sajátosságaira.



III.1. ábra. Áramvonalak. Az áramvonal érintője egy adott pontban megmutatja az áramlási sebesség irányát, az áramvonalak sűrűsége pedig a sebesség nagyságát ($v_2 > v_1$)



III.2. ábra. Lamináris és turbulens áramlás. A cső szélén (kis áramlási sebességnél, a ritkán elhelyezkedő áramvonalak környezetében) lamináris, míg a cső belsejében (nagy áramlási sebességnél, a sűrűn elhelyezkedő áramvonalaknál) turbulens az áramlás

Az áramló folyadék jellemzésére az áramlási sebéségen kívül a **térfogati áramerősséget** (I_V) használjuk:

$$I_V = \frac{\Delta V}{\Delta t}, \quad (\text{III.1})$$

ahol ΔV a cső adott keresztmetszetén Δt idő alatt átáramló folyadék térfogata. SI-mértékegysége m^3/s , de orvosi gyakorlatban elterjedtebb a liter/perc ($1 \text{ m}^3/\text{s} = 60000 \text{ liter/perc}$).

A szervezetben a vér térfogati áramerősségének (illetve áramlási sebességének) meghatározására különböző módszereket használnak. A legfontosabbak a következők: dilúciós módszerek (például a termodilúció módszere), elektromágneses módszer, ultrahangos módszerek (például a Doppler-vizsgálat, lásd a VIII/4.2.8. részben), szöveti impedanciamérésen alapuló módszerek és a lézeres Doppler-vizsgálat. Egészséges felnőtt szervezetben, az aortában a térfogati áramerősség 6 liter/perc körül ingadozik. Ez az ún. perctérfogat (lásd *A vér térfogati áramerősségének, illetve áramlási sebességének meghatározására használt módszerek*).

A vér térfogati áramerősségének, illetve áramlási sebességének meghatározására használt módszerek

A **dilúciós módszerek** alapelve valamilyen detektálható indikátor befecskendezése a véráramba, majd a felhígult indikátor koncentrációjának detektálása az érpálya későbbi szakaszán.

Ha a Δt idő alatt beadott, ismert Δv mennyiségű indikátoranyag az ezen idő alatt érkező ismeretlen ΔV vértérfogatban teljesen elkeveredik, akkor koncentrációja $c = \Delta v/\Delta V$ lesz. Ezt megmérve következtethetünk a ΔV térfogatra, illetve a térfogati áramerősségre:

$$I_V = \frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{\Delta v}{c \cdot \Delta t}.$$

A **termodilúciós módszerben** hideg sóoldatot fecskendeznek be, tehát az „indikátor” az oldat „hidegsége”, ekkor a későbbi szakaszon a vér hőmérsékletét figyelik.

Ismert, hogy mágneses térben a (megfelelően) mozgó töltésekre erő hat (Lorentz-erő). (Ezzel magyarázható például az is, hogy a mozgó vezetôben feszültség indukálódik.) Az elektromágneses módszer is ezen a jelenségen alapul. **Mágneses teret** létesítenek az ér egy szakaszán. A vérben áramló (pozitív és negatív) ionok miatt az ér falának két átellenes pontja között **feszültség indukálódik**, ami két elektróda segítségével mérhető.

Az **impedancia-** (váltóáramú ellenállás) **mérésen alapuló módszerek** azt használják ki, hogy a vér vezetôképessége nagyobb, mint más szöveteké. Az impedanciakardiográfiában például a mellkasra helyezett elektródok segítségével a test ellenállását mérik. Ahogy a szív telítôdik vérrel, majd kiürül, úgy ingadozik a mért ellenállás is.

A lézeres Doppler-technika alapelve megegyezik az ultrahangoséval. Míg azonban az ultrahangos módszer nagyobb erek vizsgálatára alkalmas, a lézeres módszer a mikrocirkuláció vizsgálatának modern módszere.

1.1.1. III/1.1.1. Kontinuitási egyenlet

A térfogati áramerôsség és az áramlási sebesség egyszerû kapcsolatban vannak egymással. Ezt az összefüggést elôször ideális folyadéokra vizsgáljuk meg.

Ideális folyadék áramlásakor, vagyis **súrlódásmentesáramlás** esetén a csô valamely helyén a keresztmetszet minden pontjában azonos az áramlási sebesség, hiszen az egyes folyadékrétegek között (illetve a csô falán) nem lép föl súrlódási erô, így az nem idézhet elô sebességváltozást sem. A rétegek nem mozdulnak el egymáshoz viszonyítva, tehát együtt mozognak. Ekkor a térfogati áramerôsség és a keresztmetszetre jellemzô v sebesség között egyszerű összefüggést találunk. A III.3. ábrán jelölt A felületû keresztmetszeten Δt idô alatt a kék színû $\Delta s = v \cdot \Delta t$ „hosszúságú” folyadéktartomány jut át, így

$$I_V = \frac{\Delta V}{\Delta t} = \frac{A \cdot v \cdot \Delta t}{\Delta t} = A \cdot v. \quad (\text{III.2})$$

Reális folyadéknál (például a vér esetében) a súrlódást általában nem hanyagolhatjuk el. A folyadék rétegek közötti súrlódás miatt a rétegek sebessége nem lehet egyforma (errôl lásd késôbb a III/1.3 szakaszt). Egy adott keresztmetszeten tehát nem beszélhetünk egy sebességértékrôl, hanem csak egy átlagsebességrôl (v^-). Definiáljuk az adott keresztmetszetre vonatkozó átlagsebességet éppen úgy, hogy vele a (III.2) összefüggés reális folyadékokra is érvényes legyen:

$$I_V = A \cdot \bar{v}. \quad (\text{III.3})$$

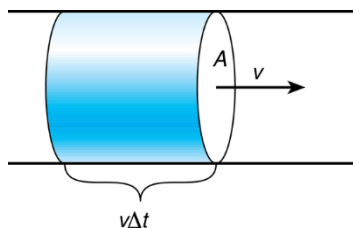
Merev csô esetén a térfogati áramerôsség a csô hossza mentén mindenütt ugyanakkora. A tömegmegmaradás törvénye és a csô merevsége ugyanis megköveteli, hogy ugyanannyi idô alatt minden keresztmetszeten ugyanakkora tömeg lépjen át. Ebbôl és a folyadék összenyomhatatlanságából az átáramló térfogatok azonossága is következik. Figyelembe véve még a (III.3) összefüggést:

$$I_V = A \cdot \bar{v} = \text{állandó}. \quad (\text{III.4})$$

Tehát az áramlási sebesség és a csô keresztmetszete fordított arányban állnak: a szûkebb keresztmetszetenél felgyorsul az áramlás és fordítva. Ez az ún. **kontinuitási egyenlet** egyik legegyszerûbb megfogalmazása. Rugalmas falú csôre is igaz a kontinuitási egyenlet, ha az áramlás idôben állandó (az áramlást jellemzô mennyiségek nem változnak). Ekkor ugyanis a csô keresztmetszete sem változik, még ha képes is lenne rá. Az idôben állandó áramlást **stacionárius áramlásnak** nevezzük.

Az erek fala nem merev és bennük az áramlás sem stacionárius (legalábbis a nagyobb erekben erôsen pulzál), mégis elég jól teljesül a kontinuitási egyenlet a vérkeringésre, és ennek következménye az, hogy a vér áramlási sebessége az aorta felôl a kapillárisok felé az összkérszmet (A₀) erôteljes növekedése miatt lényegesen csökken, majd a venae cavae felé ismét növekszik (lásd a III.1. táblázat utolsó két oszlopát).

Felmerülhet a kérdés, hogy egy szűkületben mi az áramlás felgyorsulásának „mechanizmusa”. Szemléletesen a következőt mondhatjuk: szűkület előtt feltorlódik a folyadék, megnő a nyomás, a megnövekedett nyomás által végzett munka gyorsítja fel a folyadékot. Ezt a munkatétellel lehet egyszerűen leírni, de csak akkor, ha nincs súrlódásos energiavesztés. Ezért a következő szakaszban ideális folyadékokkal foglalkozunk.



III.3. ábra. A térfogati áramerősség és az áramlási sebesség kapcsolata: $I_V = Av$

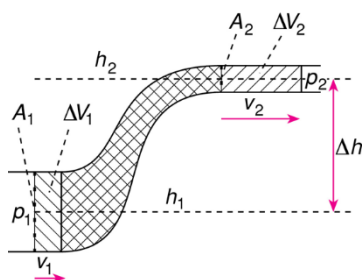
3.1. táblázat - III.1. táblázat. Az egyes értípusok adatai (a nagyvérkörben): átmérő, hossz, ágak száma, az ágak összkérettszete és a bennük folyó vér átlagos áramlási sebessége

érszakasz	átmérő (cm)	hossz (cm)	ágak száma	A $\bar{\sigma}$ (cm ²)	v (cm/s)
aorta	2,4	40	1	4,5	23
artériák	0,4	15	160	20	5
arteriolák	0,003	0,2	$5,7 \cdot 10^7$	400	0,25
kapillárisok	0,0007	0,07	$1,2 \cdot 10^{10}$	4500	0,022
venulák	0,002	0,2	$1,3 \cdot 10^9$	4000	0,025
vénák	0,5	15	200	40	2,5
venae cavae	3,4	40	2	18	6

1.2. III/1.2. Ideális folyadékok áramlása

Az ideális folyadék súrlódásmentesen áramlik, így nincs energiavesztés, tehát érvényes rá a mechanikai energia megmaradásának törvénye. Ezt használjuk ki a következőkben arra, hogy az ideális folyadékok áramlására vonatkozó (az uralkodó nyomásviszonyokat megadó) igen fontos összefüggéshez jussunk. Továbbra is feltételezzük még, hogy az áramlás lamináris, a folyadék összenyomhatatlan és a cső merev, vagy ez utóbbi helyett azt, hogy az áramlás stacionárius.

1.2.1. III/1.2.1. Bernoulli törvénye



III.4. ábra. A folyadékáramlás szemléltetése változó keresztmetszetű és különböző magasságban elhelyezkedő csőszakaszokban

Válasszunk ki egy folyadéktartományt a III.4. ábrán látható csőben (A_1 és A_2 keresztmetszetek közötti jobbra lejtősen vonalkázott tartomány), amely Δt idő alatt továbbáramlik és a másik irányban (balra lejtő) vonalkázott tartományt foglalja el. Legyen az A_1 keresztmetszetenél uralkodó nyomás p_1 , az A_2 -nél pedig p_2 . A kiválasztott tartományra („testre”) így a szomszédos folyadéktartományokból $F_1 = p_1 \cdot A_1$, illetve $F_2 = p_2 \cdot A_2$ erők hatnak. Ezen erők által Δt idő alatt végzett összes munka (figyelembe véve a két erő ellentétes irányát):

$$W = p_1 \cdot A_1 \cdot v_1 \cdot \Delta t - p_2 \cdot A_2 \cdot v_2 \cdot \Delta t.$$

ahol $v_1 \Delta t$, illetve $v_2 \Delta t$ a két elmozdulás. A „test” energiaváltozásának meghatározásakor csak az egyszeresen vonalkázott tartományokkal, azaz a $\Delta m_1 = \rho \Delta V_1$ és $\Delta m_2 = \rho \Delta V_2$ tömegű folyadékreszkekkel kell számolnunk (ρ a folyadék sűrűsége, ΔV_1 és ΔV_2 a megfelelő térfogatok), hiszen a kettősen vonalkázott rész közös, így a különbség képzéskor úgyis 0-t adna eredményül:

$$\Delta E_{\text{mozgási}} = \frac{1}{2} (\rho A_2 v_2 \Delta t) \cdot v_2^2 - \frac{1}{2} (\rho A_1 v_1 \Delta t) \cdot v_1^2,$$

$$\Delta E_{\text{helyzeti}} = (\rho A_2 v_2 \Delta t) \cdot g \cdot h_2 - (\rho A_1 v_1 \Delta t) \cdot g \cdot h_1.$$

Az energiamegmaradás miatt

$$W = \Delta E_{\text{mozgási}} + \Delta E_{\text{helyzeti}}.$$

Ebbe behelyettesíthetjük a fenti összefüggéseket és, mivel a szakasz elején megfogalmazott feltételek mellett igaz a (III.4) kontinuitási egyenlet ($A_1 v_1 = A_2 v_2$), ezért az $A_1 v_1 \Delta t (= \Delta V)$ tényezővel egyszerűsíthetjük:

$$p_1 - p_2 = \frac{1}{2} \rho \cdot v_2^2 - \frac{1}{2} \rho \cdot v_1^2 + \rho \cdot g \cdot h_2 - \rho \cdot g \cdot h_1.$$

Átrendezve

$$p_1 + \frac{1}{2} \rho \cdot v_1^2 + \rho \cdot g \cdot h_1 = p_2 + \frac{1}{2} \rho \cdot v_2^2 + \rho \cdot g \cdot h_2.$$

Mivel a keresztmetszeteket tetszőlegesen választottuk, így

$$p + \frac{1}{2} \rho \cdot v^2 + \rho \cdot g \cdot h = \text{állandó} \quad (\text{III.5})$$

mindenhol a cső mentén. Ez **Bernoulli törvénye**. Az egyenletben szereplő tagok a **statikus nyomás** (p), a **dinamikus nyomás** (vagy más néven **torló** nyomás, $(1/2)\rho v^2$), és a **hidrosztatikai nyomás** ($\rho g h$), összegük pedig a teljes nyomás. Vízszintes csőnél a harmadik tag nyilvánvalóan állandó, így ekkor a törvény jelentése: nagyobb sebességű helyeken kisebb a statikus nyomás.

Jóllehet a Bernoulli-törvény egzaktul csak ideális folyadékokra igaz, közelítésképpen reális folyadékokra és nem csak csövekben történő áramlásokra is alkalmazható. Számos gyakorlati következménye, illetve felhasználása közül csak néhányat említünk: nagy szél háztetőkre kifejtett szívóhatása, vízlégszivattyú, folyadékpermetező, repülőgép, vitorlás hajó stb. Emellett a törvénynek fontos élettani következményei is vannak (lásd *Plazmaleföldzés*).

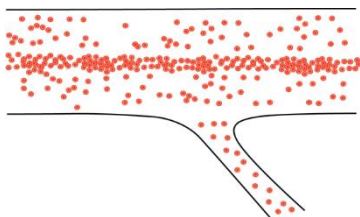
Ha vízszintes, állandó keresztmetszetű csőre alkalmazzuk a Bernoulli-törvényt, furcsa eredményt kapunk. Azonos magasság, azonos keresztmetszet, azonos sebesség esetén a cső két végén a nyomások is azonosak. Ha azonban nincs nyomáskülönbség, akkor mi hajtja az áramlást? – kérdezhetjük. Ne felejtjük el, a Bernoulli-

törvény egzaktul csak ideális folyadéokra igaz (lásd III.1, megjegyzés), ahol súrlódás híján az egyenletes áramlás fenttartásához nem szükséges erő (Newton I. törvénye)!



A svájci Daniel Bernoulli (1700–1782) egy személyben volt matematikus, fizikus és orvos. 32 éves korában az anatómia professzora a bázeli egyetemen, majd 1750-től fizika tanszéket kapott. Nevét főként hidrodinamikai és matematikai eredményei örökítették meg.

Plazmalefőlözés



Reális folyadékban, mint amilyen a vér, a cső közepén a legnagyobb az áramlási sebesség (lásd később a III/1.3 szakaszt), emiatt a Bernoulli-törvény értelmében ott a legkisebb a statikus nyomás. A nyomáskülönbség a vörösvértesteket a fal felől a cső közepe felé „hajtja” (a fő sodrásba „tereli”), emiatt a fal közelében kisebb lesz a vörösvértest-koncentráció. Így az ábrán látható szituációban a főágból a mellékágba hígabb (kevesebb vörösvértestet tartalmazó) vér áramlik.

III.1. megjegyzés. A világhírű magyar tudós, Neumann János (1903–1957) az ideális folyadékok leírásával foglalkozó elméleti szakembereket csak úgy emlegette, mint akik a „száraz vizet” tanulmányozzák, mivel a folyadékok egy lényeges tulajdonságát, a belső súrlódást figyelmen kívül hagyják. Az idealizálás természetesen nem mindig elítélendő, például a Bernoulli-törvény is lényegében jól írja le az áramló folyadékok (és gázok) egy fontos jelenségét, még ha a kiindulási feltételek szigorúan csak „száraz vízre” teljesülnek is.

1.3. III/1.3. Reális folyadékok lamináris áramlása

Valódi folyadékokban nem lehet elhanyagolni a súrlódást. A folyadék molekuláinak kölcsönhatása következtében az egymáson elmozduló folyadékrétegek között súrlódási erők lépnek föl. Vizsgáljuk meg, mitől függenek ezek az erők!

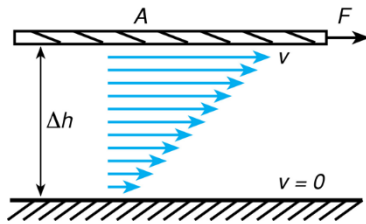
1.3.1. III/1.3.1. A Newton-féle súrlódási törvény

Vegyünk két párhuzamos síklemezt nagyon közel egymáshoz, közbül folyadékkal (III.5. ábra), és vizsgáljuk meg, mekkora F erővel lehet a felső, A felületű lemezt a rögzített alsón állandó v sebességgel elcsúsztatni. Mindkét lemezhez hozzátapad egy vékony folyadékréteg, amely a lemezzel együtt mozog, illetve áll. (Így a súrlódás folyadék-folyadék közötti, azaz belső súrlódás lesz!) Kis v sebességnél (azaz lamináris áramlás esetén) a lemezekkel párhuzamos folyadékrétegekben levő molekulák együtt mozognak, a rétegek mintegy elcsúsznak egymáson. Mivel a két lemez nagyon közel van egymáshoz (Δh nagyon kicsi), ezért feltehetjük, hogy ezen a kis távolságon az egyes rétegek sebessége 0-tól v -ig lineárisan változik, így a sebességesezés (azaz az áramlásra merőleges irányban az egységnyi hosszra eső sebességváltozás) $\Delta v/\Delta h$ állandó. Azonos az egyes

folyadék rétegek között ható súrlódási erő is, mégpedig egyenlő F -fel, hiszen stacionárius esetben (mivel nincs gyorsulás) az egyes folyadék rétegekre ható erők eredője nulla kell hogy legyen. (Ebből az következik, hogy az erő nem függhet közvetlenül a sebességtől, hiszen akkor ez nem teljesülhet.) Így a legegyszerűbb feltételezések mellett (a tapasztalatokkal is összhangban) a lemez mozgatásához szükséges erő (ami tehát megegyezik a folyadék rétegek között fellépő súrlódási erővel,) arányos a lemez felületével (A) és a sebességesés nagyságával ($\Delta v/\Delta h$):

$$F = \eta \cdot A \cdot \frac{\Delta v}{\Delta h} \quad (\text{III.6})$$

Ez a **Newton-féle súrlódási törvény**. Az η arányossági tényezőt belső súrlódási együtthatónak vagy **viszkozitásnak** nevezzük. Mértékegysége: Pa·s. Értéke a folyadékokra (illetve gázokra) jellemző adat. A III.2. táblázat néhány tipikus viszkozitás értéket mutat.



III.5. ábra. Belső súrlódás. Lamináris áramlás esetén, például két sík lemez között kialakuló, egymáson „csúszó” folyadék rétegek között lép fel

Azokat a folyadékokat, amelyekre a (III.6) összefüggés igaz, **newtoni folyadékoknak** nevezzük. Az egyszerű folyadékok, mint például a víz, vagy jó közelítéssel a vizelet ilyenek, de az összetettebb folyadékok, mint például a vér, jelentős eltérést mutathatnak. Ezeknél a súrlódási erő nem arányos a sebességeséssel, amit úgy is felfoghatunk, hogy viszkozitásuk nem állandó, hanem változik a sebességesés változásával. Ezeket a folyadékokat **nem newtoni folyadékoknak** nevezzük. A vérnek ezzel a tulajdonságával majd a III/1.3.3. szakaszban külön foglalkozunk, itt a továbbiakban csak a newtoni folyadékokról lesz szó.

Érdekes megemlíteni a viszkozitás és a hőmérséklet kapcsolatát. Mivel a belső súrlódás molekuláris mechanizmusa gázokban és folyadékokban különböző, a hőmérséklet hatása is eltér. A gázok viszkozitása növekszik, míg a folyadékoké csökken a hőmérséklet növekedtével (lásd még „Az áramló rétegek között fellépő súrlódási erő molekuláris magyarázata”).

3.2. táblázat - III.2. táblázat. Néhány anyag viszkozitása

anyag	η (mPa·s) 20 °C
levegő	(101 kPa) 0,019
víz	1
etanol	1,2
vér (37 °C)	2–8
glicerin	1490
méz	2000–14000

A viszkozitás korábbi mértékegysége a poise, (Poiseuille nevéből lásd III/1.3.3. rész) $1 \text{ Pa}\cdot\text{s} = 10 \text{ poise}$. A táblázatból is kiolvasható, hogy a 20 °C-os víz viszkozitása éppen 1 centipoise.

Az áramló rétegek között fellépő súrlódási erő molekuláris magyarázata

A gázok és a folyadékok szerkezete alapvetően különbözik, így a belső súrlódás mechanizmusa is más.

Gázokban nincs, vagy csak igen gyenge kölcsönhatás van a részecskék között, kivéve a pillanatszerű ütközéseket. Miért van mégis súrlódás két egymáson elcsúszó gázréteg között? Azért, mert a részecskék a kollektív, rendezett mozgáson kívül rendezetlen egyéni hőmozgást is végeznek. Ennek révén a részecskék átléphetnek egyik rétegből a másikba. A lassúbb rétegből érkező részecskék a gyorsabb réteg részecskéivel ütközve akadályozzák annak haladását. Ezen impulzus csere (impulzustranszport) az oka a belső súrlódásnak. Ezek alapján érthető az a tapasztalat, hogy a **gázok viszkozitása növekszik a hőmérséklet növekedésével**: magasabb hőmérsékleten fokozottabb a hőmozgás, ezért erősödik a rétegek közötti impulzustranszport is.

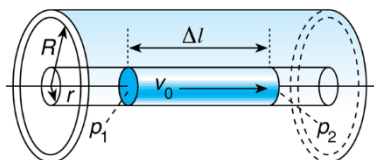
Folyadékokban a molekulák közelebb vannak egymáshoz, mint a gázokban (nincs bennük „szabad” hely) és kölcsönhatásuk révén kisebb tartományokban igen rendezett struktúrák jöhetnek létre (rövid távú rendezettség lásd I/3.4.1. rész). Éppen ennek a rendezettségnek a fokától függ a folyadékok viszkozitása. A folyadékrétegek egymáson való elcsúszását ugyanis a folyadék struktúrájában lévő (a kristályszerkezet hibáihoz hasonló, lásd I/3.3.5.) „hibák”, atomi méretű ritkulási helyek, „lyukak” teszik lehetővé (növelni kell a „szabad” helyeket). Minél nagyobb a „lyukak” koncentrációja, annál könnyebben csúsznak el egymáson a rétegek, és annál kisebb a viszkozitás. A „lyukak” relatív koncentrációja a Boltzmann-eloszlás segítségével adható meg ($\exp(-E/kT)$ lásd I/3.3.5. rész (I.24) összefüggés), így a folyadékok viszkozitása ennek reciprokával arányos:

$$\eta \sim e^{-\frac{E}{kT}}, \quad (\text{III}/1.3.1.\text{K})$$

ahol E az egy „lyuk” létrehozásához szükséges energia, (k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet). Végeredményben tehát a **folyadékok viszkozitása a hőmérséklet növekedésével csökken**, mégpedig általában igen erősen, víznél például η (4 °C) = 1,6 mPa·s, η (20 °C) = 1 mPa·s

1.3.2. III/1.3.2. Áramlás csövekben

Láthattuk, hogy ideális folyadékban a folyadékrétegek azonos sebességgel áramlanak (III/1.1.1.). Reális folyadékoknál két nagyon közeli **síklemmez között lineárisnak** tekinthető az ún. **sebességprofil** (a folyadék áramlási sebessége a lemeztől mért távolság függvényében, lásd III.5. ábra). Most azt fontoljuk meg, hogy milyen lehet a sebességprofil egy véges (de nem túl nagy) átmérőjű (hengerszimmetrikus) csőben.



III.6. ábra. A nem túl nagy átmérőjű hengersizmetrikus csőben kialakuló lamináris és stacionárius áramlás tanulmányozásához

Vegyünk egy R (belső) sugarú csövet (III.6. ábra), amelyben a fennálló nyomáskülönbség hatására η viszkozitású folyadék áramlik nem túl nagy sebességgel (laminárisan) balról jobbra (pozitív irány!). Azt tudjuk, hogy a cső falánál a sebesség nulla, hiszen ez a réteg a cső falához tapad, azt pedig (a hengersizmetria miatt) feltételezhetjük, hogy a cső tengelyében a legnagyobb az áramlás sebessége (v_0). Jelöljük ki képzeletben, a cső belsejében egy kis r sugarú, Δl hosszúságú folyadékhengert! Ennek véglapjain a nyomás p_1 illetve p_2 ($p_1 > p_2$). Az áramlást a nyomáskülönbség hajtja, a súrlódás fékezi. Stacionárius áramlás esetén a hengerre ható erők eredője nulla. A véglapokon ($r^2\pi$) ható Δp nyomáskülönbségből származó „tolóerő” tehát egyensúlyt tart a folyadékhenger palástján ($2r\pi\Delta l$) fellépő súrlódási erővel, amit az (III.6) összefüggés segítségével írhatunk fel:

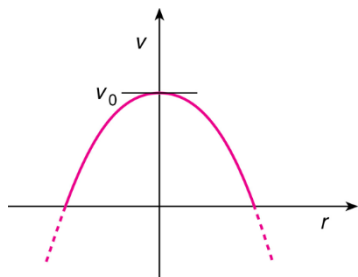
$$\Delta p \cdot r^2\pi = \eta \cdot 2r\pi\Delta l \frac{\Delta v}{\Delta r}.$$

ahol most $\Delta v/\Delta r$ a sebességésés. (Bár $\Delta p = p_2 - p_1$ negatív, de negatív Δv is a másik oldalon, hiszen növekvő r -rel v csökken.) Ebből:

$$\frac{\Delta v}{\Delta r} = \frac{\Delta p}{2\eta\Delta l} r = -Kr, \quad \text{ahol } K = \frac{\Delta p}{2\eta\Delta l}. \quad (\text{III.7})$$

A **keresett sebességprofil** $v(r)$ (azaz a folyadék áramlási sebessége a sugár függvényében) az egyenletből adódóan **parabolikus** (III.7. ábra):

$$v = v_0 - \frac{K}{2} r^2. \quad (\text{III.8})$$



III.7. ábra. Parabolikus sebességprofil. A valóságban a függvény értelmezési tartománya értelemszerűen: $-R \leq r \leq R$

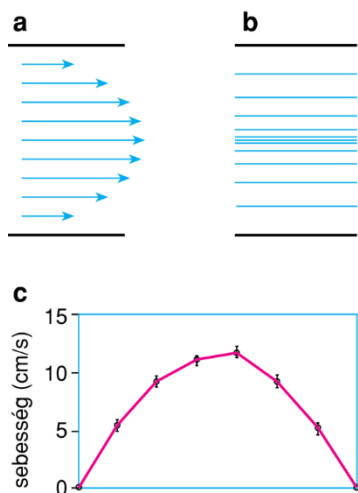
Ezt tovább alakíthatjuk annak figyelembe vételével, hogy a cső falánál, tehát $r = R$ esetén a sebesség 0, amiből azt kapjuk, hogy

$$v_0 = \frac{1}{2} KR^2. \quad (\text{III.9})$$

Ezt visszairhatjuk a (III.8) összefüggésbe és a K tényezőt is beírva a következő végeredményhez jutunk:

$$v_0 - \frac{1}{2} KR(R^2 - r^2) = - \frac{\Delta p}{4\eta\Delta l} (R^2 - r^2). \quad (\text{III.10})$$

Ennek többféle szemléltetése látható a III.8. ábrán.



III.8. ábra. A parabolikus sebességprofil különböző szemléltetése: a) sebességvektorokkal, b) áramvonalakkal, c) mérési eredmény (nyúlaortában, Doppler-effektus révén, a módszert lásd a VIII/4.2.8. részben)

A III.7. egyenlet megoldása

Hasonló egyenlettel találkozhattunk az egyenletesen változó mozgásoknál, például a függőleges hajításnál,

$$v = \frac{\Delta s}{\Delta t} = v_0 - gt.$$

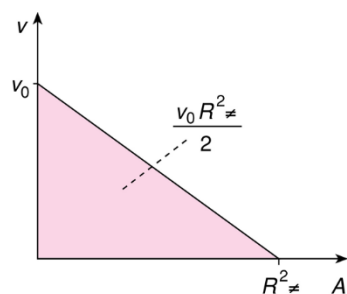
Ha $v_0 = 0$ (szabadesés), akkor $\Delta s/\Delta t = -gt$, ami matematikailag a (III.7) egyenlettel azonos. Azt is tudjuk, hogy a függőleges hajításnál az út általánosan az $s = v_0 t - \frac{K}{2} t^2$ összefüggéssel adható meg, de $v_0 = 0$ miatt $s = s_0 +$

$gt^2/2$. Ennek mintájára a (III.7) egyenletből a $v = v_0 - Kt$ eredmény adódik.

1.3.3. III/1.3.3. A Hagen–Poiseuille-törvény és alkalmazása a vérkeringésre

A következő és talán legfontosabb kérdés az, hogy **mekkor**a a fenti **csőben a térfogati áramerősség**? A (III.2) összefüggés alapján ($I_V = Av$) ezt könnyen kiszámíthatnánk, ha a keresztmetszetben a sebesség mindenütt egyforma lenne, de – mint az előbb láthattuk – nem az (lásd *A térfogati áramerősség meghatározása (nem túl nagy átmérőjű, hengersizmetrikus) csőben*).

A térfogati áramerősség meghatározása (nem túl nagy átmérőjű, hengersizmetrikus) csőben



A nehézséget az okozza, hogy az áramlás sebessége a (III.8) sebességprofilnak megfelelően változik, ezért az $I_V = Av$ összefüggés ebben az egyszerű formában nem alkalmazható. Hasonló problémával már találkoztunk a változó erő munkájának kiszámításakor, például egy rugó esetében. Megnyújtás közben az erő lineárisan nőtt, ezért a munkát nem lehetett egyszerűen az erő és a megnyúlás szorzataként megkapni. A megoldás az volt, hogy az erőt a megnyúlás függvényében ábrázoltuk és a görbe alatti terület szolgáltatta a keresett munkát. Lévéen a görbe egyenes, a terület egy háromszög területe, amit könnyen kiszámíthatunk. Ezzel analóg módon járhatunk el most is. Ábrázoljuk ugyanis az áramlási sebességet a sugár helyett a terület (A) függvényében. A (III.8)

összefüggésben ($A = r^2\pi$ alapján) r^2 -et helyettesítsük A/π -vel: $v = v_0 - \frac{K}{2\pi} A$.

Az ábrán ez a lineáris függvény látható. Az egyenes az $A = R^2\pi$ -nél (azaz a cső R sugarának megfelelő területértéknél) éri el a $v = 0$ értéket, a görbe alatti (rózsaszín) terület pedig megadja a térfogati áramerősséget:

$$I_V = \frac{v_0 \cdot R^2\pi}{2}$$

A fentiek szerint belátható, hogy ebben az esetben a térfogati áramerősség:

$$I_V = \frac{v_0 \cdot R^2\pi}{2} \quad \text{III.11)$$

Ha ezt az összefüggést összehasonlítjuk (III.3)-mal, arra az érdekes következtetésre juthatunk, hogy esetünkben az átlagsebesség a maximális érték fele:

$$\bar{v} = \frac{v_0}{2}$$

A (III.9) összefüggést és a K tényező jelentését is felhasználva kaphatjuk meg a végeredményt:

$$I_V = -\frac{\pi}{8\eta} R^4 \frac{\Delta p}{\Delta l} \quad \text{III.12)$$

Ez a **Hagen–Poiseuille-törvény**. Még egyszer hangsúlyozzuk: **a törvény egzaktul csaknewtoni folyadékok stacionárius és lamináris áramlására vonatkozik**. (A negatív előjel azt mutatja, hogy a folyadék az alacsonyabb nyomású hely felé áramlik.) **A térfogati áramerősség tehát egyenesen arányos a**

$\Delta p/\Delta l$ nyomással és a cső sugarának negyedik hatványával. Ez utóbbi igen erős függést jelent. Gondoljunk csak meg: ha a cső sugara a felére csökken, egyébként változatlan paraméterek mellett az áramerősség a tizenhatodára esik vissza!

A vér ugyan nem newtoni folyadék és a szívhez közeli erekben az áramlás sem stacionárius (távolabb már jó közelítéssel az), a Hagen–Poiseuille-törvény közelítésképpen mégis alkalmazható a vérkeringésre. Az erős R^4 -es függés azt jelenti, hogy a szervezet az erek átmérőjének finom változtatásával is nagyon hatékonyan tudja szabályozni az egyes szervek vérellátását. De azt is jelenti, hogy ha például érelmeszesedés miatt az erek átmérője csökken, akkor a szív csak sokkal nagyobb vérnyomás fenntartásával biztosíthatja (vagy csak biztosíthatná) a szervezet megfelelő vérellátását.

A (III.12) összefüggés a következő alakba is rendezhető:

$$-\Delta p = R_{\text{cső}} \cdot I_V, \quad (\text{III.13})$$

ahol

$$R_{\text{cső}} = 8\pi\eta \frac{\Delta l}{(r^2\pi)^2}. \quad (\text{III.14})$$

A (III.13) összefüggésből látszik, hogy a Hagen–Poiseuille-törvény az Ohm-törvénnyel ($U = R \cdot I$) analóg. A feszültségnek (vagyis potenciálkülönbségnek) a nyomáskülönbség, az elektromos áramerősségnek a térfogati áramerősség felel meg, az elektromos ellenállásnak pedig a (III.14) összefüggés által definiált sűrűdési ellenállás, más néven a cső ellenállása. Lényeges különbség az analógián belül, hogy az elektromos ellenállás a keresztmetszettel, míg a cső ellenállása a keresztmetszet négyzetével fordítottan arányos.

Nemcsak az Ohm-törvény megfelelője írható fel az áramlásokra, hanem a Kirchhoff-törvényeké is. Csövek elágazására is igaz például, hogy a főágban folyó áramerősség megegyezik a mellékágakban folyó áramerősségek összegével (kontinuitási egyenlet, Kirchhoff I. törvénye). Valamint a sorba, illetve párhuzamosan kapcsolt csövek ellenállását is hasonlóképpen kell összegezni, mint ahogyan az elektromos ellenállások eredőjét számoljuk:

$$R_{\text{cső (soros eredő)}} = \sum_i R_{\text{cső}(i)}, \quad (\text{III.15})$$

$$\frac{1}{R_{\text{cső (párhuzamos eredő)}}} = \sum_i \frac{1}{R_{\text{cső}(i)}}. \quad (\text{III.16})$$

Ezek az analógiák segítségünkre vannak abban, hogy például a nagyvérkör működését jobban megértsük (lásd A nagyvérkör működésének áttekintése a fenti törvényszerűségek alapján).



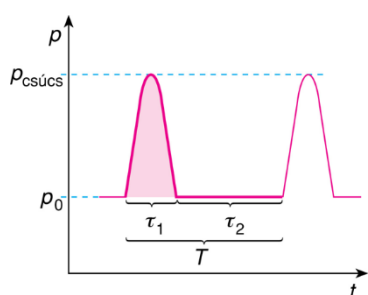
Gotthilf Heinrich Ludwig Hagen (1797–1884) német vízmérnök volt



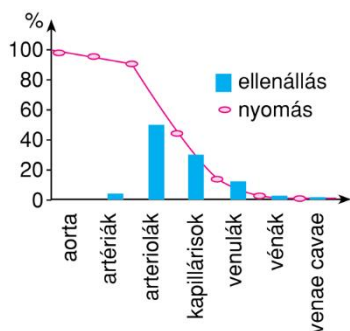
Jean-Louis-Marie Poiseuille (1799–1869; ejtsd: poázôj) francia orvos, fiziológus. Egymástól függetlenül, nagyjából egyidejűleg, tapasztalati úton jutottak a róluk elnevezett összefüggésre.

A nagyvérkör működésének áttekintése a fenti törvényszerűségek alapján

A nagyvérkör párhuzamosan látja el vérrel az egyes szerveket, az azokon eső nyomás ugyanakkora. A szervek között a teljes véráram a szervek ellenállásával fordított arányban oszlik meg. Ha valamelyik szerv fokozott vérellátást igényel, az ellátó erek keresztmetszete növekszik, ezzel erősen lecsökken az illető szerv véredényrendszerének ellenállása és megnő a rajta átfolyó véráram erőssége. Ha egyidejűleg több szerv vérellátását kell fokozni, akkor a szív a nyomás növelésével a teljes véráram erősségét megnöveli. A bal kamrában az összehúzódáskor a nyomás körülbelül 13–16 kPa-lal (100-120 Hgmm-rel) emelkedik a légköri nyomás fölé. A nyomásváltozás időbeli görbéje félszínusszal közelíthető. A maximális nyomás (csúcsnyomás) egy adott szív esetében közel állandó, de az átlagos nyomás nagyon függ a szünet időtartamától, így a szívfrekvencia változtatásával jól szabályozható (lásd 1. ábra). A nagyvérkör végén, a jobb pitvarba torkolló vénában közel légköri nyomás uralkodik. A nyomásesést a nagyvérkörben a bal kamrától a jobb pitvarig az III.1. táblázat adatai alapján az elektromos modell és a (III.13) összefüggés segítségével határozhatjuk meg. A (III.14) összefüggés alapján kiszámolhatjuk az egyes értípusok, az aorta, egy artéria, egy arteriola stb. ellenállását. Majd a párhuzamosan kapcsolt ellenállásokra vonatkozó reciprokos összegzési szabály (III.16) felhasználásával kiszámolhatjuk a párhuzamos artériák, a párhuzamos arteriolákét stb. eredő ellenállását. A nagyvérkörben ezek az ellenállások sorba vannak kapcsolva, rajtuk a teljes nyomásesés az ellenállások arányában oszlik meg.



1. ábra. Az átlagos nyomás $p = p_0 + \Delta p$, ahol $\Delta p = (\text{rózsaszín terület})/T$, a szívfrekvencia ($f = 1/T$) változtatásával jól szabályozható, hiszen $T = \tau_1 + \tau_2$, ami elsősorban a szünet időtartamától (τ_2 -től) függ, mivel τ_1 közel állandó.



2. ábra. Ellenállás és nyomásviszonyok a nagyvérkörben (%-ban kifejezve)

A 2. ábra mutatja az egyes értípusok eredő ellenállását és ezek alapján a nagyvérkörben a nyomás változását. Láthatjuk, hogy az arteriolákon a legnagyobb a nyomásesés, mert ezek összellenállása a legnagyobb. Ez első pillantásra meglepőnek tűnhet, hiszen az összkeresztmetszetük is igen nagy. A magyarázat a következő:

Egy ér ellenállása a (III.14) összefüggés szerint:

$$R_{cső} = 8\pi\eta \frac{\Delta l}{A^2}.$$

n párhuzamosan kapcsolt egyforma ér eredő ellenállására:

$$\frac{1}{R_{eredő}} = \frac{n}{R_{cső}}.$$

Ebből az eredő ellenállás:

$$R_{eredő} = 8\pi\eta \frac{\Delta l}{n \cdot A^2} = 8\pi\eta \frac{n \cdot \Delta l}{A_0^2},$$

ahol $A_0 = nA$ az erek összkeresztmetszete. Látjuk tehát, hogy ha n gyorsabban nő, mint az összkeresztmetszet négyzete, akkor az eredő ellenállás is nőni fog. Ez a helyzet az arterioláknál: míg összkeresztmetszetük például az aortáénak csak körülbelül 90-szerese, aminek négyzete is csak 8100, addig számuk körülbelül $6 \cdot 10^7$ az egy aortával szemben.

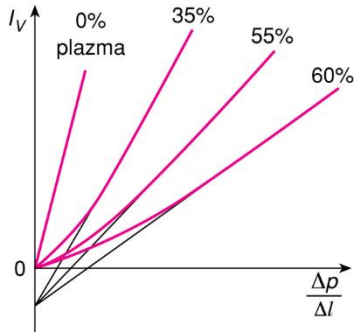
Mivel a nagyvérkör ellenállásának nagy részét az arteriolák adják, szerepük meghatározó a nagyvérköri teljes nyomás kialakításában. Ezért nem véletlen, hogy ezeknek az ereknek a fala viszonylag nagy arányban tartalmaz simaizmot, amelynek segítségével az érátmérő változtatható. Tartósan összehúzódtott állapotuk azonban magas vérnyomást eredményez.

A vérkeringés Hagen–Poiseuille-törvényen alapuló fenti leírása alapként fogadható el, amelytől azonban a valóságban vannak eltérések, mivel a vér nem newtoni folyadék és – főként a nagyartériákban – az áramlás nem stacionárius. Az alábbiakban ezekkel az eltérésekkel foglalkozunk (lásd *A vérkeringés néhány sajátossága*).

A vérkeringés néhány sajátossága

A Hagen–Poiseuille-törvény szerint a newtoni folyadékok esetében a térfogati áramerősség arányos a nyomáseséssel. Ha ezt grafikonon ábrázoljuk, akkor az origóból kiinduló egyenest kapunk, amelynek meredeksége fordítottan arányos a viszkozitással. Véréramlásnál az összefüggés a mérések szerint eltér az egyenestől (1. ábra), mégpedig annál inkább, minél nagyobb a vér hematokritértéke, azaz a vörösvértestek térfogataránya a teljes vérben. Az egyenestől való eltérés magyarázata a vér nem newtoni voltában rejlik, ami, úgy tűnik, a vörösvértestek jelenlétével függ össze. Vizsgáljuk meg ezért részletesebben a **vér viszkozitását!**

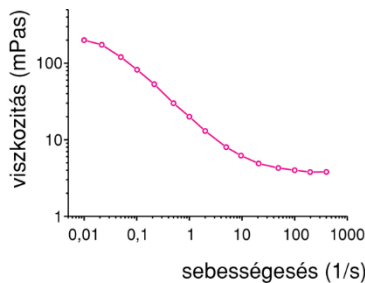
Normális **hematokritértéknél** (körülbelül 45%) a vér viszkozitása három-négyszerese a víz viszkozitásának. A normális fölé emelkedő hematokrit-értékeknél (policitémia) a viszkozitás erősen megnő, ami komoly megterhelést ró a szívre a normális véráram erősségének fenntartásában.



1. ábra. A Hagen–Poiseuille-törvény newtoni folyadékra (plazma), illetve különböző hematokrit-értékű (azaz különböző vörösvértestmennyiséget tartalmazó) vérré

A vér viszkozitása, mint minden folyadéké, növekszik a **hőmérséklet** csökkenésével (lásd (III/1.3.1.K) összefüggés). Ez szélsőséges körülmények között, a végtagok lehülésénél okoz bajt, mert még tovább csökkenti a végtagok rossz vérrellátását.

A vér viszkozitása mindezekén túl azonban még a **sebességesés** nagyságától is függ, tehát nem érvényes rá az (III.6) összefüggés szerinti arányosság a sűrűlási erő és a sebességesés ($\Delta v/\Delta h$) között (nem newtoni folyadék!). Egy kísérletben növeljük fokozatosan a vér áramlási sebességét (ezzel együtt tehát az áramerősséget is)! Erősebb áramlásnál nagyobbak lesznek a folyadékrétegek sebességkülönbségei, így a sebességesés is. Azt tapasztalhatjuk a kísérletben, hogy erősödő áramlásnál, tehát növekvő sebességesésnél először gyorsan, majd lassabban, de folyamatosan csökken a vér viszkozitása (2. ábra). Ennek magyarázata összetett. Nagyon lassú áramlásnál kicsik a rétegek közti sebességkülönbségek és a nyíróerők. Ez lehetőséget ad a vörösvértesteknek az összetapadásra, ami növeli a sűrűlást, a vér viszkozitását. Erősödő áramlásnál a növekvő nyíróerők megbontják a vörösvértest-aggregátumokat, ez vezet a kezdeti gyors viszkozitáscsökkenéshez. További csökkenést okoz a III/1.2.1. szakaszban már említett jelenség, a vörösvértestek besodródása a cső tengelyébe, ami annál erősebben jelentkezik, minél erősebb az áramlás, minél nagyobb a sebességkülönbség és ennek következtében a nyomáskülönbség a cső tengelye és szélé között.



2. ábra. A vér viszkozitása a sebességesés függvényében (37 °C, 45 % hematokrit)

Miért okoz ez a jelenség viszkozitáscsökkenést? A folyadékban fellépő belső sűrűlás ugyanis az (III.5) összefüggés alapján a cső szélén a legerősebb, hiszen a parabolikus sebességprofil miatt itt a legnagyobb a sebességesés. Ha ez a tartomány „kiürül”, akkor viszkozitása lecsökken, és ennek nagyobb csökkentő hatása van a teljes belső sűrűlásra, mint a cső tengelyében felgyülemelő vörösvértestek növelő hatásának. Végeredményben a vér effektív viszkozitása csökkenni fog. A kezdetben nagy, majd csökkenő viszkozitás magyarázza a 1. ábrán látható görbéket, illetve az eltérést a Hagen–Poiseuille-törvénytől. Megjegyezzük, hogy az előbb említett jelenség következménye még az is, hogy véráramlásnál a sebességprofil kissé eltér a parabolikustól, a cső falához közel meredekebb, középső részén laposabb. Ennek az eltérésnek fiziológias körülmények között nincs túl nagy jelentősége. A fiziológias tartomány ugyanis az 1. ábrán nagyjából a lineáris részt foglalja magában.

A vérkeringés egy másik pontban is eltér a Hagen–Poiseuille-törvény feltételrendszerétől: **a véráramlás nem mindenütt stacionárius**, ugyanis a szív nem folytonosan, hanem lüktetve pumpálja a vért az aortába. Emiatt kap jelentőséget az erek rugalmassága. Stacionárius áramlásnál ugyanis nincs különbség merev és rugalmas falú csövek között. A rugalmas falú cső ugyan az áramlás megindulásakor a nyomásnak engedve kitágul, de miután az áramlás időben állandóvá válik, nem változik tovább. A kapott összefüggések az állandósult csőadatokkal érvényesek. Pulzáló áramlásnál azonban a cső rugalmassága lényeges szerepet játszik.

Az aorta és az artériák fala rugalmas. Nyomásnövekedés alatt kitágulnak, így több vért tudnak fölvenni, a nyomásnövekedést viszont tompítják. A kitágult erek rugalmassági energia formájában tárolják azt a többletenergiát, ami egyébként merev csőnél elveszne. Nyomásminimumok idején ez az energia visszakerül az áramlásba: az erek összehúzódnak, fenntartva bizonyos nyomást és ezzel együtt áramlást is. Az erek rugalmasságának tehát a merev falú csővel szemben több előnyös következménye van:

- Csillapítják a szív által előidézett nyomásváltozásokat, az alacsonyabb értékű nyomásmaximum kevésbé terheli a keringési rendszert.
- Egyenletesebb az áramlás, az arteriolákban, kapillárisokban már közel állandó, így az anyagcsere is folytonos.
- A kisebb maximális sebesség csökkenti a kritikus sebesség (v_{krit}) átlépésének, így turbulencia kialakulásának kockázatát. (A következő szakaszban látni fogjuk, hogy a turbulenciák megnövelik a súrlódást, nehezítik a szív munkáját.)
- Összességében ugyanakkora szívmunkánál nagyobb a térfogati áramerősség, mint merev csőnél.

1.4. III/1.4. Turbulens áramlás

A III/1.1. szakaszban már említettük, hogy egy **bizonyos kritikus sebesség** (v_{krit}) **felett a lamináris áramlás turbulenssé válik**. A tapasztalatok szerint a kritikus sebesség a folyadék viszkozitásától (η), és sűrűségétől (ρ), valamint az áramlási cső sugarától (r) függ:

$$v_{krit} = Re \cdot \frac{\eta}{\rho r} \cdot \text{(III.17)}$$

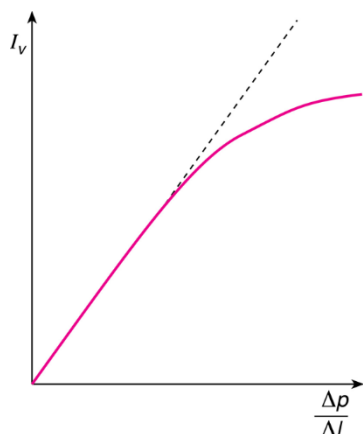
A dimenzió nélküli Re szám az ún. **Reynolds-szám**. Sima falú csöveknél $Re = 1160$, érdes csőfal esetén ennél kisebb érték.

A turbulenciák növelik a belső súrlódást, az áramlási cső ellenállását. Ha az áramlás laminárisból turbulensbe megy át, akkor a térfogati áramerősség–nyomáscsökkenés összefüggés a Hagen–Poiseuille-törvénytől a III.9. ábrán látható módon tér el.

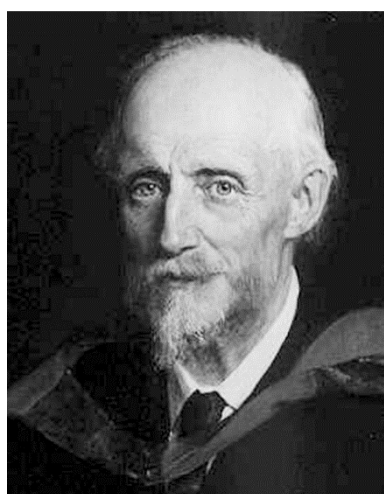
A turbulens áramlás zúgó hanggal jár, amit például az orvos a kar artériájának elszorításánál hallhat vérnyomásméréskor. Miért lépnek föl turbulenciák az ér leszűkítésénél, ha a (III.17) összefüggés szerint a kritikus sebesség a sugár csökkenésével fordított arányban növekszik? Azért, mert a kontinuitási egyenlet ((III.4) összefüggés) miatt a tényleges áramlási sebesség a keresztmetszettel, tehát a sugár négyzetével fordított arányban növekszik, tehát gyorsabban, mint a kritikus érték.

Az aortában ($r \approx 1,2$ cm) a véráramlás kritikus sebessége körülbelül 40 cm/s, a közepes áramlási sebesség (lásd III.1. táblázat) ennek alatta marad, ha nem is sokkal, így az aortabillentyűk mögötti turbulenciáktól eltekintve az áramlás alapvetően lamináris. Későbbi érszakaszokon az áramlás lassulása miatt ez még inkább így van. Egészséges emberben tehát a véráramlás laminárisnak vehető. Bizonyos kóros esetekben (érszűkület, a viszkozitás kóros csökkenése) azonban kisebb-nagyobb szakaszokon turbulens áramlás alakulhat ki, ami megterheli a szívet.

A levegő áramlása az orrjáratokban egészséges emberben ugyancsak lamináris. Kóros esetekben azonban az orr járatai annyira leszűkülhetnek, hogy egyes szakaszokon az áramlás turbulenssé válik. Ilyenkor a légzés nehezül.



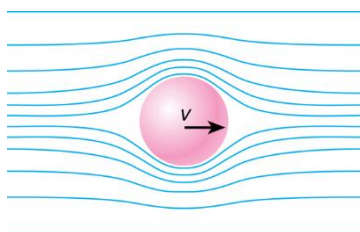
III.9. ábra. A Hagen–Poiseuille-törvénytől való eltérés turbulens áramlás esetén



Osborne Reynolds (1842–1912) angol mérnök, matematikus és fizikus. Tudós volt és mérnök, aki a fizika fundamentális kérdései mellett főként gyakorlati problémákkal foglalkozott. Így például pumpák és turbinák tervezésével, építésével, de tanulmányozta a hajóépítés, vagy a folyók hordalékszállításának kérdését is.

1.5. III/1.5. Gömb alakú test mozgása viszkózus közegben

A diffúzióval foglalkozó fejezetben szükségünk lesz arra, hogy mekkora súrlódási erő hat egy folyadékban mozgó testre. Csak egy egyszerű esetet, gömb alakú testet tárgyalunk. Nyugvó folyadékban mozgó test helyett vehetünk nyugvó testet, amely körül a folyadék v sebességgel áramlik. Lamináris áramlásnál a közeg a gömb előtt mintegy „kinyílik”, majd mögötte „összeshárul”. Közvetlenül a gömb előtt és mögött a folyadék sebessége nulla lesz (az áramvonalak sűrűsége 0, III.10. ábra).



III.10. ábra. Gömb mozgása viszkózus közegben

A Newton-féle súrlódási törvény ((III.6) összefüggés) alapján megbecsülhetjük a gömbre ható súrlódási erőt:

$$F_s = \eta \cdot A \cdot \frac{\Delta v}{\Delta h} \approx \eta \cdot 4r^2 \pi \cdot \frac{v}{r} = 4\pi\eta r v,$$

hiszen a gömb teljes felületén hat a súrlódás, és a sugárnyi (r) távolságon a sebességváltozás éppen $\Delta v = v - 0 = v$. Ez a becslés meglepően jól közelíti a „pontos” összefüggést:

$$F_s = 6\pi\eta rv. \quad (\text{III.18})$$

Ez a **Stokes-törvény**.



George Gabriel Stokes (1819– 1903) ír matematikus és fizikus. Nevével találkozhatunk még a VI/3.3.2. részben is, mert a hidrodinamika mellett eredményesen foglalkozott optikai jelenségekkel is. Tőle származik például a „fluoreszcencia” elnevezés is.

A (III.18) összefüggés a **gömbre ható súrlódási erőt adja meg**, de ha a gömböt egyenletesen akarjuk mozgatni a folyadékban, éppen ekkora erőt kell kifejtenünk a gömbre. Látható tehát, hogy ilyen esetekben a mozgató erő (F) és a test sebessége (v) arányosak egymással: $F \sim v$. Az arányossági tényezőt a következőképpen szokás bevezetni: $F = (1/u)v$. u az ún. **mozgékonyosság**, aminek számértéke az egységnyi mozgatóerő hatására elért sebességet adja meg.

$$u = \frac{v}{F}.$$

Gömb alakú testre a (III.18) összefüggés szerint:

$$u = \frac{1}{6\pi\eta r}. \quad (\text{III.19})$$

Végül még azt vizsgáljuk meg, hogy a viszkózus közegben mozgó gömb esetében mikor alakul ki turbulencia. A lamináris és turbulens áramlás között az a leglényegesebb különbség, hogy míg lamináris áramlásnál a közeg „kinyílik”, illetve „összezárul” a gömb előtt és mögött, addig turbulens áramlásnál a gömb maga előtt „tolja” a közeget. E második esetben a gömbre ható fékezô erô (F_t) a dinamikus (torló) nyomásból származik, aminek ellenerője ahhoz szükséges, hogy a feltorlódott közeget adott sebességre gyorsítsa (lásd (III.5) összefüggés):

$$F_t \approx \frac{1}{2} r^2 \pi \rho v^2, \quad (\text{III.20})$$

ahol $r^2\pi$ a gömbnek az áramlás irányára merőlegesen mutatott felülete. Megfigyelhető, hogy míg a Stokes-törvényben (III.18) szereplő F_s a sebességgel, addig F_t a sebesség négyzetével arányos (III.11. ábra). A gyakorlatban az a típusú áramlás „alakul ki” (jobban mondva az stabilizálódik), amelyik esetében nagyobb a súrlódási erô. Így kisebb sebességeknél a lamináris, nagyobbaknál pedig a turbulens áramlás lesz stabil a gömb körül. A váltás nagyjából annál a sebességnél következik be, ahol a két erô megegyezik egymással, tehát amikor

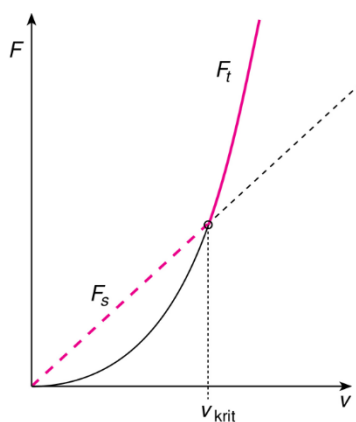
$$\frac{F_t}{F_s} = \frac{\frac{1}{2} r^2 \pi \rho v^2}{6\pi \eta r v} = \frac{r \rho v}{12\eta} \approx 1. \quad (\text{III.21})$$

Az ilyen feltétel mellett meghatározott sebesség lesz egyenlő a kritikus sebességgel. Ebből kifejezve v -t:

$$v_{\text{krit}} \approx \frac{12\eta}{\rho r}. \quad (\text{III.22})$$

Ha ezt összehasonlítjuk a (III.17) összefüggéssel, csak annyi a különbség, hogy a Reynolds-szám (Re) helyén itt 12 áll. Amennyiben összhangban akarunk maradni a korábban elmondottakkal, akkor ez csak azt jelentheti, hogy ilyen körülmények között Re értéke 12. Tehát ebben az esetben a kritikus sebesség körülbelül a századrésze annak, mint ami egy sima falú csőben

($Re = 1160$) turbulens áramlást eredményezne. Bár ez a következmény első látásra meglepőnek tűnik, ha arra gondolunk, hogy egy csőben mennyivel egyértelműbbek az áramlási feltételek, akkor mégsem kell csodálkoznunk rajta.



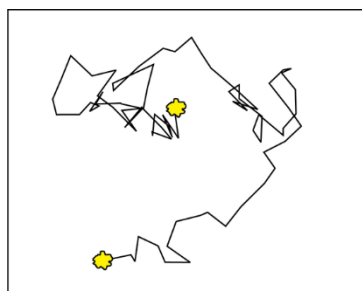
III.11. ábra. A kétféle „súrlódási” erő sebességtől való függése

2. III/2. A diffúzió

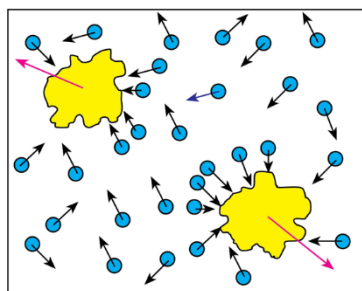
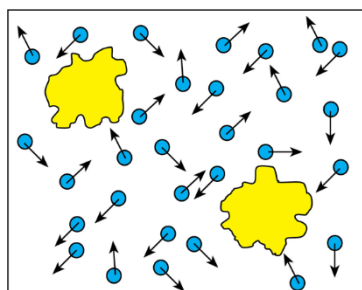
Ez a fejezet a mikroszkopikus anyagtranszport jelenségeivel foglalkozik, és két fő részre tagozódik. Először a rendezetlen hőmozgás és az azon alapuló diffúzió jellegzetességeit ismertetjük, majd a diffúzió azon speciális eseteit tekintjük át, amelyek a sejtek működésében, alapvető anyagcsere-folyamataiban is igen fontos szerepet játszanak. Az ozmózis biológiai, orvosi jelentőségét példákon keresztül külön kiemeljük.

2.1. III/2.1. A molekulák mozgása és a diffúzió

Bár a biológiai objektumokban található kis és nagy molekulák egy része, legalábbis időlegesen, struktúrákhoz kötött, többségük mégis állandó mozgásban van. Az emberi szervezet tömegének mintegy 55-60%-át víz alkotja, tehát ezek a mozgások legtöbbször vizes közegben (folyadék fázisban), esetenként a víznél nagyobb rendezettségű membránokban (lipid fázisban) zajlanak. Ez a fajta mozgás is – a gázrészecskék rendezetlen mozgásához hasonlóan – a hőmérséklettől függ (azaz hőmozgás), és rendezetlen, véletlen jellege a környező molekulákkal való állandó rendszertelen ütközések következménye. Ezt a molekuláris mozgást közvetlenül nem figyelhetjük meg, de közvetve igen. Pollenszuspenzió mikroszkópos vizsgálata során Robert Brown (1773–1858) skót botanikus figyelte meg először (1827-ben) a vízbe kevert virágporszemcsék szabálytalan, zezzugos mozgását. Ez a **Brown-mozgás** (III.12. ábra) a mikroszkópban láthatatlan molekulák szüntelen lökdösődő mozgásának látható következménye. Ennek a gondolatnak az elterjedésére a fizika XIX. századi történetében sokáig kellett várni (lásd III.1. idézet).



a



b

III.12. ábra. A Brown-mozgás szemléltetése és magyarázata. a) A virágporszemcse (pollen) zezugos mozgása, b) ami a molekulák szüntelen lökdösődő mozgásának (azaz a hőmozgásnak) következménye.

III.1. idézet. „A Brown által felfedezett meglepő jelenség nem keltett nagy érdeklődést. Sőt a fizikusok többsége sokáig elhanyagolta, és feltételezhető, hogy azok, akik hallottak róla, azt gondolták, hogy analóg azoknak a porrészecskének a mozgásával, amelyeket a napsugárban táncolni látunk a kis nyomás- és hőmérséklet-különbségek miatt fellépő enyhe légáramok hatására. Amikor emlékeztetünk arra, hogy ez a látszólagos magyarázat még mélyen gondolkozó elméket is kielégített, csodálattal kell adóznunk azon fizikusok éleslátása előtt, akik ebben a kis, mellékesnek tűnő jelenségben az anyag egyik alapvető tulajdonságát ismerték fel.”

(Jean Baptiste Perrin (1870–1942) Nobel-díjas fizikus)

2.1.1. III/2.1.1. A molekuláris mozgás jellemzői

A molekulák mozgásának leírása folyadék fázisban lényegesen bonyolultabb, mint gáz fázisban, mivel a folyadékokban a molekulák közötti kölcsönhatások jelentősebbek és lényegesen bonyolultabbak is, mint gázokban. Ezért a továbbiakban a diffúzió törvényeinek szemléletes bemutatását gázokra adjuk meg, de eredményeink az adott keretek között folyadékokra is érvényesek lesznek.

Használjuk az ideális gáz modelljét (lásd I/3.2.1.), mely szerint az azonos m tömegű részecskék rendszertelen mozgásuk során rugalmasan ütköznek egymással (illetve esetenként az „edény” falával). Emlékeztetünk arra, hogy termikus egyensúlyban egyetlen részecske átlagos kinetikus energiája ($\bar{\epsilon}_{\text{kin}}$) és az abszolút hőmérséklet (T) között szoros kapcsolat áll fenn ((I.34) összefüggés):

$$\bar{\epsilon}_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT, \quad (\text{III.23})$$

ahol v a részecske sebessége, k a Boltzmann-állandó és az átlagolást felülvonással jeleztük. A (III.23) összefüggésből meghatározhatjuk a **részecskék átlagos sebességét**:

$$v_{\text{átl}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (\text{III.24})$$

Két ütközés között eltelt átlagos időt jelöljük τ -val, a két ütközés között megtett átlagos utat, az ún. **átlagos szabad úthosszat** pedig l -lel. A két mennyiség közötti összefüggés:

$$l = v \cdot \tau, \quad (\text{III.25})$$

ahol az egyszerűség kedvéért a (III.24) összefüggésből adódó átlagos sebességet ($v_{\text{átl}}$ -ot) v -vel jelöltük. (Ezt a jelölést használjuk a továbbiakban is.)

Kapcsoljunk most be egy olyan **külső erőteret**, aminek hatására egyes részecskék véletlenszerű hõmozgásához még **egy kitüntetett irányú mozgás is hozzáadódik**. Legyen például a gázcseppkék egy része ionizált és a külsõ erõtér elektromos. Figyeljük meg az ionok mozgását. Egy kiszemelt ionra az elektromos tér F erõvel hat, így az a térnek megfelelő irányban gyorsulni kezd, sebességének ez a komponense megnõ. Rövid idõ múlva azonban az ion egy másik részecskével ütközik és új irányban, új nagyságú sebességgel kezd mozogni. A következõ ütközésig megint gyorsulni fog F irányában. Az ion tehát továbbra is „cickakk”-mozgást végez, de ehhez F irányában egy vándorlómozgás (drift) is hozzáadódik. Ennek a sodródó mozgásnak a sebessége, az ún. **driftsebesség** (v_{drift}), amit elemi úton kiszámolhatunk. Az ionok gyorsulása ugyanis (Newton II. törvénye alapján) F irányában F/m . Átlagosan τ ideig tart a gyorsulás, ezért az ilyen irányban szerzett átlagos sebesség:

$$v_{\text{drift}} = \frac{F}{m} \tau. \quad (\text{III.26})$$

A kitüntetett részecske (ion) mozgása más módon is jellemezhetõ. Felhasználhatjuk ugyanis a III/1.5. szakaszban bevezetett **mozgékonyosság** (u) definícióját (ami a mozgatóerõ hatására elért sebesség és az erõ hányadosa), jelen esetben:

$$u = \frac{v_{\text{drift}}}{F} = \frac{\tau}{m}. \quad (\text{III.27})$$

Mivel a (III.27) összefüggésben szereplõ paraméterek (τ és m) már nemcsak a kitüntetett részecskék (ionok) jellemzõi, ezért az így megadott mozgékonyosság általánosan minden részecske jellemzésére alkalmas.

2.1.2. III/2.1.2. A diffúzió jelensége, Fick I. törvénye

Bizonyára mindenkinek számos tapasztalata van arra vonatkozóan, hogy bizonyos anyagok a rendelkezésükre álló gáz- vagy folyadékterben elõbb-utóbb szétoszlanak. Jól érzékelhetõ ez például akkor, amikor kávékat cukorral édesítjük. Itt a kávéba tett cukor az oldódást követõen eloszlik a teljes térfogatban, amit például keveréssel felgyorsíthatunk. Az egyensúlyi (egyenletes) eloszlás kialakulásának folyamata is megfigyelhetõ, ha például a környezetével egyensúlyban lévõ pohár vízbe egy kevés tintát csõppentünk. A folt lassan szétterjed és megfesti az egész folyadékot. Más érzékszerveink is jelezhetik ezt a fajta jelenséget: például a vázába tett rózsaszín illata is elõbb-utóbb érezhetõ az egész helyiségben. Az említett esetekben mindig vannak, vagy lehetnek olyan makroszkopikus áramlások, amelyek a molekulák szétterjedését segítik, gyorsítják. Az éppen kifõtt forró kávéban ezek az áramlások valószínûleg erõsebbek, mint a nyugodt, egyensúlyban lévõ pohár vízben. A rózsaszín illat is másként terjed attól függõen, hogy nyitva van-e az ablak, vagy hogy van-e fûtés stb. Azonban ha ilyen áramlások nincsenek, a részecskék szétterjedése a véletlenszerû hõmozgás révén akkor is végbemegy, csak lassabban. Ezt a szétterjedési folyamatot nevezzük **diffúzió**nak, ami termikus egyensúly esetén mindaddig tart (addig észlelhetõ), amíg a részecskék eloszlása többé-kevésbé egyenletes nem lesz az egész térfogatban. A diffúzió rendkívüli jelentõséggel bír az élõ szervezetekben, például az anyagcsere-folyamatok egyes lépéseiben, a sejtek közötti és a sejtekben megvalósuló molekulamozgásokban.

A diffúzió jelensége és a Brown-mozgás között nincs lényegi különbség. A legtöbbször ugyanis a diffúzió kétkomponensûnek tekinthetõ rendszerekben zajlik: például az A-val jelölt komponens az, **ami diffundál**, a B-vel jelölt pedig az, **amiben** „A” diffundál. Így az elõbbi példánk szerint, illetve Brown eredeti megfigyelését alapul véve „A” jelentheti a cukrot, a tintát, a virágillatanyagot, valamint a virágport, „B” pedig a kávé, vizet, levegõt stb. (A „kétkomponensûnek tekinthetõ” kitétel arra vonatkozik, hogy „A” illetve „B” önmaga is lehet

összetett anyag, elég csak a levegőre gondolnunk.) **A diffúzió valójában mindkét komponensre nézve zajlik, de általában csak az egyik komponens jellemzőit tanulmányozzuk.** A diffúzió akkor is lejátszódik, ha „A” és „B” ugyanaz az anyag, de valamilyen módon meg tudjuk különböztetni őket. Ilyen értelemben beszélhetünk az ún. **öndiffúzióról**.

A diffúzió „erősségét” legszemléletesebben a **részecske-áramerősséggel** (I_N) jellemezhetjük. Ha az adott („A”) anyagból Δt idő alatt ΔN darab részecske vándorol át egy kijelölt A felületen keresztül, akkor ott

$$I_N = \frac{\Delta N}{\Delta t} \quad (\text{III.28})$$

a részecske-áramerősség, ami az egész A felületre jellemző mennyiség, mértékegysége 1/s (lásd még III.2. megjegyzés). Mérési szempontból kedvezőbb az **anyagáram-erősség** használata, amikor darabszám helyett mólokban fejezzük ki az anyagmennyiséget. Mivel $\Delta v = \Delta N/N_A$, ahol N_A az Avogadro-szám, ezért az anyagáram erőssége (I_v) ugyanazon az A felületen keresztül:

$$I_v = \frac{\Delta v}{\Delta t}, \quad (\text{III.29})$$

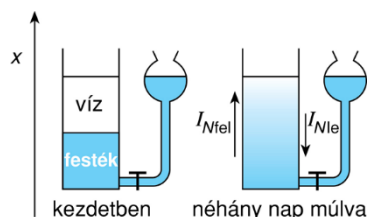
aminek mértékegysége mol/s. A továbbiakra való tekintettel célszerű bevezetni az A felület nagyságától független **anyagáram-sűrűséget** (J_v) is:

$$J_v = \frac{\Delta I_v}{\Delta A}, \quad (\text{III.30})$$

ami azt adja meg, hogy egységnyi idő alatt egységnyi felületen hány mólnyi („A”) anyag jut keresztül, mértékegysége mol/(m²·s).

A diffúzióval kapcsolatosan az egyik alapvető kérdés az, hogy mitől függ a diffúzió „erőssége”, azaz például az imént definiált anyagáram-sűrűség? Ezt a kérdést tanulmányozta Fick német fiziológus a III.13. ábrán bemutatott kísérlet segítségével.

Fick a kísérletben tapasztalt diffúziót az akkor már ismert Brown-mozgás alapján úgy értelmezte, hogy minden egyes vízben oldott festékmolekula mozgását a rendezetlen hőmozgás jellemzi, és az egyes molekulák egyforma valószínűséggel mozdulhatnak el a tér minden irányába. Ha ebből indulunk ki és x -szel jelöljük a vízstartály hossz tengelyébe eső irányt, akkor az x tengely mentén egy ($I_{N_{fel}}$ -lel jellemzett) felfelé mutató és egy ($I_{N_{le}}$ -vel jellemzett) lefelé mutató részecskeáram is kialakul. Tekintettel arra, hogy a festékmolekulák számossága a folyamat elején lényegesen nagyobb az edény alján, mint a tetején, emiatt $I_{N_{fel}} > I_{N_{le}}$, így eredőképpen egy $I_{N_{fel}} - I_{N_{le}}$, felfelé mutató részecskeáramot, illetve nettó anyagáramot tapasztalunk.



III.13. ábra. Fick kísérlete. Fick kék színű festékmolekulákat tartalmazó tömény oldatot helyezte el egy tartályba, amelyet csappal választott el egy másik tiszta vizet tartalmazó tartálytól. A csap megnyitásával a közvetlen keveredést elkerülve meghatározott mennyiségű festéket juttatott a vizet tartalmazó tartály aljába. Kezdetben a két oldat érintkezésénél éles határvonalat figyelt meg, majd a rendszert magára hagyva néhány nap múlva azt tapasztalta, hogy az éles határvonal elmosódik, a felső rész is megfestődik. Végül, néhány hét elteltével, a tartály tartalma egyenletesen kék színű lett.



Adolf Eugen Fick (1829–1901) német fiziológus az anatómia és fiziológia tanára volt több svájci, illetve német egyetemen. Orvos volt, de jól értett a matematikához is, az 1856-ban Braunschweigben megjelent „Medizinische Physik” című könyvének előszavában megfogalmazott véleménye ez ügyben érdekes lehet ma is. Fick érthetetlen kultúrtörténeti kuriózumnak mondja, hogy az orvosi pályára készülők előképzettségénél a fő súlyt a latin és a görög nyelvben való jártasságra fektetik, s nem a matematikára. Fick érdeklődése széles körű volt, megemlítjük még, hogy az első viselhető kontaktlencse az ő tervei nyomán készült 1887-ben. Kísérleteihez nyulakat használt, később az emberi szemén is kísérletezett, de az akkori technika fejletlensége miatt nem sikerült jelentős mértékben előrehaladnia.

III.2. megjegyzés. A (III.28) definíció felhasználásával egyszerűen megadható a tömeg-áramerősség (I_m), illetve töltött részecskék esetén az elektromos áramerősség (I_q) is: $I_m = mIN$, $I_q = qIN$, ahol m egyetlen részecske tömege, q pedig a töltése.

A fentiek alapján (lásd *Fick I. törvényének származtatása a Fick kísérlet egyszerűsített modellje alapján*) tehát megkaptuk, hogy mekkora az x irányú diffúziót jellemző anyagáram-sűrűség:

$$J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x} \quad (\text{III.31})$$

Ez **Fick I. törvénye**. A $\Delta c/\Delta x$ jelentése az egységnyi távolságra eső koncentrációváltozás vagy **koncentrációesés**. (Emlékeztetünk arra, hogy ennek meghatározásakor kihasználtuk azt a feltételezést, hogy a koncentráció a vizsgált hely környezetében lineárisan változik, ami általában csak rövid szakaszokra vonatkozóan érvényes.). A törvény legfontosabb mondanivalója az, hogy a diffúzió „erősségét” jellemző anyagáram-sűrűség a koncentrációeséssel arányos. A D arányossági tényező az ún. **diffúziós együttható**. Ennek szemléletes jelentése kiolvasható a (III.31) összefüggésből: D megadja az egységnyi idő alatt egységnyi felületen átdiffundált anyag mennyiségét, ha a koncentrációesés is egységnyi volt. Mértékegysége a

$$D = \frac{1}{3} v l \quad (\text{III.32})$$

definíciós összefüggésnek megfelelően: m^2/s .

Bár a kiindulásul szolgáló Fick-kísérlet egyszerűsített modelljében a diffundáló anyag gáz volt, a törvény folyadékokra is érvényes.

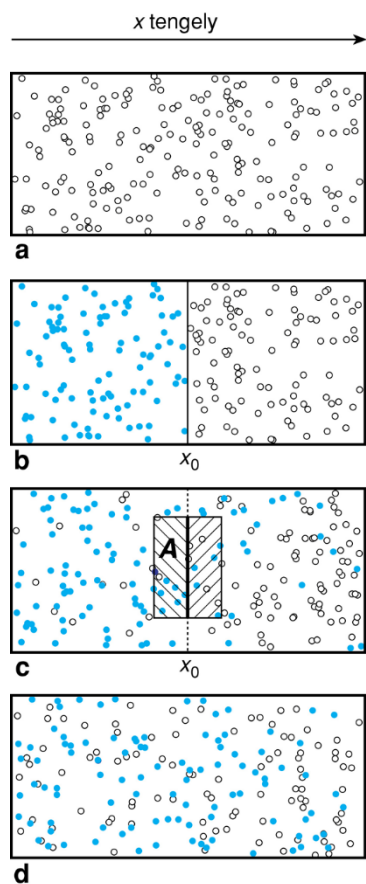
A Fick-kísérletből az is kiderül, hogy a diffúzió során a koncentráció nemcsak helyről helyre különbözik, hanem időben is változik (lásd a 2. ábrát a keretben). Fick I. törvénye azonban nem ad felvilágosítást a folyamat időbeli lefolyásáról. Ez a tény a törvény érvényességét nem, csak gyakorlati alkalmazhatóságát korlátozza.

Fick I. törvényét olyan esetekben alkalmazhatjuk hatékonyan a diffúzió jelenségének leírására és a diffúziós együttható meghatározására, amikor a $\Delta c/\Delta x$ koncentrációesés időben nem változik lényegesen, azaz a diffúzió kvázistacionárius. Ilyen helyzet élő rendszerekben hosszú távon viszonylag ritkábban fordul elő, ehhez például

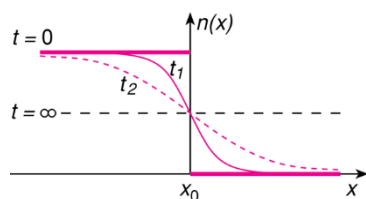
arra lenne szükség, hogy a nagyobb koncentrációjú oldalon „elfogyó” anyagot valami folyamatosan pótolja, és a kisebb koncentrációjú oldalon lévő anyagot valami „elfogyassza”. Ez néha azért megvalósulhat, például sejteken belüli diffúziónál, ahol a nagyobb koncentrációjú térből elfogyó anyagot enzimreakciók képesek pótolni. Ha az időtartamot viszonylag rövidre választjuk (például néhány percre), akkor ez a feltétel közelítőleg teljesülhet más esetekben is, mint például a tápanyagfelvételt és emésztést követően a vékonybél hámsejtjeinek membránjánál mutatkozó glükóz- vagy aminosav-koncentrációesések esetén (lásd facilitált diffúzió III/4.1.2. rész).

Fick I. törvényének származtatása a Fick-kísérlet egyszerűsített modellje alapján

A kvantitatív leírás kedvéért egy tovább egyszerűsített modellt használunk. Vegyünk egy egyenes hasáb alakú tartályt, benne m tömegű részecskékből álló termikus egyensúlyban lévő gázzal (1a. ábra). A tartályt a hossz tengelye (x) mentén, középen (x_0 -nál) osszuk ketté egy válaszfalal, majd a bal oldali részben lévő részecskéket jelöljük meg (például kék színnel, 1b. ábra). A Fick- kísérlet analógiájára építve a start pillanatában távolítsuk el a válaszfalat és próbáljuk meghatározni, hogy hogyan változhat a kék színű részecskék sűrűsége n (azaz az egységnyi térfogatban található kék részecskék száma) az x tengely mentén az idő (t) függvényében. A várható kiegyenlítődési folyamat két további pillanatképet tüntettük fel az 1c és az 1d. ábrán. A 2. ábra a modellkísérlet eredményét mutatja be, nevezetesen azt, hogy az $n(x)$ függvény hogyan változik az időben a kezdeti ($t = 0$) kettéosztott állapottól az „új” egyensúly beálltáig ($t = \infty$).



1. ábra. A Fick-kísérlet egyszerűsített modellje



2. ábra. Az 1. ábrán látható modellkísérlet eredményének grafikus ábrázolása. A kék színű részecskék sűrűsége ($n(x)$) változása az x tengely mentén az idő függvényében ($t_1 < t_2$).

Ezek után visszatérhetünk eredeti problémánkhoz, nevezetesen ahhoz, hogy mitől függ a diffúzió „erőssége”, azaz mekkora lesz a kék színű részecskék anyagáram-sűrűsége (J_v). Kézenfekvő feltételezés, hogy a kiegyenlítődési folyamat elején nagyobb, azután egyre kisebb lesz, így válaszunk mindig csak egy adott időpontra vonatkozhat. Képzeljük el egy A felületet az x tengelyre merőlegesen az x_0 helyen, és vegyünk egy olyan rövid Δt időszakaszt, hogy ennyi idő alatt $n(x)$ még változatlanak tekinthető legyen. Határozzuk meg, hogy hány részecske lép át az A felületen ezen idő alatt balról jobbra (ΔN_{bal}), illetve jobbról balra (ΔN_{jobb}). A kettő különbsége lesz a nettó részecskeáramlás: $\Delta N = \Delta N_{\text{bal}} - \Delta N_{\text{jobb}}$. Csak azok a (balra, illetve jobbra tartó) részecskék fognak az adott idő alatt átlépni a „fal”, amelyek elég közel vannak hozzá. Pontosabban közelebb, mint $v \cdot \Delta t$ (v itt is a részecskék átlagos sebességét jelöli), hiszen maximálisan ekkora utat tudnak megtenni a részecskék Δt idő alatt. Tehát azok a részecskék juthatnak át az A felületen, amelyek a felület két oldalán a $v \cdot \Delta t$ térfogatú vonalkázott térrészekben találhatóak (lásd 1c. ábra).

A „faltól” balra elhelyezkedő részecskékre, ha ebben a térrészben a részecskesűrűség n_{bal} , akkor ezek száma: $n_{\text{bal}} \cdot v \cdot \Delta t \cdot A$. Feltételezhetjük azonban, hogy a részecskék a tér különböző irányokban egyforma valószínűséggel mozognak, és csak egy részük indul éppen a fal felé. Itt egy egyszerű becsléssel élhetünk, és azt mondjuk, hogy a háromdimenziós térben ($\pm x, \pm y, \pm z$) a részecskék egyhatoda fog jobbra indulni. Hasonlóképpen írhatjuk fel a jobbról balra igyekvő részecskék számát is (itt a megfelelő térrészben a részecskesűrűség n_{jobb}), így a nettó érték:

$$\Delta N = \Delta N_{\text{bal}} - \Delta N_{\text{jobb}} = \frac{1}{6} n_{\text{bal}} \cdot v \cdot \Delta t \cdot A - \frac{1}{6} n_{\text{jobb}} \cdot v \cdot \Delta t \cdot A = \frac{1}{6} v \cdot \Delta t \cdot A (n_{\text{bal}} - n_{\text{jobb}}) \quad (1)$$

A kérdés már csak az, hogy a fenti kifejezés zárójeles tagját, azaz a megfelelő részecskesűrűség különbséget hogyan adhatjuk meg ennél pontosabban. A 2. ábra tanúsága szerint $n(x)$ függvény az x_0 hely környékén lineárisan változik (elég rövid szakaszon a lineáris közelítés helyénvaló). Az egyenes rész meredeksége $\Delta n / \Delta x$, aminek segítségével a fenti különbség egyszerűen megadható, amennyiben azt is tudjuk, hogy x_0 -tól (szimmetrikusan) milyen távolságra indultak el a részecskék közvetlenül a felületen való áthaladásuk előtt. Ez a távolság nem más, mint l , azaz az átlagos szabad úthossz, ezt szemlélteti a 3. ábra. Látható, hogy $n_{\text{bal}} - n_{\text{jobb}} = 2l \cdot \text{tg}\alpha$. Az iránytangens definícióját felhasználva:

$$n_{\text{bal}} - n_{\text{jobb}} = -2l \frac{\Delta n}{\Delta x} \quad (2)$$

A negatív előjelre azért van szükség, mert a meredekség negatív, viszont az egyenlet bal oldalán álló különbség pozitív. A (2) összefüggést a (1)-be beírva és Δt -vel átosztva:

$$I_N = \frac{\Delta N}{\Delta t} = \frac{1}{6} v \cdot A \cdot \left(-2l \frac{\Delta n}{\Delta x} \right) = -\frac{1}{3} v l \cdot A \frac{\Delta n}{\Delta x} \cdot$$

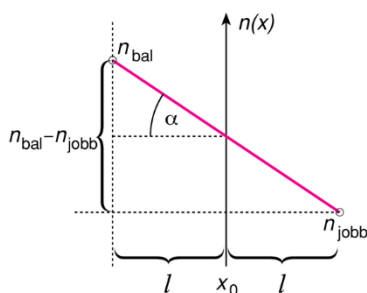
Ha elosztjuk az egyenlet mindkét oldalát az Avogadro-számmal, akkor a bal oldalon a nettó részecskeáram-erősség (I_N) helyett az anyagáram-erősséget (I_v) kapjuk, míg jobb oldalon a részecskesűrűség (n) helyett a koncentrációt (c):

$$I_v = -\frac{1}{3} v l \cdot A \frac{\Delta c}{\Delta x}$$

Vezessük be a $D = \frac{1}{3} v l$ (3)

jelölést és osszuk el az egyenlet mindkét oldalát A -val is. Így a keresett anyagáram sűrűség az x_0 helyen:

$$\frac{I_v}{A} = J_v = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x} \cdot$$



3. ábra. A lineáris függvény megváltozásának meghatározásához

2.1.3. III/2.1.3. A diffúziós együttható további jellemzői

A diffúziós együtthatóról még többet tudunk meg, ha a (III.32) definiáló képletet több lépésben átalakítjuk a következőképpen. Először behelyettesítjük az átlagos szabad úthosszra vonatkozó (III.25) összefüggést, majd az így kapott kifejezést szorozzuk és osztjuk is a részecskék tömegével, m -el. Ezután felhasználjuk a (III.23), valamint a (III.27) összefüggéseket:

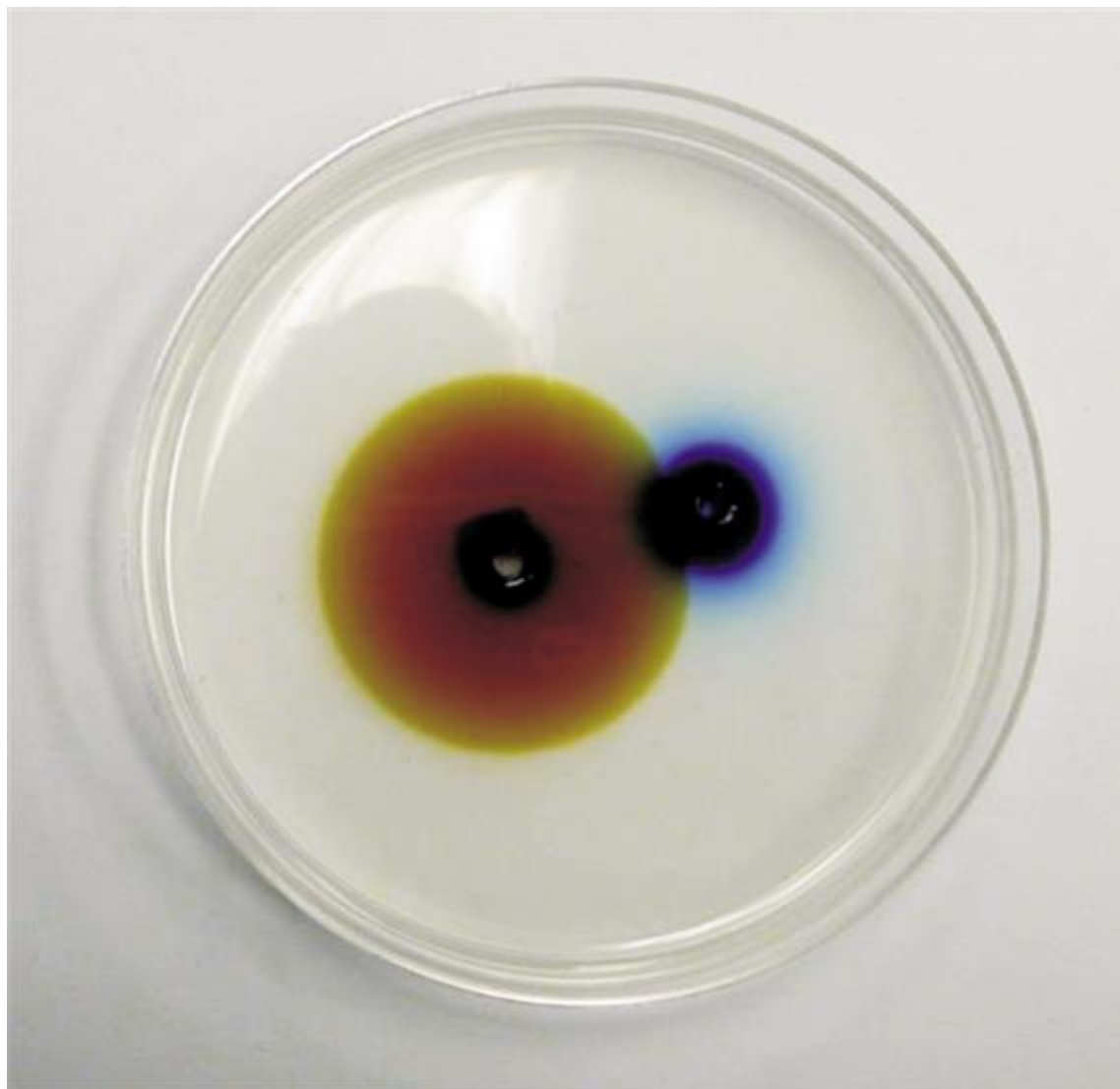
$$D = \frac{1}{3} \nu l = \frac{1}{3} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \cdot \tau = \frac{1}{3} m \nu^2 \frac{\tau}{m} = \frac{1}{3} 3kT \cdot u = ukT.$$

(III.33)

Láthatjuk, hogy a diffúziós együttható és azon keresztül a diffúzió „erőssége” több tényezőtől függ. Elsősorban a hőmérséklettől, ami, tekintve hogy a diffúzió a molekulák hőmozgása révén zajlik, nagyon is érthető. Függ még a molekula mozgékonyaságától, ami, érezzük, bizonyára jellemző a molekulára, és a közegre, amiben a molekula mozog. Ezt, legalábbis viszkózus folyadékban diffundáló gömb alakú részecskékre, pontosabban is meg tudjuk fogalmazni a korábbi III/1.5. szakaszban megismertek szerint, ahol a részecske mozgékonyaságát megadtuk. Az ott nyert (III.19) összefüggést felhasználva:

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}. \quad (\text{III.34})$$

Ez a diffúziós együtthatóra vonatkozó **Einstein–Stokes-féle összefüggés** (lásd III.14. ábra). Gömb alakú nagyobb részecskékre érvényes, de becslésként a gömbtől eltérő alakú és kisebb részecskékre, molekulákra is alkalmazhatjuk. Az összefüggés szerint a hőmérsékleten kívül a részecske mérete és a közeg viszkozitása befolyásolja még D értékét. Megjegyezzük, hogy a (III.33) vagy (III.34) összefüggésekből első ránézésre azt hihetnénk, hogy D és T között egyenes arányosság áll fenn. Ez nem így van, ugyanis a (III.33)-ben u , illetve a (III.34)-ben η is függ a hőmérséklettől. A diffúziós együtthatót befolyásoló tényezők összefoglaló áttekintésére szolgál az III.3. táblázat, amely különböző anyagok azonos hőmérsékleten (20 °C) meghatározott diffúziós együtthatóit mutatja be, esetenként különböző közegekben.



III.14. ábra. Az „erősebb” (barna) és a „gyengébb” (kék) diffúziót a nagyobb, illetve kisebb diffúziós együttható, azaz gömb alakú részecskék feltételezése mellett (azonos hőmérsékleten és azonos közegben) a kisebb, illetve nagyobb részecskesugár eredményezi

3.3. táblázat - III.3. táblázat. Néhány anyag diffúziós együtthatója 20 °C-on.

diffundáló részecske (mol. tömeg)	közeg	D (m ² /s)
H ₂ (2)	levegő	6,4·10 ⁻⁵
O ₂ (32)	levegő	2·10 ⁻⁵
CO ₂ (44)	levegő	1,8·10 ⁻⁵
H ₂ O (18)	víz	2,2·10 ⁻⁹
O ₂ (32)	víz	1,9·10 ⁻⁹
glicin (75)	víz	0,9·10 ⁻⁹
szérum albumin (69 000)	víz	6·10 ⁻¹¹

tropomiozin (93 000)	víz	$2,2 \cdot 10^{-11}$
dohánymozaik-vírus (40 000 000)	víz	$4,6 \cdot 10^{-12}$

A táblázat adataiból jól látható a (III.34) összefüggés érvényesülése: a diffúziós együttható jelentősen csökken a molekulatömeg (méret), illetve a közeg viszkozitásának növekedésével. A molekulák alakja is befolyásolja a diffúzió sebességét, amit az tükröz, hogy a közel gömb alakú szérumalbumin-fehérje diffúziója körülbelül háromszor gyorsabb, mint a hozzá méretben közel álló, de megnyúlt, szál alakú (fibrilláris) tropomiozin fehérjéé (feltehetően az utóbbi nagyobb közegellenállása miatt). (Lásd még *A diffúziós együttható mérése.*)

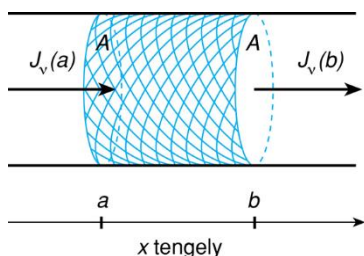
A diffúziós együttható mérése

A diffúziós együttható mérésére elvben minden olyan fizikai mérés technika alkalmas, amellyel egy adott tér jól definiált helyén a kérdéses anyag koncentrációjának időfüggése nyomon követhető. Ilyen célra használhatjuk például a dinamikus fényszórás mérést (lásd a X/1.3.2. részt). Színes anyagok esetén a fényelnyelés, illetve emisszió mérést alkalmazhatjuk a pillanatnyi koncentráció detektálására, míg töltéssel rendelkező ionok vagy molekulák esetén az elektromosvezetőképesség-mérés módszerét is használhatjuk e célra. Ha a diffúziós együtthatót valamely közegben (oldószerben) oldott molekulák esetén a diffúzió kinetikájának követésével határozzuk meg, tekintettel kell lenni arra a tényre, hogy a diffúzió sebessége bizonyos anyagoknál és koncentrációtartományban koncentrációfüggést mutathat (azonos koncentrációesés esetén is!). Ez abból adódik, hogy egyes molekulák töményebb oldataiban az oldott molekulák között kölcsönhatások léphetnek fel, aminek következtében kisebb-nagyobb aggregátumok (például dimerek, oligomerek stb.) jelennek meg. Mint ahogy a gázok rendezetlen hőmozgásánál is láttuk, a mozgási sebesség a molekulatömeg négyzetgyökével fordítottan arányos, így a fenti molekuláris kölcsönhatások is befolyásolhatják a diffúzió sebességét. Ezért a diffúziós együttható meghatározásakor célszerű azt több különböző kiindulási koncentrációnál megmérni és a 0 koncentrációra (a „végtelen híg oldatra”) extrapolált értéket megadni, amely így az egyedi molekulák diffúziós tulajdonságait fogja jellemezni. A III.3. táblázat ilyen értékeket tartalmaz.

2.1.4. III/2.1.4. Fick II. törvénye

Az előző részben a diffúzió legegyszerűbb esetét vizsgáltuk, és a koncentrációnak csak az x tengely menti **térbeli változását** vettük figyelembe. Legtöbbször azonban a diffúziós folyamat leírásához **a koncentrációidőtől való függését** is pontosan kellene ismernünk, méghozzá mindhárom dimenzióra vonatkozóan. Erre példa az orvosi gyakorlatban, amikor fájdalomcsillapító vagy egyéb gyógyszerinjekciók célzott bejuttatása történik egy viszonylag kis térfogatba (fogínybe, izomba stb.), amit a bejuttatott gyógyszermolekulák háromdimenziós diffúziója, térbeli szétoszlása, azaz a célsejtekhez való eljutása követ. Ilyen esetekben gyakorlati szempontból fontos tudni, hogy ez a diffúzió körülbelül mennyi időt vesz igénybe a koncentráció állandó változása mellett. Egy másik orvosi példát említve, az anyagcsere-folyamatok sebességének meghatározása szempontjából is fontos kérdés az, hogy milyen gyorsan megy végbe a diffúzió.

Fick II. törvénye a diffúzió folyamatának időbeliségéről is számot ad, tehát **a koncentráció térbeli-időbeli változását írja le**. Az összefüggést viszonylag egyszerűen megkaphatjuk Fick I. törvényéből, ha előbb általánosítjuk a III/1.1.1. részben már szereplő kontinuitási egyenletet. (Az egyszerűség kedvéért továbbra is csak egy dimenzióban vizsgálódunk.)



III.15. ábra. Szemléltetés a kontinuitási egyenlet általánosításához

A kontinuitási egyenlet egyik legegyszerűbb megfogalmazása az volt, hogy merev cső esetén a térfogati áramerősség a cső hossza mentén mindenütt ugyanakkora: $Iv = \text{konst.}$ Mivel az összenyomhatatlan folyadékokra ez a törvény úgyis a tömegmegmaradás, illetve az anyagmennyiség-megmaradás következménye, fogalmazzuk

meg a törvényt az anyagáram-erősség (I_v), illetve az anyagáram-sűrűség (J_v) segítségével! Az egyszerűség kedvéért maradjunk a mindenütt A keresztmetszetű merev cső példájánál (III.15. ábra):

$$I_v = J_v A = \text{konst.}, \quad \text{vagy} \quad J_v(a)A = J_v(b)A, \quad (\text{III.35})$$

ami azt fejezi ki, hogy az a helyen az A felületen időegység alatt beáramlott anyagmennyiség ugyanannyi, mint a b helyen kiáramlott. Ezt úgy is felírhatjuk, hogy

$$J_v(a)A - J_v(b)A = 0, \quad (\text{III.36})$$

tehát az a és b közötti hengertérfogatba nettó anyagbeáramlás, illetve kiáramlás nem történt. Most azonban olyan eseteket is tárgyalni szeretnénk, ahol ez a feltétel nem teljesül, hiszen éppen a koncentráció időbeli változását akarjuk leírni. Ha például nettó anyagbeáramlás történik az a és b közötti tartományba, akkor a beáramlott anyagnak meg kell jelennie az adott térfogaton belül, így ott az anyag koncentrációja (c) a nettó beáramlás ideje alatt növekedni fog. Ezt kell valahogy kifejezésre juttatnunk egyenletünkben is.

Legyen $a = x$ és $b = x + \Delta x$ nagyon közel egymáshoz. Ez a választás két okból is célszerű. Egyrészt az így létrejövő kis térfogaton belül ($\Delta V = A\Delta x$) a koncentráció a helytől már függetlennek tekinthető, tehát csak az időtől való függést kell figyelembe vennünk. Másrészt a henger palástja igen kis felületű A -hoz képest, így amennyiben a csövet képzeletben el is távolítanánk, és térfogatelemünket a csőtől elvonatkoztatva képzeljük el, a paláston keresztüli anyagáramlás a kis felület miatt akkor is elhanyagolható lenne. (Amit eddig a csőfal automatikusan biztosított számunkra, azt most az igen kis felületű palásttal érzük el.)

Igen rövid Δt idő alatt a ΔV térfogatba beáramlott anyagmennyiség kétféleképpen is felírható (és ezek természetesen egyenlők egymással):

$$\left[J_v(x)A - J_v(x + \Delta x)A \right] \Delta t = \left[c(t + \Delta t) - c(t) \right] A \Delta x. \quad (\text{III.37})$$

Felhasználva hogy

$$\left[J_v(x) - J_v(x + \Delta x) \right] = -\Delta J_v, \quad \text{valamint} \quad \left[c(t + \Delta t) - c(t) \right] = \Delta c$$

átrendezés után a következő egyenlethez jutunk:

$$-\frac{\Delta J_v}{\Delta x} = \frac{\Delta c}{\Delta t}. \quad (\text{III.38})$$

Ez az **általánosított kontinuitási egyenlet**. Helyettesítsük ezután a (III.31) összefüggést (Fick I. törvényét) a (III.38) egyenletbe (J_v helyére):

$$D \frac{\Delta \left(\frac{\Delta c}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = \frac{\Delta c}{\Delta t}. \quad (\text{III.39})$$

Ez **Fick II. törvénye**. Első ránézésre is látható, hogy ez meglehetősen bonyolult egyenlet (lásd III.3 megjegyzés). (Különösen ha még azt is tekintetbe vesszük, hogy egy általános probléma megoldásakor mind a három dimenziót (x, y, z) figyelembe kell vennünk.)

Az egyenlet megoldása elméletileg azt jelentené, hogy megkeressük azt a $c(x,t)$ függvényt, amit a (III.39) összefüggésbe „helyettesítve” azonosságot kapunk. Amellett hogy ilyen függvény általánosan nem is adható meg, a fő problémát az jelenti, hogy az egyébként egyszerűen hangzó „behelyettesítés” is magasabb matematikai ismereteket igényelne. (Mit kezdjünk például mindjárt az egyenlet bal oldalán álló emeletes törttel?)

Bizonyos speciális esetekben közelítő megoldások azért adhatók, de a gyakorlati problémák megoldására legtöbbször csak numerikus (számítógépes) módszereket alkalmaznak. Ilyen módszerek eredményeként a

kiindulási feltételek ismeretében, Fick II. törvényének felhasználásával, kellő pontossággal meghatározható a koncentráció térbeli és időbeli változása is (lásd „Fick II. törvényének szemléletes jelentése”).

III.3. megjegyzés. A (III.39) egyenletet a matematika formalizmusával élve a következő alakban szokás felírni:

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial c}{\partial t}.$$

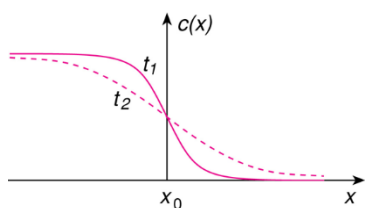
Ezt a felírást azonban szándékosan kerüljük, mert megértése csak magasabb matematikai ismeretek birtokában lehetséges.

Fick II. törvényének szemléletes jelentése

A számítógépes módszerek gondolatmenetét követve az alábbiakban – valódi megoldás helyett – megmutatjuk Fick II. törvényének a szemléletes jelentését egy konkrét esetre, nevezetesen az egyszerűsített Fick-kísérletre alkalmazva. Induljunk ki a (III.39) összefüggésből és próbáljuk meg visszakapni az egyszerűsített Fick-kísérlet eredményeit csupán elméleti megfontolások alapján. Felelevenítésképpen az 1. ábrán megismételtük a Fick I. törvényének származtatása során már bemutatott kísérleti eredményeket azzal a kis különbséggel, hogy a függőleges tengelyen a részecskesűrűség ($n(x)$) helyett a koncentrációt ($c(x)$) tüntettük föl. Célul csak annyit tűzzünk ki, hogy a t_1 időpontban ismert $c(x)$ függvényből Fick II. törvényének felhasználásával határozzuk meg $c(x)$ -et egy későbbi, mondjuk t_2 időpontban. Ennek érdekében alakítsuk át a (III.39) összefüggést célunknak jobban megfelelő formára:

$$D \frac{\Delta \left(\frac{\Delta c}{\Delta x} \right)}{\Delta x} + c(t) = c(t + \Delta t).$$

Így éppen **azt kaptuk meg, hogy amennyiben a koncentráció (térbeli) eloszlását ismerjük egy adott t időpontban, akkor egy kicsit későbbi $t + \Delta t$ időpontban milyen lesz az új eloszlás.**



1. ábra. A koncentráció eloszlása ($c(x)$) a t_1 és t_2 időpontokban ($t_1 < t_2$) az egyszerűsített Fick-kísérlet szerint

Az eljárás során tehát $c(x)$ ismert függvény, $D\Delta t$ egy ismert szorzófaktor és minden nehézség forrása az emeletes tört, ami a következő utasítások végrehajtását jelenti:

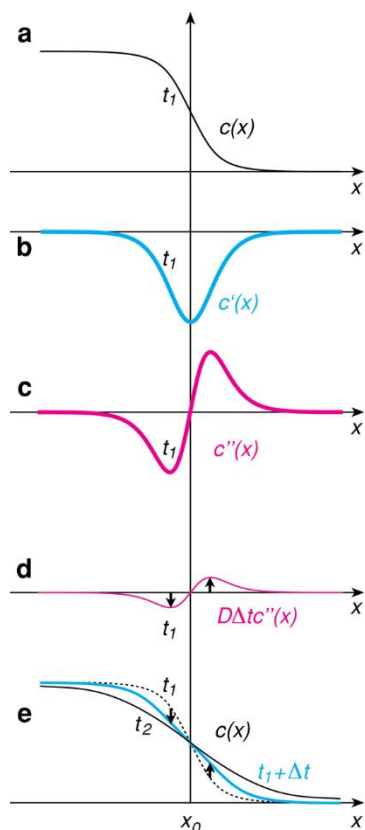
1. határozzuk meg $c(x)$ meredekségét helyről helyre az x tengely mentén (például úgy, hogy kis egyenes szakaszokra bontjuk, és azok meredekségét használjuk);
2. minden x -hez tartozó meredekség értékeket új függvényértékeknek tekintve alkossuk meg a $c'(x)$ függvényt;
3. ismételjük meg az előző két lépést ezen a $c'(x)$ függvényen is, és alkossuk meg $c''(x)$ függvényt, ami esetünkben az emeletes törttel azonos.

A feladat végrehajtását lépésenként a 2. ábrán mutatjuk be. A 2a. ábrán a $c(x)$ kiindulási eloszlás látható. A görbe meredeksége kezdetben 0, majd fokozatosan csökken egészen a minimális meredekségig (x_0 hely, legnagyobb negatív meredekség), ezután szimmetrikusan, fokozatos növekedéssel visszajutunk a 0 meredekségig (2b. ábra). Ez a $c'(x)$ függvény. Ennek a meredeksége kezdetben szintén 0, de a minimális meredekségig hamarabb elérünk, majd onnan növekedve az x_0 helyen már ismét 0 a meredekség. Ennek az origóra vonatkozó tükörképe valósul meg a növekvő szakaszon (2c. ábra). Így megkaptuk az emeletes törtnek megfelelő $c''(x)$ függvényt.

A következő lépés az, hogy ezt megszorozzuk a $D\Delta t$ mennyiséggel, ami a függvény jellegét nem, csak a függőleges tengely irányú változásait érinti (2d. ábra). Végül az így kapott függvényt hozzáadjuk a kiindulási $c(x)$ függvényhez (2e. ábra). Végeredményként tehát azt kaptuk, hogy az új függvény (a $t_1 + \Delta t$ időpontban) a

közepén és a szélein változatlan marad, illetve csak kevésbé változik, a közbülső részekben pedig ellapul, ami megegyezik a kísérleti tapasztalatokkal (vö. 1. ábra).

Ezt az eljárást megismételve az újonnan kapott (kék) függvényen, illetve ugyanígy folytatva, lépésről lépésre haladva nyomon követhetjük a diffúzió folyamatát.



2. ábra. Az egyszerűsített Fick-kísérlet magyarázata Fick II. törvényének „lépésenkénti” alkalmazásával

2.1.5. III/2.1.5. A bolyongási probléma és Fick II. törvényének kapcsolata

Már korábban említettük, hogy a diffúzió jelensége és a Brown-mozgás között nincs lényegi különbség. A jelenség oka a részecskék rendezetlen mozgása, azaz a hűmozgás. Véletlen jellege pedig a környező részecskékkel való állandó rendszertelen ütközések következménye. Próbáljuk most erről az oldaláról megközelíteni a jelenséget, és vizsgáljuk meg közelebbről a részecskék szabálytalan zezugos mozgását. Konkrétan arra a kérdésre keressük a választ, hogy bizonyos idő eltelte után **milyen messzire jut el egy részecske a kezdeti helyétől.**

Amennyiben minden szükséges információ birtokunkban lenne (például gázok esetén ismernénk az ütköző részecskék aktuális helyét és impulzusát), akkor – bár igen sok számolás árán – elvileg a kérdésre egyértelmű válasz adhatnánk. Mivel ezek az adatok nem állnak rendelkezésünkre, ezért a mozgás véletlenszerűségét feltételezve csak arra tudunk válaszolni, hogy mekkora az az átlagos távolság, amekkora távolságra a részecske várhatóan eljut (lásd „A „részeg tengerész” problémája”).

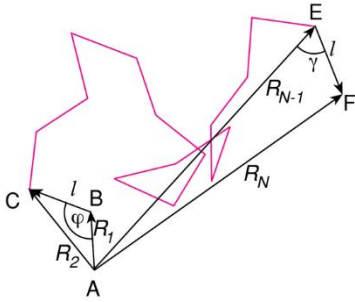
A „részeg tengerész” problémája

(A fenti bolyongási problémát „a részeg tengerész” problémájaként emlegetik a tudományos köznyelvben:

a tengerész kijön a kikötői kocsmából, és el akar indulni valamerre, de igen rosszul áll a lábán, ezért lépései véletlenszerűek. Minden lépése tetszőleges szöveget zár be az előzővel. A kérdés végül is az, hogy ilyen feltételek mellett elég hosszú idő elteltével vajon meddig jut el a tengerész. Természetesen nem tudjuk, mert nem is lehet megmondani, azt azonban már kiszámíthatjuk, hogy ha naponta megismétlődik az eset, akkor tengerészünk átlagosan milyen távolságra jut el a kocsmától.)

Az 1. ábrán a részecske cikcakkos mozgását tüntettük fel a kiindulási A ponttól F-ig. Ez annyiban különbözik a III.12a. ábrától, hogy itt minden két ütközés közötti távolság egyforma, éppen átlagos szabad úthossznai (l), tehát ezzel egyfajta átlagolást már elvégeztünk. Egy ilyen útszakasz megtételét nevezzük a továbbiakban egy lépésnek, ami korábbi megfontolásainknak megfelelően τ ideig tart (így jelöltük a két ütközés között eltelt átlagos időt). Az N -edik lépés megtétele utáni eltávolodás mértékét jelöljük R_N -nel, amivel arra utalunk, hogy a mozgásnak nincs kitüntetett iránya, tehát a részecske egy R_N sugarú gömbön bárhol lehet, de persze R_N akár 0 is lehet. Azt, hogy $R_1 = l$ nem kell magyaráznunk, R_2 viszont φ tetszőleges megválasztása esetén 0 ($\varphi = 0$ vagy 2π) és $2l$ ($\varphi = \pi$) között már akármekkora is lehet, de mekkora ennek a távolságnak a „várható” értéke. Ennek meghatározása érdekében először felírjuk R_2^2 -tet egy adott φ szögre úgy, hogy alkalmazzuk a koszinusz tételt az ABC háromszögre:

$$R_2^2 = l^2 + l^2 - 2l^2 \cos\varphi \quad (1)$$



1. ábra. Egy véletlen bolyongást végző részecske útvonala N lépés megtétele után. (Az egyszerűbb tárgyalás kedvéért minden lépés éppen átlagos szabad úthossznai)

Az átlagolást ezek után úgy hajtjuk végre, hogy a (1) kifejezést kiszámítjuk, mondjuk n különböző véletlenül kiválasztott φ esetén, összeadjuk őket, majd elosztjuk n -nel:

$$\overline{R_2^2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (2l^2 - 2l^2 \cos\varphi_i).$$

ahol φ_i ($i = 1, 2, \dots, n$) jelenti a véletlenül kiválasztott szögeket és az átlagolást felülvonással jelöltük. Mivel az összegben n darab egyforma tag is szerepel ($2l^2$) ezeket n -szer összeadva $n2l^2$ -et kapunk. A koszinuszos tagok mindegyikéből $2l^2$ kiemelhető. Az átalakítások elvégzése után kapjuk:

$$\overline{R_2^2} = \frac{1}{n} n2l^2 - 2l^2 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos\varphi_i \quad (2)$$

Tudjuk, hogy a koszinuszfüggvény szimmetriájából adódóan olyan, hogy egy perióduson belül ($0; 2\pi$) úgy változik, hogy minden függvényértéket és annak ellentettjét is kétszer veszi föl (lásd 2. ábra). Mivel a szögek véletlen kiválasztásánál minden irány egyformán valószínű, ezért várhatóan a különböző nagyságú szögek gyakorisága is azonos az n tagú összegben. Ebből viszont az következik, hogy a többé-kevésbé egymásnak megfelelő szögek koszinuszait összegezve azok páronként 0-hoz közeli értéket adnak (változó előjellel), tehát a (2) kifejezésben szereplő összeg biztosan nagyon közel lesz 0-hoz (a hibahatáron belül 0 eredményt szolgáltat). (Amennyiben $n = \infty$, akkor be is bizonyítható, hogy az összeg egzaktul 0.) Így végül azt kapjuk, hogy

$$\overline{R_2^2} = 2l^2, \quad \text{vagy} \quad R_2 = l\sqrt{2}. \quad (3)$$

Ennek mintájára számítsuk ki most azt, hogy ha $N-1$ lépés után a bolyongó részecske R_{N-1} -re távolodott a kiindulási helyétől, akkor egy lépéssel később mekkora R_N átlagos távolságra található. Ismételten a koszinusztételt alkalmazzuk, most az AEF háromszögre (lásd 1. ábra):

$$R_N^2 = R_{N-1}^2 + l^2 - 2R_{N-1}l \cos\varphi.$$

Majd az átlagolás elvégzése után kapjuk:

$$\overline{R_N^2} = \overline{R_{N-1}^2} + l^2. \quad (4)$$

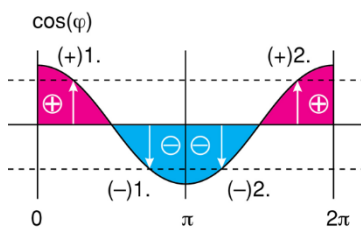
Látható, hogy ha N helyére 2-t írunk, visszakapjuk a (3) összefüggés eredményét, hiszen $R_1 = l$. Ezen túlmenően, a (4) rekurziós formula segítségével tetszőleges N lépésre is megadhatjuk a várható eltávolodás mértékét. Így folytatva a sort:

$$\overline{R_3^2} = 3l^2, \quad \text{és végül} \quad \overline{R_N^2} = Nl^2. \quad (5)$$

Az összefüggést tovább alakíthatjuk, ha felhasználjuk azt, hogy minden lépés (l) τ ideig tart, illetve, hogy eközben a részecske sebessége $v = l/\tau$. Eszerint a bolyongás teljes ideje $t = N\tau$, ahonnan N -et kifejezve beírhatjuk a (5) összefüggésbe. Azt is tudjuk, hogy R_N nem más, mint a várható eltávolodás t idő elteltével, azaz $R(t)$, így:

$$\overline{R(t)} = \sqrt{Nl^2} = \sqrt{\frac{t}{\tau} l^2} = \sqrt{t} \frac{l}{\sqrt{\tau}} = \sqrt{3Dt}. \quad (6)$$

Az átalakítás utolsó lépésénél felhasználtuk a diffúziós együttható korábban megadott definícióját ($D = (1/3)vl$, lásd a (III.32) összefüggést).

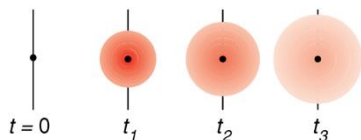


2. ábra. A koszinuszfüggvény görbéje néhány fontos tulajdonságának hangsúlyozásával

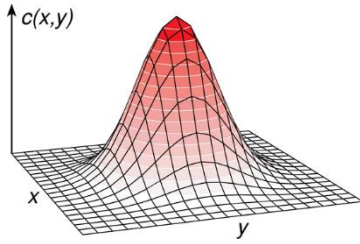
A feltett kérdésünkre tehát a következő választ adhatjuk: **egy részecske idő elteltével a kezdeti helyétől $R(t)$ távolságra jut, aminek átlagos értéke az idő négyzetgyökével arányosan növekszik** ($R(t) \sim \sqrt{t}$). Ha sok részecske eltávolodását vizsgáljuk (azonos kezdőpontból), akkor lesznek olyan részecskék, amelyek az átlagos értéknél kevésbé távolodnak el (esetlegesen az N lépés megtétele után visszatérnek kiindulási helyük környékére), de lesznek olyanok is, amelyek sokkal jobban eltávolodnak. **A részecskék valódi eltávolodását tehát egy eloszlásfüggvénnyel írhatjuk le.** A részecskék egyik fele a kiszámított átlagos értéknél közelebb, a másik fele pedig távolabb fog elhelyezkedni. (A bolyongási problémával Maryan Smoluchowski (1872–1917) lengyel fizikus és Albert Einstein (1879–1955) német fizikus foglalkozott behatóan, és a probléma megoldása is tőlük származik.) (Lásd még *A diffúzió mint „bolyongás”*.)

A diffúzió mint „bolyongás”

A szemléletesség kedvéért vegyük azt a példát, amikor egy kis darab kálium-permanganát- (KMnO_4) szemcsét kevés vizet tartalmazó lapos edénybe dobunk. (A kísérlet cukorral vagy konyhasóval is elvégezhető, de kevésbé látványos.) A vízben a kálium-permanganát gyorsan oldódni kezd, majd diffúzió útján körkörösén szétterjed. A folt méretének változását az 1. ábrán tüntettük föl. A foltnak valójában nincs éles határa. Jellemzésére legalkalmasabb egy olyan eloszlás függvény, ami azt adja meg, hogy egy adott (x, y) koordinátákkal megadott pont környezetében mekkora a kálium-permanganát-koncentráció. Ezt szemlélteti a 2. ábra, ami geometriailag egy szimmetria tengelye körül megforgatott Gauss-görbe.



1. ábra. A vízbe dobott kálium-permanganát körkörös szétterjedése diffúzió útján. (A modell pillanatképek „azonos időközönként” készültek.)



2. ábra. A kálium-permanganát koncentrációjának eloszlását egy szimmetriatengelye körül megforgatott Gauss-görbével jellemezhetjük

Ha a koncentráció eloszlását csak az egyik (mondjuk x) tengely mentén vizsgáljuk, akkor az egy „egyszerű” 0 várható értékű ($\mu = 0$) Gauss-görbével adható meg (normális eloszlás):

$$c(x) = \frac{c_0 \Delta x}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}, \quad (1)$$

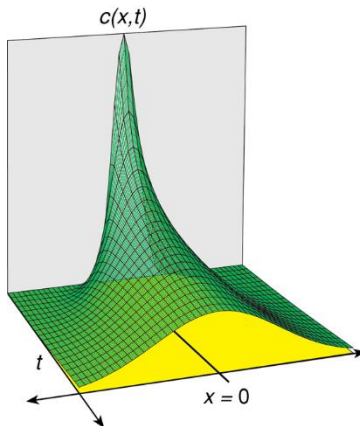
ahol σ_x a görbe szélességére jellemző adat (elméleti szórás), c_0 pedig a diffúzió kezdetekor, a diffúzió kiindulási helyén egy kis Δx tartományon belüli koncentráció (kiindulási koncentráció). Fick II. törvénye ugyanilyen alakú megoldáshoz vezet, ha a diffúzió során az alábbi feltételek teljesülnek.

Tegyük fel, hogy a diffúzióban részt vevő molekulák száma mindvégig állandó, és hogy a $t = 0$ időpillanatban a teljes anyagmennyiség (azaz minden molekula) a koordináta-rendszer $x = 0$ pontja körüli Δx szélességű keskeny tartományon belül van, ahol a koncentráció állandó (c_0). Innen valamennyi molekula szabadon elmozdulhat az x tengely mentén, és mozgását később sem gátolja semmi (leszámítva a többi részecske, illetve a közeg jelenlétét). Más megfogalmazás szerint tehát az egydimenziós szabad diffúzió esetével állunk szemben.

Ilyenkor Fick II. törvényének megoldásaként azt kapjuk, hogy a (1) összefüggésben szereplő, a Gauss-görbe szélességét megadó elméleti szórás a következő alakú:

$$\sigma_x = \sqrt{2Dt}. \quad (2)$$

ahol D a diffúziós együttható. Eszerint az idő előrehaladtával a Gauss-görbe fokozatosan szétterül az x tengely mentén, ahogy az a 3. ábrán látható. Tehát végeredményként Fick II. törvényét az egydimenziós szabad diffúzióra alkalmazva az ábrán látható $c(x, t)$ függvényhez jutunk, ami jól egyezik kísérleti tapasztalatainkkal.



3. ábra. Az egydimenziós szabad diffúzió szemléltetése Fick II. törvényének megoldásaként. A koncentráció eloszlás változása az idő függvényében, $c(x,t)$

A 3. ábrán látható $c(x, t)$ függvény tehát Fick II. törvényének egy speciális megoldása. Ha a keretben lévő legutóbbi (2) és az előző (6) összefüggéseket összehasonlítjuk, szembetűnő a hasonlóság. A koncentrációeloszlás szélessége és a részecskék várható eltávolodása ugyanúgy változik az időben. (Mindkettő az idő négyzetgyökével arányosan növekszik. A szorzófaktorbeli eltérés csak onnan származik, hogy a kétféle paramétert másként definiáltuk:

$$\sigma_x \sim \overline{R(t)} \sim \sqrt{Dt}. \quad (\text{III.40})$$

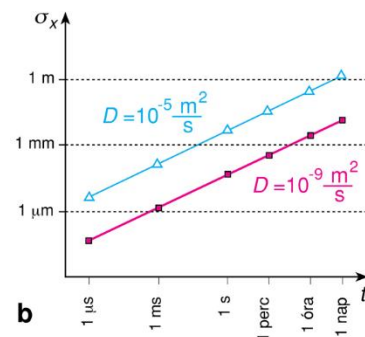
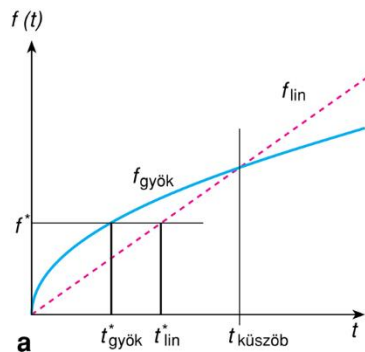
Ha a bolyongás szempontjából tekintjük az eredményeket, azt mondhatjuk, hogy az 3. ábrából a szétterülés mellett jól látszik a folyamat statisztikus jellege is, hiszen egy adott időpillanatban a részecskék között találunk olyanokat, melyek az átlagnál kisebb, illetve annál nagyobb eltávolodással rendelkeznek.

2.1.6. III/2.1.6. A diffúziós folyamatok időtől való függésének elemzése

Ha tekintetbe vesszük, hogy a diffúziós jelenségek a rendszert alkotó részecskék bolyongómozgásának következményei, akkor az előző rész legfontosabb gyakorlati mondanivalója az, hogy a részecskéknek a diffúzió miatt bekövetkező várható elmozdulása a kiindulóponttól az idő négyzetgyökével arányos, vagy másképpen mondva a diffúzióhoz szükséges idő a diffúziós távolság négyzetével arányosan növekszik.

A III.16a. ábrán példaként az időtől való négyzetgyökös függést a lineáris összefüggéssel hasonlítottuk össze. (Az $f_{\text{gyök}}$ függvény például $f(t) = k_1\sqrt{t}$ alakú, az f_{lin} függvény pedig $f(t) = k_2t$, ahol k_1 és k_2 két állandó.) Megfigyelhető, hogy egy bizonyos $t_{\text{küszöb}}$ ideig egy adott függvényértéket mondjuk f^* -ot az $f_{\text{gyök}}$ függvény rövidebb idő alatt ér el, mint az f_{lin} ($t_{\text{gyök}}^* < t_{\text{lin}}^*$), tehát ilyen értelemben $f_{\text{gyök}}$ gyorsabban változik, mint f_{lin} . A $t_{\text{küszöb}}$ -nél hosszabb időkre ez a tendencia megfordul. A III.16b. ábrán két konkrét diffúziós együttható (10^{-5} , illetve 10^{-9} m²/s) esetében a (III.40) összefüggés alkalmazásával kiszámított „elmozdulás”-idő értékpárokat mutatunk be. (A III.3. táblázatból kitűnik, hogy a két megadott diffúziós együttható nagyságrendileg a levegőben, illetve vízben történő diffúziót jellemzi.) Ezek szerint például ahhoz, hogy egy oxigénmolekulánál alig nagyobb részecske a levegőben egy kiszemelt irányban egy métert haladjon diffúzió útján, hozzávetőlegesen egy teljes napra van szükség. Ugyanennyi idő alatt ugyanez a részecske vízben csak körülbelül egy centiméterre juthatna. (Lásd még *Egy élettani példa a diffúzió kiemelt jelentőségére.*)

Összefoglalva a **diffúzió rövid távon**, (vizes oldatokban körülbelül 100 μm-ig) viszonylag **gyors** (szobahőmérsékleten kevesebb mint néhány másodperc az ekkora távolság megtételéhez szükséges idő), **hosszú** (néhány centiméteres) **távolságra** azonban már rendkívül **lassú folyamat** (napokig is eltarthat). Ennek oka az, hogy a diffúziós idő a távolság négyzetével arányos, tehát annak növelésével rohamosan növekszik.



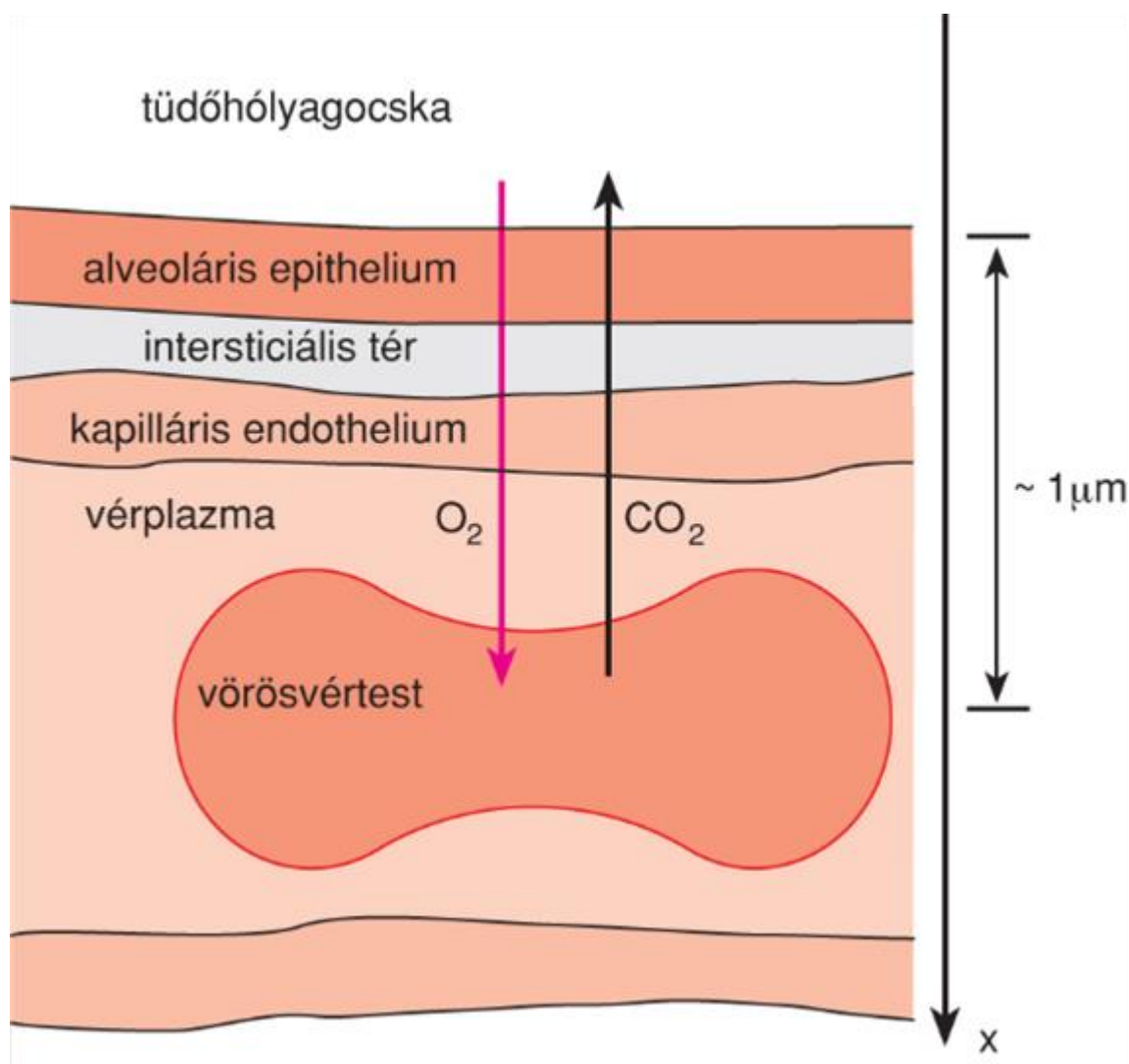
III.16. ábra. Az időtől való négyzetgyökös függés és konkrét eredménye az egydimenziós szabad diffúzió esetében. Az ábra b) részében mindkét tengely logaritmikus beosztású

Egy élettani példa a diffúzió kiemelt jelentőségére

Az emlősök életműködéséhez, sejtanyagcseréjéhez nélkülözhetetlen az oxigén felvétele és eljuttatása a sejtekhez, valamint az anyagcsere-végtermék szén-dioxid eltávolítása a szervezetből. Ezen két fontos gázmolekula a tüdő és a szövetek sejtjes állománya közötti közlekedése a vérkeringés segítségével, az abban megtalálható „szállítóegységek”, a vörösvértestek (és a bennük található hemoglobinféherje) közvetítésével valósul meg. A tüdőhólyagocskákban az oxigén koncentrációja lényegesen magasabb, mint az e terület közelében a kapillárisokban elhaladó vérben lévő vörösvértestekben. A tüdőtől távol eső (perifériás) szöveti részekben ez a viszony fordított irányú. A szén-dioxid-gázra nézve pedig mindkét helyen ellentétes irányú koncentrációviszonyok állnak fenn. Így ezen gázok felvétele és leadása diffúziós gázcsere révén valósulhat meg.

Ha közelebbről szemügyre vesszük a tüdőhólyagocskák és a vér közötti gázcserét, akkor, mint azt az ábrán bemutatott leegyszerűsített sémából is láthatjuk, a gázoknak több határoló rétegen is át kell haladniuk. Például az oxigénmolekuláknak a tüdő felől haladva át kell jutniuk a hólyagocskákat határoló hámszöveten (alveoláris epithelium), a kapilláris belső hámrétegen (kapilláris endothelium), a köztük levő téren (intersticiális tér), majd a vérplazmán s végül a vörösvértesteket határoló membránon. Ezen struktúrák együttesen hozzávetőlegesen $1\ \mu\text{m}$ diffúziós távolságot határoznak meg a fenti gázmolekulák számára. A diffúziós együtthatók ismeretében ($D_{\text{O}_2} \approx 10^{-9}\ \text{m}^2/\text{s}$; $D_{\text{CO}_2} \approx 6 \cdot 10^{-9}\ \text{m}^2/\text{s}$) megbecsülhető az az idő, ami ahhoz szükséges, hogy a gázmolekulák diffúzió révén megtegyék az előbbieken meghatározott körülbelül $1\ \mu\text{m}$ távolságot (egy adott irányban) a hatékony gázcsere érdekében. Ez az átlagos időtartam körülbelül $500\ \mu\text{s}$ az oxigén, illetve $80\ \mu\text{s}$ a szén-dioxid esetében.

A tüdőkapillárisokban a véráramlás viszonylag gyors, így a vörösvértestek átlagos tartózkodási ideje ebben a térben legfeljebb $0,5\ \text{s}$. A diffúziós tér speciális felépítéséből adódó igen rövid diffúziós távolság és az ehhez tartozó nagy diffúziós sebesség teszi lehetővé azt, hogy ez alatt az igen rövid idő alatt is hatékony gázcsere valósulhasson meg.

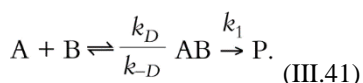


A vér és a tüdő közötti gázcsere egyszerűsített vázlata

2.1.7. III/2.1.7. A diffúzió által szabályozott kémiai reakciók

A kémiai reakciók sebességéről már a Boltzmann-eloszlás tárgyalásánál (I/3.1.2. rész) ejtettünk néhány szót. Itt a diffúziós folyamatoknak a kémiai reakciókra gyakorolt hatását elemezzük.

A sejtekben az anyagcsere-folyamatok során kémiai reakciók ezrei zajlanak ugyanabban az időpillanatban, s ezek között több olyan is akad, ahol a diffúzió határozza meg a reakció sebességét. Annak belátására, hogy hogyan is történik ez, tekintsünk egy egyszerű bimolekuláris reakciót, amely igen gyakori az élő rendszerekben. E reakció során reagálhat egymással két tetszőleges molekula A és B, például egy enzimfehérje és szubsztrátja. A reakciót megelőzően a komponensek diffúzió révén kerülnek egymás közelébe, majd ütközést követően egy adott élettartamú, ún. ütközési komplexet (AB) képeznek. Az ütközési komplexben zajlik le a tulajdonképpeni kémiai reakció, amely végül a termék (P) képződéséhez vezet. Az ütközési komplexben nemcsak kémiai reakciólépés játszódhat le, hanem egyéb folyamatok is, mint például energiaátadás a komponensek között, ami szintén megváltozott végállapotot eredményez. Az említett bimolekuláris reakciókat a következő reakciósvéma szemlélteti:



Ahhoz, hogy a reakció végbemenjen, a reakciópartnereknek aktivált állapotba kell kerülniük az ütközési komplexben, azaz át kell jutniuk azon az „energiagáton”, amely a kiindulási és a végállapot között van.

Az ilyen reakciók során az ütközési komplex képződésének sebessége:

$$\frac{\Delta[AB]}{\Delta t} = k_D[A][B], \quad (\text{III.42})$$

ahol [AB] az ütközési komplex, [A] és [B] a kiindulási komponensek koncentrációi, míg k_D a (III.41) reakciósvémában a felső nyíl irányába végbemenő folyamat sebességi állandója. Az ütközési komplex disszociálhat is az alsó nyíl irányában, k_{-D} sebességi állandóval. A végtermék pedig k_1 sebességi állandóval képződik az AB komplexből. A reakciók kvázi-stacionárius állapotára, amikor az ütközési komplex koncentrációja időben állandó, felírható a következő egyenlet:

$$k_D[A][B] - k_{-D}[AB] - k_1[AB] = 0 \quad (\text{III.43})$$

amiből kifejezhető az ütközési komplex egyensúlyi koncentrációja:

$$[AB] = \frac{k_D}{k_{-D} + k_1} [A][B]. \quad (\text{III.44})$$

A sémából leolvasható, hogy a bimolekuláris kémiai vagy enzimátikus reakció sebességét (ami tulajdonképpen a termék képződésének sebessége) az előző egyenlet (III.44) felhasználásával a következőképpen írhatjuk fel:

$$\frac{\Delta[P]}{\Delta t} = k_1[AB] = \frac{k_1 k_D}{k_{-D} + k_1} [A][B]. \quad (\text{III.45})$$

A folyamat sebességére jellemző másodrendű sebességi állandó, k_2 a következő kifejezéssel lesz egyenlő:

$$k_2 = \frac{k_1 k_D}{k_{-D} + k_1}. \quad (\text{III.46})$$

A reakció végső sebességét meghatározó tényezőket vizsgálva két szélsőséges esetet különböztethetünk meg. Ha $k_{-D} \ll k_1$, akkor:

$$k_2 \cong \frac{k_1 k_D}{k_1} = k_D, \quad (\text{III.47})$$

azaz a **reakció sebessége diffúziókontrollált** lesz, vagyis az ütközési komplex komponenseinek diffúziós sebessége szabja meg azt. Ha a reakció aktiválási energiája, azaz energiagátja nagy, akkor $k_1 \ll k_{-D}$. Ilyenkor **aktivációkontrollált reakciókról** beszélünk, mert

$$k_2 \equiv \frac{k_1 k_D}{k_{-D}} \equiv k_1 K_e, \quad (\text{III.48})$$

ahol K_e az egyensúlyi állandó, amely a tömeghatás törvénye alapján a következő módon definiálható:

$$K_e = \frac{[AB]}{[A][B]}. \quad (\text{III.49})$$

Diffúziókontrollált reakciókkal találkozhatunk például a sejtek mitokondriumának elektrontranszport láncánál vagy a baktériumok légzési láncánál, és olyan enzimreakciók során, amelyeknél a szubsztrát strukturális okoknál fogva lassan tud eldiffundálni az ütközési komplexből.

2.2. III/2.2. A diffúzió néhány különleges esete

2.2.1. III/2.2.1. Az ozmózis jelensége, Van't Hoff-törvénye

Az eddigiekben csak a szabad diffúzióval foglalkoztunk, azaz olyan esetekkel, amikor a részecskék mozgását semmi sem gátolta a közegben fellépő sűrűlátsási erőn, illetve az egymással való ütközéseken kívül. A III/2.1.2. részben azt is említettük, hogy a diffúzió során valójában legalább két diffundáló komponens („A” és „B”) van jelen, csak az egyikről általában nem veszünk tudomást. Ebben a részben olyan eseteket tanulmányozunk, ahol egy „szűrő” megakadályozza az egyik komponens szabad diffúzióját. Az ilyen „szűrő” az ún. félígáteresztő (idegen szóval szemipermeábilis) hártya vagy fal. Sok vizes oldat számára félígáteresztő falat alkotnak az állati eredetű hártyak (például disznóhólyag), az élő sejtek falai, de egy lyukacsos agyaglemez vagy a celofán is. Félígáteresztőnek mondjuk a biológiai membránokat is, amelyeken keresztül lejátszódó transzportfolyamatokkal majd a III/4. részben foglalkozunk részletesen.

Annak érdekében, hogy a jelenség lényegét megragadjuk, végezzük el a következő kísérletet gondolatban. Egy kisméretű, félígáteresztő hártyaából készült zsákot töltünk meg cukoroldattal, majd helyezük egy tiszta vízzel teli tartályba. (A cukor és víz helyett bármilyen más, egymással jól keveredő viszonylag nagy molekulájú oldott anyag és kis molekulájú oldószer megfelel.) Bizonyos idő elteltével azt figyelhetnénk meg, hogy a zsák egyre jobban megduzzad. Arról is meggyőződhetnénk, hogy a zsákon kívül továbbra is tiszta víz, míg a zsákon belül hígabb cukoroldat lenne található.

A jelenség azzal magyarázható, hogy a félígáteresztő hártya csak az oldószer (víz) molekuláit ereszti át, az oldott anyagéit (cukor) nem, így „szabad” diffúzióra csak az oldószer-molekuláknak van lehetőségük. Bár a félígáteresztő hártján az oldószer-molekulák mindkét irányban szabadon áthaladhatnak, mivel az oldószer koncentrációja a zsákon kívül nagyobb, ezért a tiszta oldószer oldaláról (kívülről) másodpercenként több molekula érkezik a félígáteresztő hártvához, mint az oldat oldaláról (belülről), aminek az a következménye, hogy nettó oldószer-beáramlás megy végbe (lásd ismét a III/2.1.2. részt is). Ez a **diffúzió útján történő egyirányú anyagáramlás az ozmózis**.

Az oldószer beáramlása maga után vonja a zsákon belüli nyomás növekedését (ettől duzzad meg a zsák, lásd a III.17. ábrát is). A belső nyomás fokozatos növekedése viszont az oldószer kiáramlását segíti. Ezért a nyomás csak addig emelkedhet, amíg ennek hatására le nem áll a nettó anyagbeáramlás, és a rendszer dinamikus egyensúlyi állapotba nem kerül. Ez akkor áll be, ha időegység alatt ugyanannyi oldószer diffundál a zsákba, mint amennyi onnan a nyomáskülönbség hatására kiperéselődik ($J_{v,be} = J_{v,ki}$). Ez az ún. **ozmotikus egyensúly**, az egyensúlynak megfelelő nyomáskülönbség pedig az **ozmózisnyomás** (lásd *Az ozmózisnyomás meghatározása*).



III.17. ábra. Az ozmózis szemléltetése. Babszemek a) szárazon és b) vízben történő egynapos áztatás után. (Derka István felvétele)

Ezt a nyomást esetünkben a zsák fala, azaz a féligáteresztő hártya kompenzálja. Ha a falak teherbírása nem elegendő ahhoz, hogy az egyensúlyhoz szükséges „túlnyomást” elviselje, a zsák megrepedhet, kipukkadhat. Ez történhet például akkor is, ha az érett cseresznye vagy szőlő túl sok esőt kap, vagy ha túl hosszú ideig áztatjuk őket a gyümölcs mosásakor. Ugyanezt a jelenséget tapasztalhatjuk sejtek esetében is, ha a sejt belsejében és környezetében nagyon eltérőek a koncentrációviszonyok. (Például a vörösvértetek könnyen kerülhetnek ilyen helyzetbe). Ilyenkor a sejtbe beáramló víz szétfeszítheti magát a sejtet. Ha a citoplazmamembrán megreped, a sejt szétesése, lízise elkerülhetetlen. Erre a problémára a következő részben még visszatérünk.

Bár a fenti (2) összefüggéshez az ábrán is bemutatott egyszerűsített modell segítségével jutottunk, így szigorúan véve csak gázokra érvényes, azonban a tapasztalat azt mutatja, hogy híg oldatokra is alkalmazható. Ebben az esetben az összefüggést **Van't Hoff-törvénynek** szokás nevezni:

$$p_{\text{ozmózis}} = cRT. \quad (\text{III.50})$$

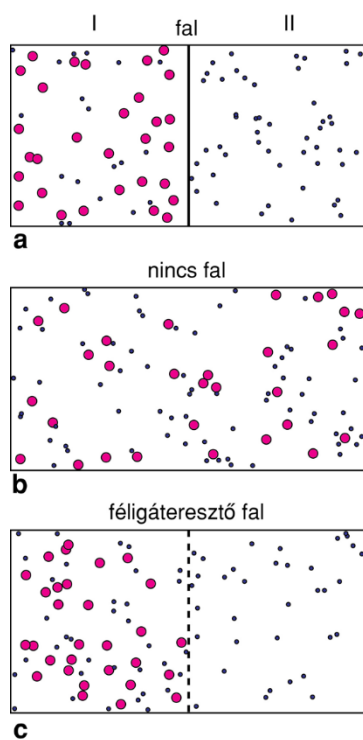
ahol c az oldat koncentrációja. Ezek szerint híg oldatok ozmózisnyomása – függetlenül az oldószer és az oldott anyag minőségétől – közelítőleg ugyanakkora, mint amekkora nyomást az oldott anyag kifejtene, ha az oldattal egyenlő térfogatot ugyanazon hőmérsékleten gáz alakban töltené ki. (A törvény ebben a formában nem érvényes olyan oldatokra, amelyekben az oldott anyag molekulái erősen disszociált állapotban vannak.)

Az ozmózis jelensége természetesen akkor is fellép, ha a féligáteresztő hártya két oldalán különböző koncentrációjú oldatok vannak. Mindig a töményebb oldat hígul fel. Az egyensúlyi nyomást a különböző koncentrációjú oldatok ozmózisnyomásának különbsége adja. Az is lehetséges, hogy a hártya két oldalán különböző anyagok vannak oldva, amelyek számára a hártya átjárhatatlan. Az ozmózis szempontjából az oldott anyag minősége közömbös. Adott hőmérsékleten csak a koncentráció játszik szerepet, és ha ez a két oldalon különböző, akkor felléphet az ozmózis jelensége.



Jacobus Hendricus van't Hoff (1852–1911) holland vegyész, a fizikai kémia és a sztereokémia egyik megalapítója. 1901-ben kémiai Nobel-díjat kapott.

Az ozmózisnyomás meghatározása



Modellkísérlet az ozmózisnyomás meghatározásához

Az ozmózisnyomás nagyságát könnyűszerrel meghatározhatjuk, ha az előbbi kísérletben a zsákot és környezetét egy egyszerűsített modellel helyettesítjük (lásd az ábrát). Vegyünk egy tartályt, amit egy fallal két egyenlő V térfogatú részre osztottunk. Az egyik rész (I, bal oldal) fog megfelelni a zsákon belüli, a másik rész (II, jobb oldal) a zsákon kívüli térfogatnak. Kövessük a Fick-kísérlet magyarázatánál bevált módszert, és folyadék helyett most is (bonyolultabb molekuláris kölcsönhatásoktól mentes) gázzal töltsük meg tartályunkat. Az I térrészbe (a cukoroldatnak megfelelően) nagyobb (piros) és kisebb (kék) molekulákból álló gáz keveréke, míg a II részbe (a tiszta víznek megfelelően) csak a kisebb (kék) molekulákból álló gáz kerüljön [az ábra a) része]. Tegyük fel, hogy a rendszer termikus egyensúlyban van ($T = \text{állandó}$), és, hogy mindkét térrészben (I, II) a gáznak ugyanakkora a nyomása. (Ilyen kiindulási állapot valósul meg az eredeti kísérletben is.)

Ha ezután a falat eltávolítjuk [az ábra b) része] a diffúzió végeredményeként mindkét gáz (a nagyobb és a kisebb molekulájú is) egyenletes eloszlású lesz a tartályban. Amennyiben az elválasztó falat eltávolítás helyett („egy varázsütéssel”) féligáteresztő falra cseréljük [az ábra c) része], az ily módon korlátozott diffúzió végeredményeként az összes nagyobb méretű (piros) molekula továbbra is az I térrészben marad, míg a kisebb méretűek (kékek) ugyanúgy egyenletes eloszlásúak lesznek, mint az előző esetben. A térfogatok egyenlősége miatt anyagmennyiségük megegyezik a két oldalon ($v_{\text{kék}}^{\text{I}} = v_{\text{kék}}^{\text{II}}$). Ennek megfelelően a bal oldalon (I) összesen $v_{\text{piros}} + v_{\text{kék}}^{\text{I}}$ anyagmennyiségű, a jobb oldalon (II) $v_{\text{kék}}^{\text{II}}$ anyagmennyiségű gáz lesz található.

Az ideális gázokra vonatkozó állapotegyenlet ($pV = NkT$, lásd I/3.2.1. rész) segítségével felírhatjuk a gáz nyomását mindkét térrészben. Használjuk az állapotegyenlet mólokra vonatkozó alakját ($pV = \nu RT$):

$$p_{\text{I}} = \frac{\nu_{\text{piros}} + \nu_{\text{kék}}^{\text{I}}}{V} RT, \quad p_{\text{II}} = \frac{\nu_{\text{kék}}^{\text{II}}}{V} RT. \quad (1)$$

E két nyomás különbsége pedig éppen az ozmózisnyomással egyenlő:

$$p_{\text{ozmózis}} = \frac{\nu_{\text{piros}}}{V} RT = c_{\text{piros}} RT, \quad (2)$$

ahol c_{piros} a nagyobb méretű molekulák (az eredeti kísérletben cukor, illetve oldott anyag) koncentrációja, R az egyetemes gázállandó, T pedig az abszolút hőmérséklet.

2.2.2. III/2.2.2. Az ozmózisnyomás gyakorlati jelentősége

A diffúzió, az ozmózis, az anyagszállítás és anyagfelhasználás legkülönbözőbb folyamatai túlnyomó többségükben vizes közegben játszódnak le. Az emberi test ismert tulajdonsága, hogy 55-60%-át víz képezi. Ha általában élőlényekről beszélünk, akkor elmondhatjuk, hogy az élő anyag alkotórészeinek több mint a fele, némely tengeri állat esetében 90%-a víz. A földi élet nélkülözhetetlen előfeltétele bizonyos mennyiségű víz jelenléte. A protoplazma víztartalmának 10-20%-os csökkenése már halálos lehet. A szomjazást, a vízelvonást minden élőlény nehezebben bírja a táplálékfelvonásnál, az éhezésnél. Az ozmózis gyakori jelenség **az élő szervezetekben, ahol az ozmotikus egyensúly megbomlása komoly, esetenként káros következményekkel járhat.**

Itt térünk vissza a korábbiakban már említett sejtlízis (sejtszítés) kérdésére (lásd a III/2.2.1. részt). Ez a probléma általános érvényű, a szervezet valamennyi sejtjét érintheti. Ahhoz, hogy egy sejt környezetével ozmotikus egyensúlyban legyen, az szükséges, hogy a sejt belsejének (citoplazma) ozmózisnyomása egyenlő legyen a külső tér ozmózisnyomásával. (Nagyobb belső túlnyomás esetén a sejt kipukkadhat, lizálhat.) Általánosságban, **ha két különböző oldat ozmózisnyomása egyenlő, izotóniás oldatokról beszélünk.** A sejtek belsejével, illetve a vérrel izotóniás oldat például a 3,8%-os Na-citrát, a körülbelül 5,5%-os glükóz vagy a körülbelül 0,15 M-os (0,87%-os) NaCl-oldat. Az utóbbit fiziológiás sóoldatnak is nevezzük (lásd III.4. megjegyzés).

Ha vörösvértestet vagy egyéb sejtet helyezünk izotóniás oldatba, ozmózis nem lép fel. Ha azonban ennél kisebb koncentrációjú (hipotóniás) oldatba helyezük őket, akkor az ozmózis révén víz áramlik a sejt belsejébe, ami a sejt duzzadásához vezet, s mivel a sejtthártya (plazmamembrán) rugalmassága véges, végül a sejt kipukkadhat. (A vörösvértetek esetében ekkor beszélünk hemolízisről.) Az izotóniásnál nagyobb koncentrációjú (hipertóniás) oldatba helyezve a sejteket a víz a sejtekből a környezet felé áramlik, ami a sejt térfogatcsökkenését, zsugorodását eredményezi. Ezért fontos, hogy az injekciók, illetve infúziós oldatok izotóniásak legyenek, mert az ozmózis által okozott túlnyomás fájdalmat és komoly sejtkárosodást okozhat. (Lásd még *Néhány ozmotikus hatáson alapuló kezelési mód az orvosi gyakorlatban.*)

Az ozmózis jelensége rendkívül fontos a növények vízfelvételében is. A talajvíz általában kisebb sókoncentrációjú, mint a gyökérnedv, így víz áramlik a növénybe a talaj felől, amely aztán a növény sejtjeiben túlnyomást (turgort) biztosít. Sok lágyszárú növény kiegyenesedése például ennek köszönhető. A fák gyökereinél fellépő ozmózisnyomás értéke elérheti az atmoszferikus nyomás 20-szorosát is.

III.4. megjegyzés. Az 5,5%-os glükóz oldat koncentrációja 0,3 M-nak felel meg. Ez éppen kétszer akkora, mint a fiziológiás sóoldat koncentrációja. Az ellentmondás azzal oldható fel, ha tudjuk, hogy a NaCl ilyen koncentrációban teljesen disszociált állapotban van, és így az oldatban kétszer annyi részecskét jelent, mint ahány molekulát feloldottunk.

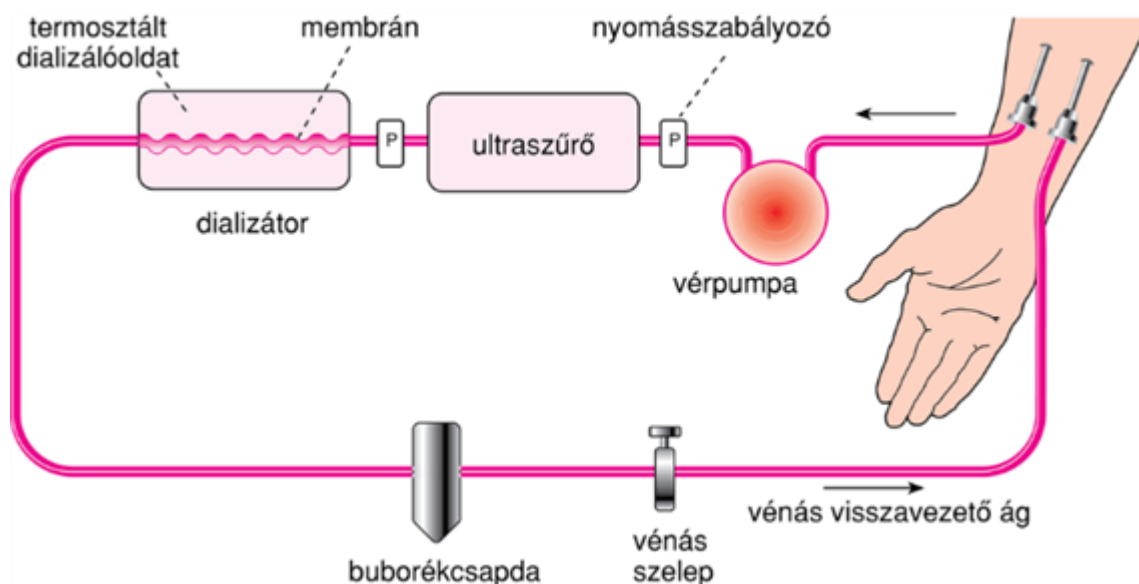
Néhány ozmotikus hatáson alapuló kezelési mód az orvosi gyakorlatban

Ödémák és a végtagi **gyulladásos területek** külső kezelésére alkalmaznak dextránoldatot, illetve keserűsöt ($MgSO_4$ -oldat), amelyek a testfolyadékokhoz képest hipertóniás természetűek, így képesek az érintett területekről a felgyülemlett felesleges vizet eltávolítani. Ugyancsak az ozmotikus egyensúly átmeneti befolyásolásával hatnak a különböző **hashajtó sók**, amelyek a vastagbélből nehezen szívódnak fel, így ott hipertóniás közeget hoznak létre. Ez a bélbe történő vízarámlást idéz elő, ami a béltartalom hígulását és könnyebb üríthetőségét segíti elő.

E hatásokkal ellentétes értelmű az a kóros állapot, amelyet a vér glükózsztintjének tartós megemelkedése, a hiperglikémia idézhet elő cukorbetegéknél. A vérben megemelkedett cukorszint ugyanis megbontja a vér és a környező szövetek sejtjei közötti ozmotikus egyensúlyt, vizet vonván el a sejtektől. Ez a folyamat a szervezet teljes kiszáradásához is vezethet.

Végezetül meg kell említeni a súlyos vesebetegek kezelésére alkalmazott eljárást, az ún. **hemodialízist**, amely szintén az ozmózis jelenségén alapul. Dialízisnek nevezzük általában azt a folyamatot, amelynek során például különböző molekulákat, illetve makromolekulákat egymástól elválasztunk, az előzőekben már említett féláteresztő hártályokon (membránokon) keresztül történő ozmózissal. A membránok pórusméretének megválasztásával megszabhatjuk, hogy milyen molekulatömeg-határig „engedjen át” a membrán. A hemodialízis során is ezt az elvet használjuk ki a vérben felhalmozódott oldható, a vese számára toxikus salakanyagok eltávolítására (lásd az ábrát).

Az eljárás egy ún. művese-berendezés alkalmazásán alapul, amelynek lényegi része egy meglehetősen hosszú, féláteresztő, cső alakú hártály (például celofán), amelyet gondosan testhőmérsékletre termosztált dializálóoldat vesz körül. Ennek az oldatnak az összetételét a betegség konkrét jellemzőitől függően határozzák meg, igen nagy precizitással. Ezt követően a véráramot összekapcsolva a celofántekercsrel, a vért átáramoltatják azon, majd visszajuttatják a beteg vénájába. A vízben oldódó fehérjelebontási termékek, sejtmergek és egyéb salakanyagok ozmózis révén (a vízzel együtt) eltávoznak a vérből, a nélkülözhetetlen plazmafehérjék (albuminok, globulinok stb.) és a vörsejtek a vérben maradnak. A kezelés átlagos időtartama alkalmanként 4-8 óra, ami alatt a dializálóoldatot cserélni is kell. Természetesen itt is rendkívül fontos az oldat ionkoncentrációjának és az esetleges fémion-szenyveződések jelenlétének állandó ellenőrzése, mert ezek káros hatással lehetnek a szervezet ionháztartására.



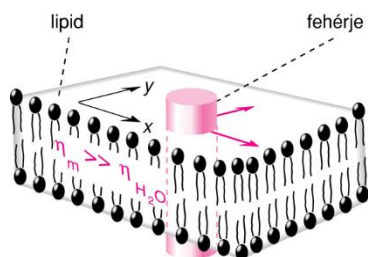
A hemodialízis vázlatja

2.2.3. III/2.2.3. Laterális diffúzió biológiai membránokban

Diffúzió nemcsak a biológiai membránokon keresztül zajlik (lásd a III/4. részt), hanem maguk a membránt alkotó molekulák (lipidek, fehérjék) is mozognak, diffundálnak a lipid kettős rétegben. Ez a folyamat a membrán speciális szerkezete miatt eléggé eltér a vízbéli diffúziótól.

A membrán mint diffúziós közeg speciális tulajdonságai a következőkből adódnak. Egyrészt, bár a lipid kettős réteg fiziológiás hőmérsékleteken túlnyomórészt folyékony (fluid) fázisban van, a membránok viszkozitása még ebben az állapotban is jelentősen (200–1000-szer) nagyobb, mint a vízé azonos hőmérsékleten. Másrészt a membránok szerkezete ezen a hőmérsékleten is inhomogén, benne rendezetlen fluid és erősen rendezett (fluid vagy gél állapotú) területek, ún. domének váltakoznak.

Egy másik, diffúziót érintő speciális tulajdonság abból következik, hogy a biológiai membránok vastagsága (5–8 nm) elhanyagolhatóan kicsiny felszínükhöz képest (néhány μm^2), ami a membránt alkotó molekulák mozgási lehetőségét gyakorlatilag két dimenzióra korlátozza. E molekuláknak a membrán síkjában történő kétdimenziós mozgását **laterális diffúzió**nak nevezzük (III.18. ábra). (A lipidek és a fehérjék laterális diffúziója a molekulák forgó és a lipidek zsírsavláncainak „csapkodó” mozgásaival együtt biztosítja a membrán „fluiditását”, ami fizikai definíció szerint a membrán átlagos viszkozitásának reciprokaként ($1/\eta$) adható meg.) E fluiditásnak fontos szerepe van a sejtek mechanikai tulajdonságainak kialakításában (alak, képlékenység, deformálhatóság). Ez sok esetben a legkritikusabb tulajdonság is, hiszen például a kapillárisokban nagy sebességgel áramló vérben található vörösvértestek igen komoly igénybevételnek (nyíróerők, súrlódás stb.) vannak kitéve. A plazmamembránok biztosítják többek között a biológiai folyamatok változatosságát és specificitását, például a látás, a légzés, a fotoszintézis, a sejt-sejt felismerés folyamataiban. Ezeken túlmenően elsődleges „támadáspontjai” a vírusoknak, az allergéneknek, a baktériumoknak és a gyógyszereknek. A specifikus felismerés, megkötés és ezt követően a biokémiai „jeleknek” a sejtek belsejébe való továbbítása tehát mind a membránokhoz kapcsolt folyamat, és ezekben fontos szerepet játszanak a membránkomponensek mozgásai. E mozgások biztosítják például a felsorolt folyamatokban részt vevő, a fajlagosságot biztosító ún. receptorfehérjék megfelelő komplexekbe való rendeződését, majd a sejtekbe való felvételét (internalizációját). Meg kell jegyezni, hogy a membránkomponensek, különösen a fehérjék a membrán nagy viszkozitása miatt több nagyságrenddel lassabban diffundálnak a membránokban, mint vízben (lásd még *A laterális diffúzió vizsgálata*).



III.18. ábra. Fehérjék és lipidek laterális diffúziója biológiai membránokban

A laterális diffúzió vizsgálata

A hetvenes évektől a sejtek vizsgálatára alkalmas mikroszkópos technikák gyors fejlődésének köszönhetően lehetővé vált a membránfehérjék és a lipidek laterális mozgásainak, diffúziójának nyomon követése. E vizsgálatok a sejtek szerkezeti felépítésére vonatkozó ismereteink szempontjából komoly „áttörést” jelentettek. A membránfehérjék mikroszkopikus laterális diffúziós tulajdonságainak megismerése segített abban, hogy számos fontos membránfehérje esetén sikerült kideríteni ezek kapcsolatrendszerét a sejteket „összekapcsoló” extracelluláris mátrixrendszerrel, a sejt belsejében elhelyezkedő vázrendszerrel, a citoskeletonnal vagy egyéb membránfehérjékkel.

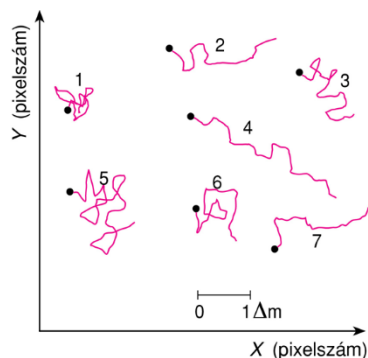
Napjainkban speciális ultragyors videokamerák révén e laterális mozgások közvetlen nyomon követése is lehetővé vált. Így akár egyetlen membránfehérje vagy a membránhoz kötődő nagyobb (például vírus) részecske mozgási nyomvonalának megjelenítése is lehetséges. A vizsgált fehérjéket (részecskéket) 30-40 nm átmérőjű kolloidális aranygömbökhöz kapcsolt vagy fluoreszkáló antitestek segítségével jelölik.

Az 1. ábrán egy ilyen „részecske-nyomkövetési” (Single Particle Tracking, SPT) vizsgálat eredményét mutatjuk be. A 2. ábrán az egyedi nyomvonalak több részecskén, időben többször megismételt megfigyeléséből megszerkesztett, átlagos négyzetes elmozdulás – megfigyelési idő függvény ($S^2(t)$, illetve az ezzel becsült elméleti szórásnégyzet $\sigma^2(t)$) látható. A (III.40) összefüggés alapján szabad laterális diffúzió esetén e mennyiségek között lineáris függvénykapcsolatot várunk, hiszen például kétdimenziós mozgásra:

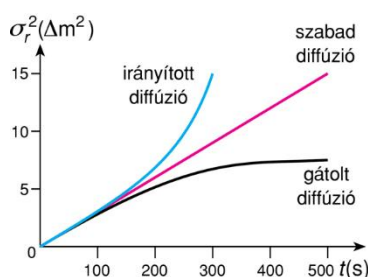
$$\sigma_r^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 = 4Dt$$

A III/2.1.5. részben tárgyaltak szerint az átlagos eltávolodás mértéke az idő négyzetgyökével arányos. Itt azonban az átlagos elmozdulás négyzetéről van szó, ami már természetesen lineáris függvénye az időnek. A

gyakorlatban ettől pozitív vagy negatív irányba eltérő függvények is adódhatnak (lásd a 2. ábrát), ami arra utal, hogy a vizsgált fehérjék mozgását a membránban aktív anyagcsere-folyamatokhoz kapcsolt mechanizmusok gyorsíthatják (irányíthatják), illetve hogy a molekula mozgását valamilyen mechanizmus gátolhatja is.



1. ábra. Membránfehérjék laterális diffúziójának nyomon követése (Single Particle Tracking, SPT módszerrel)



2. ábra. A kiértékelés lehetséges grafikonjai

Az előzőekben bemutatott módszerek segítségével kiderült, hogy a lipidek diffúziója a membránokban általában gyors ($D_{\text{laterális}} \sim 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$) és a mobilis hányad is nagy (> 90%). Ezzel szemben a fehérjék igen nagy változatosságot mutatnak a $D_{\text{laterális}}$ értékét (10^{-13} - $10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}$), illetve a mobilis hányadot (10–90%) illetően egyaránt. Ez azt jelenti, hogy egyes fehérjék szabadon diffundálnak a membránban, míg más fehérjék laterális diffúziója gátolt. A laterális diffúziót gátolhatja például a lipidanyagcsere változásaihoz kapcsolható membránviszkózitás-változás vagy a membránfehérje citoszkeleton vagy extracelluláris mátrix komponensek általi „kihorgonyozása”. Ugyancsak gátolt a membránfehérjék laterális diffúziója például polarizált hámsejtek illeszkedésénél a membránokban található struktúrák (például „a szoros illeszkedés”) révén. Mindezek a példák jól szemléltetik, hogy a laterális diffúziós vizsgálatok igen hatékony eszközt jelentenek a sejtbiológia számára a sejtek szerkezetének molekuláris szintű megismerésében.

3. III/3. A transzportfolyamatok termodinamikai vonatkozásai

Az élő szervezet a környezetétől felvett tápanyagok kémiai energiáját a működéséhez szükséges folyamatok fenntartására, a sejtekben végbemenő és a szervezet egészét érintő munkavégzésre használja fel. Az életfolyamatokat energiaátalakulásokkal, energiacserekkel járó anyagtranszport, töltésáramlás, stb. kíséri, de közben időlegesen helyi egyensúlyok is kialakulhatnak. Mindez arra utal, hogy a termodinamika általános törvényei, amelyekben az energetikai szempontok meghatározóak, segítséget nyújthatnak a transzportfolyamatok egységes leírásában is. A következőkben a termodinamika ismeretanyagából csak néhány alapkérdést emelünk ki, amelyek az életfolyamatok mélyebb megértését szolgálják.

Átvezetésképpen először a termikus energiaáram kialakulását vizsgáljuk meg egy modellen. Majd a termodinamikai rendszerek általános jellemzésére szolgáló mennyiségek áttekintése után összefoglaljuk a transzportfolyamatokat. Ezután a termodinamika főtételeinek a korábban tanultaknál általánosabb megfogalmazása, illetve az entrópia bevezetése következik. Végül az egyes folyamatok irányára vonatkozóan teszünk észrevételeket.

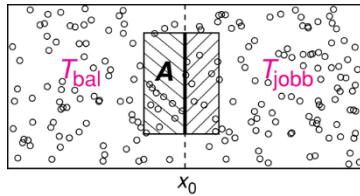
3.1. III/3.1. A diffúzió jelensége, ha a rendszer nincs termikus egyensúlyban

A diffúzió jelenségének bemutatásakor (lásd III/2.1.2. rész) minden esetben azzal a feltételezéssel éltünk, hogy a vizsgált rendszer termikus egyensúlyban van ($T = \text{állandó}$). Most azt az esetet is megvizsgáljuk, amikor a rendszer nincs ugyan termikus egyensúlyban, de attól nincs is nagyon távol.

3.1.1. III/3.1.1. Termodiffúzió, hővezetés

A termodiffúzió jelenségét először Carl Friedrich Wilhelm Ludwig (1816– 1895) német orvos és fiziológus figyelte meg (1856). Egy U alakú csőbe nem túl tömény Na_2SO_4 -oldatot töltött, majd a cső egyik szárát forró vízgőzzel melegítette, a másikat jéggel hűtötte. A kísérlet eredményeként bizonyos idő elteltével azt tapasztalta, hogy a só a hidegebb szárban kristályosodni kezdett, annak ellenére, hogy az eredeti oldat biztosan nem volt túltelített. Az oldott só tehát a hőmérséklet-különbség hatására a melegebb részből a hidegebb felé vándorolt, emiatt ott megnőtt a koncentrációja, ami a kristályosodási folyamat megindulását eredményezte. Ludwigtól függetlenül Charles Soret (1854– 1904) svájci fizikus is tanulmányozta ezt a jelenséget (1879), ezért a termodiffúziót Soret-effektusnak vagy Ludwig–Soret-effektusnak is nevezik (lásd *A termodiffúziót leíró összefüggés származtatása*).

A termodiffúziót leíró összefüggés származtatása



A termodiffúzió egyszerűsített modellje

A jelenség lényegét ismét a Fick-kísérletnél már tárgyalt modell segítségével mutatjuk be (lásd az ábrát). A V térfogatú tartályt egyforma m tömegű részecskékből álló gázzal töltöttük meg. A tartályt a hossz tengelye (x) mentén, középen (x_0 -nál) kettéosztottuk egy válaszfalal. A változás csak annyi, hogy most mondjuk a bal oldalon magasabb a hőmérséklet, mint a jobb oldalon ($T_{\text{bal}} > T_{\text{jobb}}$), ami azt jelenti, hogy ott a részecskék átlagosan nagyobb sebességűek ($v_{\text{bal}} > v_{\text{jobb}}$), de a start pillanatában a részecskék sűrűsége (n) megegyezik a két oldalon. A kérdés az, hogy az x_0 -nál lévő képzelt fal eltávolítása után mekkora az anyagáram sűrűsége (J_v). Most is csak azok a részecskék tudnak az adott idő (Δt) alatt átlépni a „fal”-ra, amelyek elég közel vannak hozzá, pontosabban a távolságuk a „faltól” kisebb, mint $v \cdot \Delta t$, de ez a mennyiség a sebességek különbözősége miatt nem lesz egyforma a két oldalon. A gyorsabban mozgó részecskékből azonos koncentrációviszonyok mellett ($n_{\text{bal}} = n_{\text{jobb}} = n$) több fog átlépni, mint a lassúbbakból. Eszerint a (lásd még a III/2.1.2. részben *Fick I. törvényének származtatását*) felírhatjuk a nettó részecskévándorlást:

$$\Delta N = \Delta N_{\text{bal}} - \Delta N_{\text{jobb}} = \frac{1}{6} n \Delta t A (v_{\text{bal}} - v_{\text{jobb}}).$$

Az egyenlőség mindkét oldalát osztva az Avogadro-számmal és felhasználva az anyagáram sűrűség és a koncentráció definícióját ($J_v = \Delta N / NA \Delta t A$; $c = n / NA$), továbbá a jobb oldal bővítését elvégezve kapjuk:

$$J_v = \frac{1}{6} c \frac{(v_{\text{bal}} - v_{\text{jobb}})(v_{\text{bal}} + v_{\text{jobb}})}{(v_{\text{bal}} + v_{\text{jobb}})} = \frac{1}{6} c \frac{(v_{\text{bal}}^2 - v_{\text{jobb}}^2)}{(v_{\text{bal}} + v_{\text{jobb}})}.$$

$$v_{\text{átl}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}, \text{ illetve, hogy } (v_{\text{bal}} + v_{\text{jobb}}) = 2v_{\text{átl}}, \text{ hogy}$$

$$J_v = \frac{1}{6} c \frac{3k}{m2v_{\text{átl}}} (T_{\text{bal}} - T_{\text{jobb}}).$$

tovább alakíthatjuk a kifejezést:

Végül az iránytangens definícióját felhasználva (lásd Fick I. törvényénél is) a hőmérsékletesés ($\Delta T/\Delta x$) bevezetésével megkapjuk a termodiffúziót leíró törvényt:

$$J_v = \frac{1}{6} c \frac{3k}{m2v_{\text{átl}}} 2l \frac{\Delta T}{\Delta x} = -\frac{1}{2} \frac{ckl}{mv_{\text{átl}}} \frac{\Delta T}{\Delta x} = -L_T \frac{\Delta T}{\Delta x}.$$

A jelenséget leíró törvény tehát:

$$J_v = -L_T \frac{\Delta T}{\Delta x}. \quad (\text{III.51})$$

Láthatjuk, hogy ez az összefüggés formai szempontból nagyon hasonlít Fick I. törvényéhez (III.31), így a benne szereplő együttható (L_T) is bizonyos értelemben a diffúziós együtthatónak „felel meg”. L_T azt adja meg, hogy egységnyi idő alatt egységnyi felületen mennyi az átdiffundált anyagmennyiség, ha a hőmérsékletesés is egységnyi volt.

Természetesen a folyamat időtől való függését (Fick I. törvényéhez hasonlóan) ez a törvény sem tartalmazza. Valójában elég nehéz követni azt, hogy mi minden történhet egy ilyen egyensúlytól kicsit távolabbi rendszerben. Ha például a hőmérséklet-különbség miatt megindul a részecsketranszport (termodiffúzió), akkor az koncentrációkülönbséget okoz, ami viszont egy másfajta részecsketranszportozhoz vezethet (közönséges diffúzió). Adott esetben a két folyamat kompenzálhatja is egymást.

Általánosan azt lehet mondani, hogy a nettó részecskebeáramlásnak az a következménye, hogy a koncentrációviszonyok is megváltoznak, így ez a hatás hozzáadódik a korábbiakhoz. Ha olyan helyzet alakul ki, hogy a nettó részecskevándorlás megszűnik ($\Delta N = 0$), tehát időegységenként ugyanannyi részecske lép át a falon mindkét irányban ($\Delta N_{\text{bal}} = \Delta N_{\text{jobb}}$), de a hőmérsékletkülönbség fennmarad, akkor egy újabb jelenséggel állunk szemben.

Amiatt, hogy a bal oldalon magasabb a hőmérséklet ($T_{\text{bal}} > T_{\text{jobb}}$), a részecskék átlagosan több energiát ($(3/2)kT$) visznek magukkal balról jobbra, mint ellenkező irányba. Ennek viszont az a következménye, hogy bár nettó részecskeáram nincsen, nettó energiaáram ettől függetlenül kialakul (a termodiffúziónál is alkalmazott összefüggések analógiájára):

$$\Delta E = \Delta N \frac{3}{2} k(T_{\text{bal}} - T_{\text{jobb}}) = \frac{1}{6} n\Delta t A v_{\text{átl}} \frac{3}{2} k(T_{\text{bal}} - T_{\text{jobb}}), \quad (\text{III.52})$$

és az energiaáram-sűrűség:

$$J_E = \frac{\Delta E}{A \cdot \Delta t} = \frac{1}{4} m v_{\text{átl}} k(T_{\text{bal}} - T_{\text{jobb}}) = -\frac{1}{2} m v_{\text{átl}} k l \frac{\Delta T}{\Delta x} = -\lambda \frac{\Delta T}{\Delta x}. \quad (\text{III.53})$$

Ez a hővezetés egyenlete, ahol λ a hővezetési együttható. A törvény fenti megfogalmazása Jean Baptiste Joseph Fourier (1768–1830) francia matematikus és fizikus nevéhez fűződik (lásd III.5. megjegyzés).

III.5. megjegyzés. Az eddig használt modellünk helyett a hővezetés jobb megértéséhez egy másik modellt is használhatunk, nevezetesen egy darab szilárd testet (például egy fémből készült hasábot), amelynek két vége kicsit eltérő hőmérsékletű. Mivel ilyenkor az atomok a rácsponthoz kötöttek, a hőmérséklettől függően csak kisebb vagy nagyobb mértékű rezgőmozgást végezhetnek. Emiatt a szomszédos atomok energiát cserélhetnek ugyan egymással, de egyik atom sem mozdulhat el a helyéről nagyobb távolságra. Ily módon biztosítva van a „tisztá” hővezetés „diffúzió” nélkül is.

3.2. III/3.2. A termodinamikai rendszer jellemzésére szolgáló mennyiségek és a transzportfolyamatok kapcsolata

Azt, hogy a transzportfolyamatok és a termodinamika szoros kapcsolatban van egymással, nem kell különösebben bizonyítanunk. Hiszen például a termodiffúzió esetében a hőmérsékletkülönbség hatására bekövetkező részecskevándorlással nyilvánvaló energiaáramlás is együtt jár. Bár a többi esetben ez kevésbé nyilvánvaló, meg fogjuk mutatni, hogy valamennyi transzportfolyamat során egy jellemző mennyiség transzportja mellett mindig történik energiáttranszport is (illetve a hővezetés esetében csak az).

3.2.1. III/3.2.1. Extenzív és intenzív mennyiségek

Termodinamikai rendszeren nagyszámú és egymással állandó kölcsönhatásban álló részecskék (atomok, molekulák, azaz kémiai anyagok) rendszerét értjük. Konkrét esetben a rendszerhez csak azokat az anyagokat soroljuk, amelyeket termodinamikai szempontból éppen vizsgálni kívánunk. Minden egyéb anyagot, amellyel a vizsgált rendszer esetleg kölcsönhatásban van, **környezetnek** nevezzük. Így rendszer lehet például adott térfogatú gáz, egy baktérium, egy limfocita, de egy állat vagy az ember (de lehet az emberi test egy része, például a szív), vagy akár a Föld is.

A rendszer tehát a természet – célszerűségi szempontok alapján, vizsgálataink számára kiválasztott – **makroszkopikus** része. A „makroszkopikus” jelzőt azért kell hangsúlyoznunk, mert sok makroszkopikus mennyiség (például a nyomás vagy a hőmérséklet is) csak a mikroszkopikus mennyiségek átlagaként van meghatározva. Így ahhoz, hogy minden makroszkopikus mennyiségnek jól meghatározott értéke legyen, a rendszernek elegendően sok (mikro)részecskét kell tartalmaznia. (Nem beszélhetünk például egyetlen molekula nyomásáról vagy hőmérsékletéről.)

A rendszert **nyitottnak** nevezzük, ha környezetével anyag- és energiacsereét folytat. Termodinamikai értelemben tehát idetartoznak az élő rendszerek is. **Zárt** rendszerről akkor beszélünk, ha az anyagcsere nem, de az energiacsere megengedett. A teljes mértékben elzárt, **izolált** termodinamikai rendszer pedig az, amelyik sem anyag-, sem energiacsereét nem folytat a környezetével (III.4. táblázat).

3.4. táblázat - III.4. táblázat. A termodinamikai rendszer fő típusai

Típus	Anyagcsere	Energiacsere
Izolált	-	-
Zárt	-	+
Nyitott	+	+

A rendszer jellemzésére szolgáló mennyiségeknek két típusát különböztetjük meg. Ha a vizsgált rendszert tetszőleges módon két részrendszerre osztjuk, akkor nyilvánvaló, hogy a rendszer teljes térfogata egyenlő az egyes részrendszerek térfogatának összegével ($V_{\text{teljes}} = V_1 + V_2$). Azokat a mennyiségeket, amelyek a rendszer részrendszerekre történő felosztásakor a térfogathoz hasonlóan viselkednek, **extenzív** mennyiségeknek nevezzük. Ilyen például az energia (E), a tömeg (m), a töltés (Q), a részecskeszám (N) stb. Azt is mondhatjuk, hogy az extenzív mennyiségek, a két részrendszer egyesítésekor összeadódnak, vagy hogy arányosak a rendszer „mértével”.

Egy rendszert akkor nevezünk **homogénnek**, ha bármely részre osztás esetén bármely x extenzív mennyiségre $x_{\text{teljes}}/V_{\text{teljes}} = x_{\text{rész}}/V_{\text{rész}}$. A homogén termodinamikai rendszerben vannak olyan mennyiségek is, amelyek a részre osztás utáni részrendszerekben ugyanakkorák maradnak, mint amekkorák a részre osztás előtti teljes

rendszerben voltak. Ezek az **intenzív** mennyiségek. Ilyenek például a homogén rendszerekben az extenzív mennyiségek sűrűségei (x/V), de a nyomás (p) és a hőmérséklet (T) is. Az intenzív mennyiségek tehát függetlenek a rendszer „méretétől”.

3.2.2. III/3.2.2. A transzportfolyamatok egységes leírása

Ha áttekintjük az eddig megvizsgált és a már korábbról ismert transzportfolyamatokat, szembejuthat számos közös tulajdonságuk. Termodinamikai szempontból minden transzportfolyamatot (legalábbis formálisan) valamilyen inhomogenitás okoz, és maga a transzport a homogén állapot várható eléréséért folyik. Ezt az inhomogenitást az intenzív mennyiségek különbségével mérhetjük. A transzport tehát azért folyik, hogy a részrendszerek között meglévő intenzív mennyiség különbségek csökkenjenek, illetve adott esetben meg is szűnjenek. Ilyenkor tehát az intenzív mennyiségek **kiegyenlítődnek**. Az inhomogenitás csökkenése viszont csak extenzív mennyiségek áramlásával képzelhető el. Így általánosan azt mondhatjuk, hogy a transzportfolyamatokban valamilyen intenzív mennyiség különbségének kiegyenlítődése érdekében extenzív mennyiségek **árama indul el**. (Lásd még *Egy érdekes példa.*)

Egy érdekes példa: transzportfolyamatok az emberi társadalomban

A következő – Fényes Imre (1917–1977) magyar fizikustól származó – példával azt szeretnénk megmutatni, hogy a termodinamika fogalomköre mennyire általánosítható.

Legyen a vizsgált rendszer az emberiség, amely részrendszerekbe, országokba tömörülve él. Egy országot jellemezzon három extenzív mennyiség:

1. az országban lévő javak mennyisége,
2. az ország lakossága,
3. az ország területe.

Normális határforgalom esetén, ha két országban az emberek életszínvonalra nagyjából megegyezik, a belépők és a kilépők átlagos száma is ugyanannyi. Ha az életszínvonalbeli különbség jelentős, akkor általában megindul a lakosság egyirányú vándorlása. Természetesen az emberek vándorlása egyben a javak áramát is jelenti, hiszen az emberek szellemi és anyagi javakat visznek magukkal. Háború esetén, ha az ellenséges felek hadipotenciálja eltér egymástól, akkor az egyik ország területet szerezhet a másiktól. Azonos hadipotenciál esetében az elfoglalt és az elvesztett területek kiegyenlítik egymást. (Az elmondottak összefoglalását adjuk meg az alábbi táblázatban, ahol az ország mint egy lehetséges vizsgált rendszer néhány „kölcsonhatását” és jellemző mennyiségeit tüntettük fel.)

3.5. táblázat -

Kölcsonhatás	Áramló extenzív mennyiség	Az áramot fenntartó intenzív mennyiség (különbsége)
szabad kereskedelem	javak	ár
szabad határforgalom	emberek	életszínvonal
háború	terület	hadipotenciál

Ebből is az tűnik ki, hogy az extenzív mennyiségek áramát a megfelelő intenzív mennyiségek (ár, életszínvonal, hadipotenciál) különbsége szabja meg. Annál „erősebb” egy extenzív mennyiség árama, minél nagyobb a hozzá tartozó intenzív mennyiség különbsége a két ország között. Az áramlásokat mesterségesen megakadályozhatjuk például a határok teljes vagy részleges lezárásával. Ha az intenzív mennyiségek ugyanakkorak a két országban, akkor azt mondhatjuk, hogy beállt az egyensúly, ilyenkor nyitott határok esetén sincs nettó extenzív áram.

A III.5. táblázatban a fenti példához hasonlóan az eddig megismert transzportfolyamatokhoz kapcsolódó kölcsonhatásokat, a jellemző mennyiségeket, valamint a leírásukra szolgáló törvényeket foglaltuk össze. A

táblázatban feltüntettük a törvények megfogalmazóinak nevét, a törvények egységes alakra hozott új formáját (lásd III.6. megjegyzés), valamint az adott kölcsönhatást kísérő energiaközlés típusát is.

3.6. táblázat - III.5. táblázat. Az eddig megismert transzportfolyamatok jellemzői

Kölcsönhatás	Áramló extenzív mennyiség	Az áramot fenntartó intenzív mennyiség (különbsége)	Eredeti törvény	Megfogalmazója	Átalakítás után (áramsűrűség)	A fellépő energiaközlés
termikus	energia (E)	hőmérséklet (T)	$J_E = -\lambda \frac{\Delta T}{\Delta x}$	Fourier	$J_E = -\lambda \frac{\Delta T}{\Delta x}$	hőcsere
mechanikai	térfogat és energia (V, E)	nyomás (p)	$J_V = -\frac{\pi}{8\eta} R^4 \frac{\Delta p}{\Delta l}$	Hagen-Poiseuille	$J_V = -\frac{R^2}{8\eta} \frac{\Delta p}{\Delta x}$	térfogati munka
elektromos	elektromos töltés és energia (Q, E)	elektromos potenciál (φ)	$J_Q = -\frac{\pi}{\rho} R^2 \frac{\Delta \varphi}{l}$	Ohm	$J_Q = -\frac{1}{\rho} \frac{\Delta \varphi}{\Delta x}$	elektromos munka
anyagi	anyagmennyiség és energia (v, E)	kémiai potenciál (μ)	$J_v = -D \frac{\Delta c}{\Delta x}$	Fick	$J_v = -D \frac{\Delta c}{\Delta x}$	anyaggal szállított munka

Ha a rendszer izolált, akkor semmilyen kölcsönhatás nem jöhet létre a környezetével. Ha a rendszert hővezető fal veszi körül, akkor termikus kölcsönhatás lehetséges, melynek következtében az energiaáram megengedett (a melegebb helyről a hidegebb felé), de más nem. Mozgatható fal esetén térfogat áramolhat, ugyanis a fal mindaddig mozogni fog, amíg az elválasztott két rész nyomása meg nem egyezik. Az elektromos kölcsönhatásnál hasonló a helyzet. A töltésáram addig áll fenn, amíg az elektromos potenciál ki nem egyenlítődik. Az anyagi kölcsönhatás esetén az anyagmennyiség áramlik és a koncentrációkülönbség csökkenhet. Ezzel kapcsolatban felhívjuk a figyelmet arra, hogy az anyagmennyiség áramlásánál a jellemző intenzív mennyiség nem a koncentráció, hanem az ún. **kémiai potenciál** (μ). Ennek részletesebb tárgyalására később kerül sor (lásd III/3.3.2.).

Fontos megjegyeznünk, hogy kísérőjelenséggként mindegyik folyamattal együtt jár az energiaáramlás is (ugyanúgy, mint az általános példában a javak áramlása). Megfigyelhetjük azt is, hogy az összetartozó intenzív és extenzív mennyiségek szorzata mindig energia dimenziójú (a termikus kölcsönhatásról egyelőre feledkezzünk meg), így bármelyik extenzív mennyiség megváltozása energiaváltozást is okoz (lásd III.7. megjegyzés).

A táblázat alapján levonható legfontosabb következtetés az, hogy az egységesítés után a transzportokat leíró törvények formailag nagyon hasonlóak (lásd a táblázat utolsó előtti oszlopát). Mindegyik egyenlet bal oldalán egy extenzív mennyiség áramsűrűsége, jobb oldalán pedig egy intenzív mennyiség esése (hely szerinti változásának nagysága, illetve annak negatív értéke) áll (mindig csak x irányú transzportfolyamatot feltételezve). E két mennyiség minden esetben arányos egymással, amit különböző arányossági tényezők jellemeznek.

Lars Onsager (1903–1976) norvég fizikokémikus volt az, aki úgy gondolta, hogy e formai hasonlóság mögött általános törvényszerűség rejlik. Így a következő általános összefüggés segítségével, egységesen írta le a transzportfolyamatokat (1968, Nobel-díj):

$$J = LX \quad (\text{III.54})$$

ahol $J = \Delta x_{\text{ext}}/(A \Delta t)$ az áramló extenzív mennyiség **áramsűrűsége**, $X = -\Delta y_{\text{int}}/\Delta x$ az áramlást (formálisan) előidéző (az adott extenzív mennyiséghez tartozó) intenzív mennyiség esése az ún. **termodinamikai erő**, L pedig az ún. **vezetési együttható**. A (III.54) egyenlet az ún. **Onsager-féle lineáris összefüggés**. (Az „intenzív mennyiség esése” helyett gyakran használják az „intenzív mennyiség gradiense” kifejezést is.)

Ebből az egyenletből az is kiderül, hogy ha $X = 0$, tehát a rendszer homogén, akkor $J = 0$, tehát nincsenek benne nettó áramok, azaz a rendszer **egyensúlyban** van (lásd III.8. megjegyzés). (Az egyensúly nem statikus, hanem dinamikus, ami azt jelenti, hogy áramlások azért történhetnek, csak az összegük 0.)

A (III.54) Onsager-egyenlet nemcsak a III.5. táblázatban feltüntetett, illetve ahhoz hasonló összetartozó extenzív és intenzív mennyiségek között teremt kapcsolatot. Mint láthattuk a diffúzió, illetve a termodiffúzió esetében, az anyagmennyiség áramát (áramsűrűségét) két intenzív mennyiség is befolyásolhatja (lásd III.9. megjegyzés). Általánosan igaz, hogy egy extenzív mennyiség áramát nemcsak a hozzá tartozó intenzív mennyiség inhomogenitása határozza meg, hanem elvileg a rendszerben fellelhető valamennyi termodinamikai erő szerepéhez juthat. Az Onsager-egyenlet az ilyen esetek leírására is alkalmas. Maradjunk a diffúzió-termodiffúzió „egyszerű” példájánál, tehát csak két mennyiség összekapcsolódását vizsgáljuk. Ebben az esetben az Onsager-egyenlet a következőképpen írható fel általános formában:

$$J_1 = L_{11}X_1 + L_{12}X_2, \quad J_2 = L_{21}X_1 + L_{22}X_2. \quad (\text{III.55})$$

Itt az egymásnak megfelelő ($J_1 \rightarrow X_1, J_2 \rightarrow X_2$) mennyiségek között az ún. „egyenes” vezetési együtthatók (L_{11}, L_{22}), a nem összetartozók ($J_1 \rightarrow X_2, J_2 \rightarrow X_1$) között pedig az ún. „kereszt” vezetési együtthatók (L_{12}, L_{21}) teremtenek kapcsolatot. Konkrétan a termodiffúziót leíró egyenletben $L_T = L_{12}$, az ún. keresztthatást vagy másképpen keresztteffektust jellemzi.

III.6. megjegyzés. A transzportfolyamatokat leíró törvények egységesítése.

A Hagen–Poiseuille törvény átalakításának lépései:

$$J_V = \frac{I_V}{A} = \frac{I_V}{R^2\pi} \frac{\Delta p}{\Delta l} \equiv \frac{\Delta p}{\Delta x}.$$

Az Ohm-törvény és átalakításának lépései:

$$I_Q = \frac{U}{R_\Omega} = - \frac{A}{\rho l} \Delta\varphi = - \frac{\pi R^2}{\rho} \frac{\Delta\varphi}{l}.$$

ahol az U feszültség nem más, mint a ($-\Delta\varphi$) potenciálkülönbség és

$$R_\Omega = \frac{\rho l}{A}$$

(ρ a fajlagos ellenállás); továbbá

$$J_Q = \frac{I_Q}{R_\pi} \frac{\Delta\varphi}{l} \equiv \frac{\Delta\varphi}{\Delta x}.$$

III.7. megjegyzés. *Az összetartozó extenzív és intenzív mennyiségek szorzata energia jellegű.*

Ennek az állításnak a helyességét a korábbról ismert két esetben (mechanikai és elektromos) a mértékegységek segítségével könnyen ellenőrizhetjük: $pV \rightarrow \text{Pa} \cdot \text{m}^3 = \frac{\text{N}}{\text{m}^2} \text{m}^3 = \text{Nm} = \text{J}$,

Illetve $\varphi Q \rightarrow \text{V} \cdot \text{C} = \text{V} \cdot \text{As} = \text{Ws} = \text{J}$.

III.8. megjegyzés. Egyensúlyban a rendszer termodinamikai állapota az extenzív és intenzív mennyiségekkel egyértelmű kapcsolatban van. Ha a rendszer állapota meghatározott, akkor a paraméterei is adottak, és ez fordítva is érvényes. Ezt a kapcsolatot fejezi ki az **állapotegyenlet**:

$f(\{x_{\text{ext}}\}, \{v_{\text{int}}\}) = 0$, ahol f a változók között fennálló valamilyen függvénykapcsolatot jelent. Egzakt alakja csak speciális esetekben ismert [például ideális gázokra $pV - NkT = 0$, lásd I/3.2.1. rész (I.35)].

III.9. megjegyzés. A diffúziót, illetve a termodiffúziót leíró egyenletek:

$$J_v = -D \frac{\Delta c}{\Delta x}, \quad J_v = -L_T \frac{\Delta T}{\Delta x},$$

Az „igazi” anyagmennyiség-áramsűrűség:

$$J_v = -D \frac{\Delta c}{\Delta x} - L_T \frac{\Delta T}{\Delta x}.$$

3.3. III/3.3. A termodinamika főtételei

A termodinamika főtételei olyan alapigazságok (axiómák), amiket kiindulásként elfogadva a további törvényszerűségeket már ezek következményeiként kaphatjuk meg. (A klasszikus mechanikában ugyanilyenek a Newton-törvények.)

A termodinamikai rendszer egyensúlyának kérdését már az előző részben is érintettük. Az egyensúly szükséges és elégséges feltétele az, hogy a kölcsönhatásokhoz tartozó intenzív mennyiségek értéke legyen mindenhol ugyanakkora. Ez a termodinamika **nulladik főtétele**.

3.3.1. III/3.3.1. A termodinamika első főtétele és általánosítása

Az első főtétel korábbi tanulmányokból ismert alakja az energia megmaradásának egy speciális megfogalmazása, amely kimondja, hogy egy rendszer belső energiájának megváltozása (ΔE) megegyezik a rendszerrel közölt hő (Q_E) és a rendszeren végzett munka (W) összegével:

$$\Delta E = Q_E + W. \quad (\text{III.56})$$

A **belső energia** a rendszer szerkezeti adottságaitól függő kinetikus és kölcsönhatási energiájából tevődik össze (szerkezeti energia), amibe az egész rendszernek mint makroszkopikus testnek a kinetikus és potenciális energiája nem számítandó bele. Mivel a termodinamikai folyamatok jellemzése szempontjából amúgy is csak a belső energia megváltozásai érdekesek, így ebben a részben más lehetséges energiafajták létezésétől eltekinthetünk. Fontos megjegyezni, hogy a munkavégzés és a hőközlés nem energia, hanem az energiaátadás két különböző módja.

A W munkatagban eredetileg csak a mechanikai kölcsönhatást vettük figyelembe, ezért igen egyszerű alakot öltött:

$$W = -p\Delta V. \quad (\text{III.57})$$

A negatív előjel azért szükséges, mert megállapodás szerint a munkatag akkor pozitív, ha a rendszer belső energiája növekszik a kölcsönhatás révén. Összenyomáskor viszont – ami a belső energianövekedésnek megfelelő eset – a térfogat csökken, tehát $\Delta V = V_2 - V_1$ negatív, amit a negatív előjellel tudunk visszafordítani.

A (III.57) összefüggés mintájára, illetve annak a ténynek az ismeretében, hogy az összetartozó intenzív és extenzív mennyiségek szorzata energia dimenziójú, felírhatjuk a többi kölcsönhatáshoz (elektromos, anyagi) tartozó munkatagot is:

$$(W_v = -p\Delta V), \quad W_Q = \varphi\Delta Q, \quad W_\nu = \mu\Delta\nu. \quad (\text{III.58})$$

Ennek alapján megadhatjuk a rendszerben előforduló akármelyik kölcsönhatáshoz tartozó munkatagot teljesen általános formában:

$$W^{(i)} = y_{\text{int}}^{(i)} \Delta x_{\text{ext}}^{(i)}, \quad (\text{III.59})$$

ahol $W^{(i)}$ a rendszer i -edik kölcsönhatása miatt fellépő belső energiaváltozás, $y_{\text{int}}^{(i)}$ a kölcsönhatást jellemző intenzív mennyiség értéke a rendszerben, $\Delta x_{\text{ext}}^{(i)}$ pedig a jellemző extenzív mennyiség megváltozása a folyamat során.

Így a termodinamika első főtételét leíró egyenletben (III.56) az általánosítások elvégzése után Q_E a termikus kölcsönhatással kapcsolatos energiaváltozást jelenti, míg W a többi lehetséges kölcsönhatáshoz tartozó energiaváltozás (munkatag) összege. Látható, hogy a termikus kölcsönhatás kitüntetett szerepe továbbra is megmaradt. Ennek szembevetendő okát a III.5. táblázat második oszlopából olvashatjuk ki: ugyanis a termikus kölcsönhatásnál „tiszta” csak a belső energia áramlik, a többi kölcsönhatásnál viszont mindig valamilyen más jellemző extenzív mennyiséggel együtt történik az energiaáramlás.

3.3.2. III/3.3.2. A kémiai potenciál és az elektrokémiai potenciál

A munkatagok általános alakjának ismeretében a jellemző intenzív mennyiségek egy új tulajdonságát is megadhatjuk. A (III.59) összefüggés szerint az $y_{int}^{(i)}$ jellemző intenzív mennyiség egy arányossági tényező, amelynek számértéke megadja, hogy a hozzá tartozó $x_{ext}^{(i)}$ jellemző extenzív mennyiség egységnyi megváltozásakor a belső energia mennyit változik.

Ennek felhasználásával az eddig jobbra csak formálisan használt **kémiai potenciál** (μ) jelentésére is rávilágíthatunk. Eszerint a rendszer valamely elektromosan semleges részének (komponensének) kémiai potenciálja megegyezik a rendszer energiájának megváltozásával, miközben a rendszerben ennek a résznek (komponensnek) az anyagmennyisége egy móllal megnő. Az új töltetlen részecskék megjelenése ugyanis megnöveli a rendszerben a mozgási energiát, és a többi részecskével való lehetséges, például Van der Waals-kölcsönhatások kialakulása miatt a helyzeti energia is megváltozhat (lásd III.10. megjegyzés és III.1. példa). (A fentiek alapján a III.5. táblázattal kapcsolatban felmerülő kérdésre – nevezetesen hogy mi a kapcsolat a kémiai potenciál és a koncentráció között – még nem tudunk választ adni. Erre majd a III/3.4.5. részben fogunk kitérni.)

III.10. megjegyzés. A jobb érthetőség kedvéért megjegyezzük, hogy a **kémiai potenciál** nagyon hasonló az **elektromos potenciál** jól ismert fogalmához. Valamely rendszer elektromos potenciálja ugyanis számszerűleg megegyezik azzal a munkával, amelyet az egységnyi töltésen végzünk, miközben végtelen távolból a rendszerbe hozzuk. A két megfogalmazás tehát azonos elveken nyugszik, de az elektromos esetben elsősorban a rendszer helyzeti (elektrosztatikus) energiája változik meg a töltések közti elég erős Coulomb-kölcsönhatás miatt. Így ha a töltést elektronok szállítják, akkor az elektron igen kis tömege miatt a rendszer mozgási energiájának növekedése elhanyagolható a helyzeti energia változása mellett. Ha azonban a töltésáramlást ionok közvetítik, akkor ezt az elhanyagolást már nem tehetjük meg.

III.1. példa. Ha a levegő páratartalma olyan nagy, hogy (az adott hőmérsékleten és nyomáson) a légnemű víz **kémiai potenciálja** nagyobb, mint a folyékony állapotúé, a pára egy része eső formájában lecsapódik. Fordított esetben a folyékony állapotú víz párolog.

Az ionok árama egyidejű anyagi és elektromos kölcsönhatást jelent, ezért az egyszerűbb leírás kedvéért célszerű a két kölcsönhatás munkatagját összevonni:

$$W_{v,Q} = W_v + W_Q = \mu \Delta v + \varphi \Delta Q. \quad (\text{III.60})$$

A töltésmennyiség és a mólok száma viszont nem független egymástól, hiszen a v mól z értékű iontöltése $Q = zFv$, ahol F a Faraday-állandó. Ezt behelyettesítve a (III.60) összefüggésbe megkapjuk az összevont kölcsönhatás munkatagját (mivel z és F is állandó ezért kiemelhetők):

$$W_{v,Q} = \mu \Delta v + \varphi \Delta(zFv) = (\mu + zF\varphi) \Delta v, \quad (\text{III.61})$$

Figyelembe véve a munkatagok általános felírását (lásd a (III.59) összefüggést) az összevont kölcsönhatásra jellemző intenzív mennyiség a munkatag arányossági tényezője az ún. **elektrokémiai potenciál** (μ_e):

$$\mu_e = \mu + zF\varphi. \quad (\text{III.62})$$

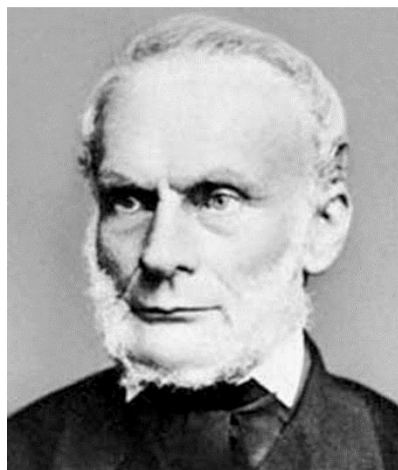
A membránokon keresztül történő transzportfolyamatok tárgyalásánál sokszor találkozunk majd ezzel a fogalommal, mint az ionáramlás jellemző intenzív mennyiségével (lásd a III/4. részt).

3.3.3. III/3.3.3. A termodinamika második főtétele és az entrópia

Tapasztalatból tudjuk, hogy hideg vízzel le tudjuk hűteni a felmelegedett testeket. A tetőről leeső cserép széttörik, majd darabkái nyugalomba jutnak. Jóllehet a termodinamika első főtétele nem zárja ki annak

lehetőségét, hogy az ilyen és ehhez hasonló spontán folyamatok ellenkező irányba is lejátszódjanak, mégsem találkozunk velük. Azt mondhatjuk, hogy a spontán folyamatok nem megfordíthatók, irreverzibilisek.

Ezt a tapasztalati tényt fogalmazza meg a termodinamika második főtétele: izolált rendszerekben önmaguktól csak olyan folyamatok játszódnak le, amelyek során az egyes kölcsönhatásokat jellemző intenzív mennyiségek kiegyenlítődni igyekeznek. Ez a kvalitatív megfogalmazás kvantitatívva tehető egy új fogalom, az **entrópia** segítségével (Clausius).



Az entrópia Rudolf Julius Emmanuel Clausius (1822–1888) német fizikus által a „megfordítani” görög igéből alkotott szó. (A szó leginkább arra utal, hogy mi az a meg nem fordítható energia, amely mindenképpen hővé alakul.)

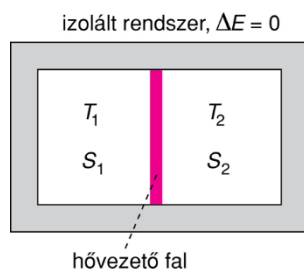
Az első főtétel kapcsán már említettük a termikus kölcsönhatás különlegességét. Nevezetesen azt, hogy ott a minden más kölcsönhatásnál is meglévő energiaáramláson kívül más jellemző extenzív mennyiség áramlás nem történik (legalábbis a makroszkopikus mérések erre utalnak). Azért, hogy ezt az „anomáliát” megszüntessük, és hogy az összes kölcsönhatást egységesen tárgyalhassuk, (Fényes Imre gondolatait követve) formálisan a termikus kölcsönhatáshoz is rendeljünk egy jellemző extenzív mennyiséget. Nevezzük ezt entrópiának és jelöljük S -sel. Az ebből adódó új munkatagot a (III.59) általános összefüggés alapján a következő formában adhatjuk meg:

$$Q_E = T\Delta S, \quad (\text{III.63})$$

következésképpen az entrópia mértékegysége J/K. Most már az első főtétel egységes felírásának sincs akadálya:

$$\Delta E = \sum_{(i)} y_{\text{int}}^{(i)} \Delta x_{\text{ext}}^{(i)}. \quad (\text{III.64})$$

Annak érdekében, hogy az entrópiát eredeti célunknak megfelelően a második főtétel kvantitatív megfogalmazására használhassuk, vizsgáljuk meg, hogy **hogyan változik az entrópia a spontán kiegyenlítődni folyamat során**. Az egyszerűség kedvéért tekintsünk egy izolált rendszert, amelyet egy hővezető fallal két részrendszerre osztottunk, így csak a hőmérséklet-kiegyenlítődést kell nyomon követnünk (III.19. ábra).



III.19. ábra. Hővezető fallal kettéválasztott izolált rendszer

Legyen a részrendszerek hőmérséklete a folyamat kezdetén $T_1 \neq T_2$, entrópiájuk S_1 és S_2 , belső energiájuk E_1 és E_2 . Mivel a rendszer izolált, ezért belső energiája állandó, tehát

$$\Delta E = \Delta(E_1 + E_2) = \Delta E_1 + \Delta E_2 = 0. \quad (\text{III.65})$$

A (III.64) összefüggés alapján írjuk fel a részrendszerekre az első főtételt, ami ebben az esetben csak egyetlen munkatagból áll, hiszen a hővezető fal csak a termikus kölcsönhatást teszi lehetővé:

$$\Delta E_1 = T_1 \Delta S_1, \quad \Delta E_2 = T_2 \Delta S_2. \quad (\text{III.66})$$

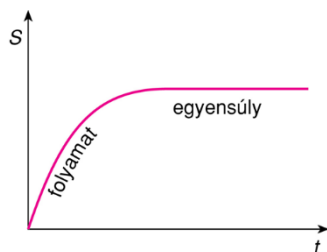
Tekintettel arra, hogy az entrópia extenzív mennyiség az egész rendszer entrópiaváltozása $\Delta S = \Delta S_1 + \Delta S_2$, azaz:

$$\Delta S = \frac{\Delta E_1}{T_1} + \frac{\Delta E_2}{T_2} = \Delta E_1 \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right), \quad (\text{III.67})$$

ahol az utolsó lépésben felhasználtuk a (III.65) összefüggést is.

A spontán kiegyenlítődés szempontjából kétféle kiindulási esetet kell megvizsgálnunk: $T_1 > T_2$, illetve $T_1 < T_2$. Ha kezdetben $T_1 > T_2$, akkor az 1-es részrendszer lehül a folyamat során, tehát belső energiája csökken, azaz $\Delta E_1 < 0$, ugyanakkor $(1/T_1 - 1/T_2) < 0$. Eszerint a (III.67) összefüggés jobboldalán két negatív érték szorzata áll, ami pozitív, tehát $\Delta S > 0$. Fordított esetben, ha $T_1 < T_2$, akkor az 1-es részrendszer felmelegszik, így belső energiája nő, azaz $\Delta E_1 > 0$, de ilyenkor az $(1/T_1 - 1/T_2)$ kifejezés is pozitív. Két pozitív érték szorzata viszont szintén pozitív, tehát $\Delta S > 0$ ismét teljesül. Következésképpen **izolált rendszerben hőmérséklet-kiegyenlítődés során a rendszer entrópiája mindenképp növekszik**. Egyensúly esetén $T_1 = T_2$, ilyenkor a (III.67) összefüggés jobb oldala nulla, ezért $\Delta S = 0$. Az adott folyamatot tehát az entrópiaváltozás jól jellemzi. A folyamat során az entrópia növekszik, majd az egyensúly beálltakor állandó értéket vesz föl (III.20. ábra). Ezzel sikerült a termodinamika második főtételét kvantitatív formába önteni.

Hasonlóan megmutatható (bár kicsit több számolással), hogy izolált rendszerben lejátszódó tetszőleges kiegyenlítődési folyamat során is (amikor nincs fal a részrendszerek között, tehát mindenféle kölcsönhatás megengedett) a rendszer entrópiája növekszik. Az **entrópia** ezek szerint **nem megmaradó** mennyiség.



III.20. ábra. Az entrópia mint a folyamatokat jellemző mennyiség (az idő függvényében)

3.3.4. III/3.3.4. Az entrópia statisztikus bevezetése

Az előző részben elmondottak szerint az entrópia egy formálisan bevezetett extenzív mennyiség, amely a különböző kölcsönhatások egységes tárgyalását biztosítja. Változása az izolált rendszerekben lezajló folyamatok irányát, a kiegyenlítődési tendenciát jellemzi. Makroszkopikus mérések nem is utalnak a létére.

Mikroszkopikus (atomi vagy molekuláris) szinten azonban ennek az entrópia fogalomnak egy szemléletesebb fizikai jelentése is megadható. Olyan mennyiséget kell találnunk, amely a kiegyenlítődési folyamatok során az entrópiához hasonlóan viselkedik, és így közvetlen kapcsolatba hozható vele.

Mivel az új mennyiséget most mikroszkopikus szinten keressük, először tekintjük át a kétféle (makroszkopikus, illetve mikroszkopikus) leírásból származó különbségeket. (Ezt a problémát már érintettük a I/3.1. részben a Boltzmann-eloszlás kapcsán.)

Egy **mikroállapot** megadása azt jelenti, hogy a vizsgált rendszer összes részecskéjének jellemző mikroszkopikus paramétereit (például helyét, sebességét) ismerjük. (Makroszkopikus testek esetében ez természetesen csak képzeletben lehetséges.) Egy **makroállapot** megadásához viszont a makroszkopikus állapot

jellemzésére szolgáló makroszkopikus paraméterek (például a hőmérséklet, nyomás, sűrűség stb.) eloszlását kell ismernünk. Egyensúlyi állapotban ezek az eloszlások homogének, ilyenkor az extenzív és intenzív mennyiségek egyértelmű kapcsolatban vannak egymással (lásd III/3.2.2. rész, állapotegyenlet).

Ugyanazt a makroállapotot általában nagyon sok mikroállapot képes megvalósítani. (Gondoljuk csak meg, hogy például ideális gázban a hőmérséklet csak a részecskék sebességnégyzetének átlagától függ tehát, ha két részecske energiáját elméletben felcseréljük, az nem okoz a korábbtól eltérő hőmérsékletet.) Ennek alapján elvileg léteznek valószínűbb és kevésbé valószínű makroállapotok, de joggal feltételezhetjük, hogy a legvalószínűbb (egyensúlyi) állapot valósul meg (lásd a III.2. példát). Ha feltételezzük azt is, hogy az egyes mikroállapotok egyformán valószínűek, akkor a legvalószínűbb makroállapot az lesz, amelyhez a legtöbb mikroállapot tartozik. Az egy makroállapothoz tartozó mikroállapotok számát **termodinamikai valószínűségnek** nevezzük és Ω -val jelöljük. (Lásd „A hőmérséklet-kiegyenlítő és a termodinamikai valószínűség kapcsolata.”)

(Ez csak abban tér el a megszokott matematikai valószínűségtől (P -tól), hogy értékei a $(0-1)$ intervallum helyett az $(1-Z)$ intervallumba esnek, ahol Z az összes lehetséges mikroállapot számát jelenti, így $P = \Omega/Z$).

A fentiek alapján belátható, hogy a termodinamikai valószínűség a hőmérséklet-kiegyenlítő folyamatban nő, így kézenfekvő feltételezés, hogy az entrópiának valamilyen közvetlen (monoton növekvő) kapcsolatban kell lennie a termodinamikai valószínűséggel. Jelöljük ezt a kapcsolatot az alábbi módon:

$$S = f(\Omega), \quad (\text{III.68})$$

ahol f -ről egyelőre csak annyit tudunk, hogy Ω -nak monoton növekvő függvénye. Az entrópia extenzív mennyiségként volt bevezetve, tehát azt is tudjuk róla, hogy a részrendszerek entrópiájának összege egyenlő a teljes (egyesített) rendszer entrópiájával. Modellünkben ez azt jelenti, hogy $S_A + S_B = S_{AB}$ és a (III.68) összefüggés felhasználásával:

$$f(\Omega_A) + f(\Omega_B) = f(\Omega_{AB}), \quad (\text{III.69})$$

ugyanakkor korábban már megmutattuk, hogy a részrendszerekben a mikroállapotok száma független egymástól, ezért

$$\Omega_A \Omega_B = \Omega_{AB} \quad (\text{III.70})$$

is teljesül. A két összefüggés (III.69) és (III.70) csak akkor lehet igaz egyszerre, ha az f függvénykapcsolat logaritmikus (szorzat logaritmusá ugyanis egyenlő a tényezők logaritmusának összegével):

$$S \sim \log \Omega. \quad (\text{III.71})$$

Azért, hogy a korábbi megállapításainkkal is összhangban maradjunk, a két mennyiséget ugyanabban a mértékegységben kell kifejeznünk, az entrópia tehát:

$$S = k \cdot \ln \Omega. \quad (\text{III.72})$$

ahol k a Boltzmann-állandó ($k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K). (Megjegyezzük, hogy a Boltzmann-állandóra csak azért van szükség, mert az entrópia mértékegységét korábban (az energia és a hőmérséklet önkényesen választott mértékegysége alapján) már rögzítették (J/K). Egyébként a (III.72) összefüggés Boltzmann munkásságának kiemelkedő teljesítménye, sírkövére is ezt íratta, lásd III.21. ábra.)



III.21. ábra. Boltzmann síremléke a híres összefüggéssel. (Itt W jelenti a termodinamikai valószínűséget, amit mi Ω -val jelöltünk, hogy még véletlenül se lehessen összetéveszteni a munkatagokkal)

III.2. példa. Mekkora a valószínűsége (P) annak, hogy egy teremben a gázmolekulák sűrűségeloszlása olyan, hogy csak az egyik fél térrészben van levegő?

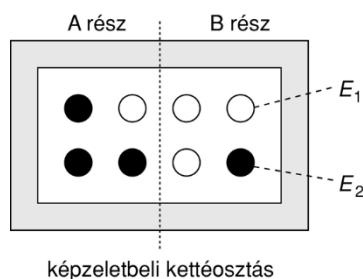
Az egyensúlyi, egyenletes eloszlás esetén a molekulák véletlenül vannak szétosztva, ami annak felel meg, hogy például pénzfeldobással döntünk arról, hogy melyik molekula melyik térrészbe kerüljön. A feltett esetben annak kell teljesülnie, hogy a nagyjából Avogadro-számnyi (NA) ismételt pénzfeldobás eredménye mindig ugyanaz, mondjuk fej legyen. Egy feldobás esetén ennek $(1/2)$ a valószínűsége, két feldobásnál:

$$P = (1/2)(1/2) = (1/4),$$

$$N \text{ dobásnál } P = (1/2)^N.$$

Ez azt jelenti, ha $N = NA$, akkor P egy olyan kicsi szám, hogy tizedes törtben kifejezve a tizedes pont után még több mint 23 nulla áll az első értékes jegy előtt, ezért ilyen eset gyakorlatilag nem fordulhat elő.

A hőmérséklet-kiegyenlítődés és a termodinamikai valószínűség kapcsolata



Az izolált kristály modellje

Tekintsünk egy nyolc rácspontból álló egyszerűsített kristályt (lásd az ábrán). Minden rácspont betöltött és a rácspontokban tartózkodó részecskének két különböző energiájú állapotuk van ($E_1 < E_2$). A részecskék között csak termikus kölcsönhatás lehetséges, tehát csak energiát cserélhetnek egymással. Az egész kristály legyen izolálva a környezetétől, és a részecskék fele-fele arányban legyenek az E_1 , illetve E_2 energiájú állapotban (így a rendszer összenergiája $4E_1 + 4E_2 = \text{állandó}$). Képzeltben osszuk a kristályt két részrendszerre, és jelöljük őket A-val, illetve B-vel. Ezen a modellen makroszkopikus és mikroszkopikus szinten is tanulmányozhatjuk a hőmérséklet-kiegyenlítődés folyamatát.

Az ekvipartíció tételéből tudhatjuk, hogy átlagosan minden részecskére ugyanannyi energia jut, így mivel modellünkben mindkét részrendszerben azonos a részecskék száma, ezért a részrendszer hőmérséklete arányos a részrendszer összenergiájával ($T \sim E_0$). A lehetséges értékek:

$$T_1 \sim (4E_1) < T_2 \sim (3E_1 + E_2) < T_3 \sim (2E_1 + 2E_2) < T_4 \sim (E_1 + 3E_2) < T_5 \sim (4E_2).$$

Az izoláltság miatt ezek a hőmérsékletek az A és B részrendszerben csak megfelelő párosításban fordulhatnak elő: (T_1, T_5) , (T_2, T_4) , (T_3, T_3) , (T_4, T_2) , (T_5, T_1) . Ily módon megadva a rendszer lehetséges „hőmérséklet-eloszlásait” definiáltuk a makroállapotait is. Az ezekhez tartozó mikroállapotokat az E_1 illetve E_2 energiájú részecskeállapotoknak a részrendszeren belüli különböző szétosztásával adhatjuk meg. Az alábbi képen összefoglaltuk a részrendszerek összes lehetséges mikroállapotát, és a makroállapotok szerint csoportosítottuk őket.

	az A rész mikroállapottai	Ω_A	T_A	a B rész mikroállapottai	Ω_B	T_B	$T_B - T_A$	$\Omega_{AB} = \Omega_A \Omega_B$
I.		1	$T_1 - 4(E_1)$		1	$T_2 - 4(E_2)$	$-4(E_2 - E_1)$	1
II.		4	$T_2 - 3(E_1) + (E_2)$		4	$T_4 - 3(E_2) + (E_1)$	$-2(E_2 - E_1)$	16
III.		6	$T_3 - 2(E_1) + 2(E_2)$		6	$T_3 - 2(E_2) + 2(E_1)$	0	36
IV.		4	$T_4 - (E_1) + 3(E_2)$		4	$T_2 - (E_2) + 3(E_1)$	$-2(E_2 - E_1)$	16
V.		1	$T_2 - 4(E_2)$		1	$T_1 - 4(E_1)$	$-4(E_2 - E_1)$	1

Az első sorban azt az állapotot tüntettük föl, amikor az A részrendszer az adott feltételek mellett a leghidegebb, a B pedig a legmelegebb. A hőmérséklet-különbség, $T_B - T_A \sim 4(E_2 - E_1)$. Ez a makroállapot (I.) csak egyféleképpen valósítható meg, így $\Omega_{AB} = 1$.

A második sorban feltüntetett állapotok esetében a hőmérsékletkülönbség már kisebb, $T_B - T_A \sim (3E_2 + E_1) - (3E_1 + E_2) = 2(E_2 - E_1)$, épp az előző fele. Ezt a makroállapotot már több mikroállapot is megvalósíthatja. Ahhoz, hogy az egész rendszer egy mikroállapotát megkapjuk az A rész egy mikroállapotához hozzá kell vennünk a B rész egy mikroállapotát. Mivel bármelyiket bármelyikkel összepárosíthatjuk, ezért $\Omega_{AB} = \Omega_A \Omega_B = 4 \cdot 4 = 16$ (II.).

A harmadik sorban feltüntetett állapotok esetében a hőmérséklet-különbség 0, és ez a makroállapot $6 \cdot 6 = 36$ -féle módon valósítható meg, így $\Omega_{AB} = 36$ (III.).

A negyedik és ötödik sor a második és az első megfordítottja, tehát a hőmérséklet-különbség abszolút értékben ismét nő, a mikroállapotok száma, azaz a termodinamikai valószínűség (Ω_{AB}) pedig csökken (IV. V.).

Összefoglalva, modellünkben a következő tanulságok vonhatók le:

- a modell mint termodinamikai rendszer izolált,
- a részrendszerek között csak belső energia áramlik (termikus kölcsönhatás),
- a második főtétel szerint ilyen esetben a hőmérséklet-kiegyenlítődés irányában mennek végbe a folyamatok, miközben a formálisan bevezetett entrópia növekszik,
- a táblázatból látható, hogy a modellben a hőmérséklet-kiegyenlítődés együtt jár a rendszer termodinamikai valószínűségének (Ω_{AB}) növekedésével.

Találtunk tehát egy mennyiséget, amely a hőmérséklet-kiegyenlítődési folyamatban az entrópiához hasonlóan növekszik és megváltozása során, a belső energián kívül, semmilyen más extenzív mennyiség nem változik a rendszerben.

3.3.5. III/3.3.5. Az új entrópia fogalom néhány következménye, a termodinamika harmadik főtétele

Tekintettel arra, hogy a termodinamikai valószínűség pontos fizikai tartalommal bír, ezért a (III.72) összefüggésen keresztül az eredetileg formálisan bevezetett entrópia fogalomnak is van fizikai jelentése. Hétköznapi szóhasználatban azt szokás mondani, hogy **az entrópia az anyagi rendszerekben a molekuláris rendezetlenség mértéke**.

A rendezetlenség azonban félreérthető fogalom, így **helyesebb**, ha inkább **valószínűtlenebb** (vagy kevésbé valószínű) és **valószínűbb állapotokról** beszélünk. Persze ha egy makroállapot realizálása nagyon határozott

(rendezett) mikroszkopikus struktúrát követel, akkor az ezt megvalósító mikroállapotok száma (termodinamikai valószínűsége) érthetően kicsi.

Az előző (III/3.3.4.) részben már említettük, hogy egy makroállapot matematikai valószínűsége és termodinamikai valószínűsége arányos egymással, így a (III.72) egyenlőség alapján:

$$P \sim \Omega = e^{\frac{S}{k}}. \quad (\text{III.73})$$

Ennek felhasználásával két (makro) állapot valószínűségének arányát is kifejezhetjük, ami az entrópiák különbségével adható meg:

$$\frac{P_i}{P_j} = \frac{\Omega_i}{\Omega_j} = \frac{e^{\frac{S_i}{k}}}{e^{\frac{S_j}{k}}} = e^{\frac{S_i - S_j}{k}}. \quad (\text{III.74})$$

(Csak emlékeztetünk arra, hogy a mikroállapotok alapfeltevésünk szerint egyformán valószínűek.) Ebből a (III.74) kifejezésből az is kiderül, hogy minden olyan esetben, amikor S_i és S_j (makroszkopikus mérésrel mérve) észrevehetően különböznek egymástól, a kitevő abszolút értékben egy igen nagy szám (Avogadro-szám nagyságrendű), mivel k igen kicsiny a makroszkopikus entrópiához képest. Ez azt jelenti, hogy ilyen esetekben a kisebbik entrópiájú állapot valószínűsége gyakorlatilag elhanyagolható a nagyobbikéhoz képest (vö. a III.2. példával). Az ennek megfelelő általános állítást úgy is megfogalmazhatjuk, hogy az **entrópia magától soha nem csökken**, ami ekvivalens a termodinamika második főtételével. Itt jegyezzük meg, hogy Boltzmann munkásságának egy másik nagy eredménye a róla elnevezett (az I/3.3.3. részben részletesebben tárgyalt) eloszlásfüggvény elméleti megalapozása ugyanezekből az elvekből származtatható (lásd *Az entrópia és a Boltzmann-eloszlás*).

A (III.72) összefüggés segítségével az is egyszerűen belátható, hogy **egykomponensű kristályosodó anyag entrópiája 0 K hőmérsékleten 0**. Ha ugyanis a hőmérséklet 0 K, akkor a kristályban nem keletkeznek termikus ponthibák (lásd Boltzmann-eloszlás I/3.3.3. rész), tehát a kristály hibamentes, teljesen szabályos, és mivel csak egy komponensből épül fel, ezért ez az állapot csak egyféleképpen valósulhat meg. Ehhez a makroállapotához tehát csak egyetlen mikroállapot tartozik, azaz $\Omega = 1$, és így az entrópia:

$$S = k \cdot \ln 1 = 0. \quad (\text{III.75})$$

A bekezdés vastagon szedett része nem más, mint a **termodinamika harmadik főtételének** egyik megfogalmazása.

Az entrópia és a Boltzmann-eloszlás

A (III.74) összefüggés segítségével azt is megmondhatjuk, hogy hányszor kisebb annak a valószínűsége, hogy egy egyensúlyi termodinamikai rendszerben egy kiválasztott részecske egy kisebb energiájú (ϵ_1) állapot helyett egy nagyobb energiájú (ϵ_2) állapotban legyen ($\epsilon_2 > \epsilon_1$). Tudjuk, hogy termikus egyensúlyban a rendszer hőmérséklete, illetve energiája állandó. Így a kiszemelt részecske azért lesz kisebb valószínűséggel a nagyobb energiájú (ϵ_2) állapotban, mert ehhez energiát kell nyernie a többiektől, ami viszont csökkenti a többi részecske összességének energiáját és ezzel entrópiáját is. Emiatt a kiválasztott részecske nagy energiájú (ϵ_2) állapotához kisebb termodinamikai valószínűség tartozik, azaz $\Omega(\epsilon_2) < \Omega(\epsilon_1)$.

A (III.74) összefüggés szerint

$$\frac{\Omega(\epsilon_2)}{\Omega(\epsilon_1)} = e^{\frac{\Delta S}{k}},$$

ahol ΔS az entrópiacsökkenést jelöli, tehát negatív. Ha a rendszerben csak energiacsere történhet, akkor

$$\Delta S = - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{T}$$

($\epsilon_2 > \epsilon_1$), így

$$\frac{P(\epsilon_2)}{P(\epsilon_1)} = e^{-\frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{kT}}.$$

Ez a kifejezés nem más, mint a Boltzmann-eloszlás egy lehetséges felírása (vö. I/3.1.1. rész (I.25) összefüggés), hiszen a kisebb valószínűségű állapot ezzel arányosan kevésbé is van betöltve, azaz

$$\frac{P(\epsilon_2)}{P(\epsilon_1)} = \frac{n(\epsilon_2)}{n(\epsilon_1)},$$

ahol $n(\epsilon_2)$, $n(\epsilon_1)$ a betöltési számokat jelöli.

Az entrópiaváltozás néhány speciális esetben

A (III.72) összefüggés arra is alkalmas, hogy néhány speciális esetben viszonylag egyszerűen meghatározzuk az entrópia változást, amit a későbbiek során még felhasználunk (lásd a III/3.4.5. részt).

A kevésbé kölcsönható rendszerek modellezésére kiválóan alkalmas az ideális gáz, amelyben a részecskék egymástól teljesen függetlenek. Megfelelő feltételek teljesülésekor (például híg oldatokban) ez a közelítés jól modellezi a valós eseteket is.

Entrópiaváltozás izoterm táguláskor

Ha egy V térfogatú edényben egyetlen részecske tartózkodik, akkor a „rendszer” mikroállapotainak száma ($\Omega_{(1)}$) arányos a térfogattal: $\Omega_{(1)} = a(T) \cdot V$, ahol a egy arányossági tényező, amely a hőmérséklet függvénye. Ha az edény N db részecskét tartalmaz, akkor a rendszer mikroállapotainak száma ($\Omega_{(N)}$) a (III.70) összefüggés alapján:

$$\Omega_{(N)} = \Omega_{(1)}^N = [a(T) \cdot V]^N,$$

ahol feltettük, hogy a részecskék egymástól függetlenül mozognak. Így a (III.72) összefüggés alapján az entrópiaváltozás, miközben a rendszer térfogata állandó hőmérsékleten V_1 -ről V_2 -re változik:

$$\Delta S = S_2 - S_1 = k \ln \Omega_2 - k \ln \Omega_1 = k \ln \frac{\Omega_2}{\Omega_1} = k \ln \left[\frac{a(T) \cdot V_2}{a(T) \cdot V_1} \right]^N = kN \ln \frac{V_2}{V_1} = Rv \ln \frac{V_2}{V_1}, \quad (1)$$

ahol az utolsó lépésben az Avogadro-számmal szoroztunk, illetve osztottunk. A fenti kifejezésből látható, hogy izoterm táguláskor ($V_2 > V_1$) a rendszer entrópiája növekszik.

Entrópiaváltozás izoterm keveredéskor

Tekintsünk egy hővezető fállal kettéosztott edényt, amelynek az egyik V_A térfogatú részében N_A db A típusú részecske, a másik V_B térfogatú részében pedig N_B db B típusú részecske található. A hővezető fal miatt a két térrészben a hőmérséklet megegyezik. Ha kivesszük az elválasztó falat megindul a keveredés. A végállapot az lesz, hogy mind az A, mind a B típusú részecskék V_A , illetve V_B térfogat helyett $V = V_A + V_B$ térfogatú helyen oszlanak el. Felhasználva az izoterm tágulás eredményét (lásd (1) összefüggés) mindkét molekulatípusra, az entrópiaváltozás:

$$\Delta S = \Delta S_A + \Delta S_B = Rv_A \ln \frac{V}{V_A} + Rv_B \ln \frac{V}{V_B}. \quad (2)$$

Látható, hogy az entrópia izoterm keveredéskor is növekszik, hiszen $V > V_A$ és $V > V_B$. (Természetesen a részecskék függetlenségét itt is kihasználtuk.)

3.4. III/3.4. A termodinamikai potenciálfüggvények

A rendszer belső energiája ismert termodinamikai fogalom, ami egyben jó példa termodinamikai potenciálfüggvényre is. Nézzük meg, hogy mik azok a tulajdonságok, amik alapján ezt elmondhatjuk róla. A termodinamika első főtételével kapcsolatban hangsúlyozni szokták, hogy **a belső energia megváltozását a rendszer kezdeti és végállapota egyértelműen meghatározza**. Így ebből a szempontból annak, hogy a

rendszer milyen úton, azaz milyen állapotok sorozatán haladt végig, nincs jelentősége. Az ilyen típusú energiát hívjuk általánosan **potenciális** (vagy helyzeti) **energiának**. Azt is mondhatjuk, hogy a belső energia független változóinak állapotfüggvénye. Ugyanez nem mondható el a rendszerrel közölt hőről (QE), illetve a rendszeren végzett munkáról (W) (lásd III.1, emlékeztető). Tudjuk például, hogy egy adott mennyiségű gáz adott hőmérséklettel való felmelegítéséhez különböző mennyiségű hő szükséges attól függően, hogy azt állandó nyomáson vagy állandó térfogaton végezzük.

III.1. emlékeztető. A belső energia megváltozása, a termodinamika első főtételének korábbi tanulmányokból ismert alakja:

$$\Delta E = Q_E + W$$

és egységes felírása:
$$\Delta E = \sum_{(i)} y_{\text{int}}^{(i)} \Delta x_{\text{ext}}^{(i)} \quad (\text{III.64})$$

Egyszerűbb jelöléssel:

$$\Delta E = \sum_{(i)} y^{(i)} \Delta x^{(i)}.$$

A III/3.3.3. rész (III.64) összefüggés alapján a belső energia, mint az extenzív mennyiségektől függő állapotfüggvény [$E(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, \dots)$] arra is alkalmas, hogy belőle az $y^{(i)}(x^{(i)})$ állapotfüggvényeket megkapjuk. (Az $_{\text{ext}}$ és $_{\text{int}}$ alsó indexeket az egyszerűbb jelölés kedvéért a továbbiakban már sehol sem írjuk ki.) Konkrétabban, amikor például $x^{(1)} = S$ (entrópia), $x^{(2)} = V$ (térfogat), $x^{(3)} = v$ (anyagmennyiség), akkor a (III.64) összefüggés a következő formát ölti:

$$\Delta E = T\Delta S - p\Delta V + \mu\Delta v, \quad (\text{III.76})$$

tehát

a hőmérséklet,
$$T = \frac{\Delta E}{\Delta S}, \text{ ha } \Delta V = 0 \text{ és } \Delta v = 0,$$

a negatív nyomás,
$$-p = \frac{\Delta E}{\Delta V}, \text{ ha } \Delta S = 0 \text{ és } \Delta v = 0,$$

a kémiai potenciál,
$$\mu = \frac{\Delta E}{\Delta v}, \text{ ha } \Delta S = 0 \text{ és } \Delta V = 0. \quad (\text{III.77})$$

Látható tehát, hogy egy ilyen potenciálfüggvény (potenciális energia), jelen esetben a belsőenergia-függvény [$E(S,V,v)$] ismeretében fontos termodinamikai paramétereket (T , p , μ) nyerhetünk. (Ezek belőle egyszerű számolással megkaphatók).

Bár a belső energia mint termodinamikai potenciálfüggvény [$E(S,V,v)$] a gyakorlatban is jól alkalmazható, használatának sok esetben kényelmetlenségei vannak. Az egyik például az, hogy közvetlenül nem mindig mérhető. Egy másik, hogy a független változói (S,V,v) sem a legmegfelelőbb, a kísérletekben már megszokott egyszerűen mérhető mennyiségek, amelyeknek például az állandó értéken való tartása nem igényel külön beavatkozást. Ebből a szempontból az entrópia (S) és a térfogat (V) helyett gyakran az intenzív párjuk, a hőmérséklet (T) és a nyomás (p) sokkal alkalmasabb lenne. Mindezek miatt célszerű olyan újabb termodinamikai potenciálfüggvényeket bevezetni, amelyekben ezeket a problémákat már kiküszöböltük.

Induljunk ki az

$$E = \sum_{(i)} y^{(i)} x^{(i)} \quad (\text{III.78})$$

általános összefüggésből, ahol a termodinamikai kölcsönhatások mindegyikéhez hozzárendeltünk egy-egy energiafajtát. Ezek szerint a belső energia is (a belső energia változásához, ΔE -hez hasonlóan) annyi tagból tevődhet össze, ahányféle kölcsönhatásban a vizsgált rendszer részt vehet. Ahogyan a

$W^{(i)} = y^{(i)} \Delta x^{(i)}$ **munkavégzés** (energiaváltozás) az i -edik fajta kölcsönhatás révén történhet meg, ugyanúgy $E^{(i)} = y^{(i)} x^{(i)}$ a **belső energiának** az a **része**, amelyik lehetőséget biztosít erre a munkavégzésre. A hasonlóságok ellenére a két mennyiséget nem szabad összetéveszteni. Fontos észrevenni, hogy, az energiatag megváltozása ($\Delta E^{(i)}$) (lásd III.11. megjegyzés) nem azonos a megfelelő munkataggal, hiszen

$$\Delta E^{(i)} = \Delta(y^{(i)} \cdot x^{(i)}) = y^{(i)} \Delta x^{(i)} + x^{(i)} \Delta y^{(i)} + \Delta y^{(i)} \Delta x^{(i)}.$$

(III.79)

Így mivel

$$\Delta E = \sum_{(i)} (y^{(i)} \Delta x^{(i)} + x^{(i)} \Delta y^{(i)}), \quad (\text{III.80})$$

és a termodinamika első főtételét kiindulási axiómának tekintjük, ezért a

$$\sum_{(i)} x^{(i)} \Delta y^{(i)} = 0 \quad (\text{III.81})$$

egyenlőségnek automatikusan teljesülnie kell. Az energiváltozásoknak tehát csak egyik része jelent valóságos energiaközlést, a másik rész olyan, hogy az egyes tagok összességében kompenzálják egymást. A (III.81) összefüggés a Josiah Willard Gibbs (1839–1903) amerikai matematikus és fizikokémikusról, valamint Pierre Maurice Marie Duhem (1861–1917) francia fizikus és matematikusról elnevezett **Gibbs–Duhem-reláció**.

Ezek után új termodinamikai potenciálfüggvényhez úgy juthatunk, ha a (III.78) összefüggés jobb oldalán álló összegből egy vagy több tagot, azaz egy-egy termodinamikai kölcsönhatáshoz hozzárendelt energifajtát ($E^{(i)} = y^{(i)} x^{(i)}$) átviszünk az egyenlőség bal oldalára. Egy-egy ilyen tag levonása következtében az $x^{(i)}$ független változó szerepét az $y^{(i)}$ veszi át. Az új termodinamikai potenciálfüggvény általános alakja tehát a következő:

$$E - \sum_{i=1}^k y^{(i)} x^{(i)}. \quad (\text{III.82})$$

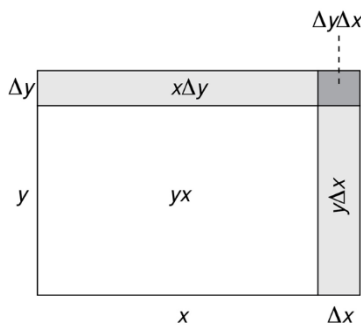
Az általános eszmefuttatás után nézzük meg konkrétan, hogy milyen előnyökkel jár egy-egy újabb termodinamikai potenciálfüggvény bevezetése.

III.11. megjegyzés

Egyetlen energiatag (ΔE_i) megváltozása (az i indexet az egyszerűség kedvéért a továbbiakban nem írjuk ki):

$$\Delta E = \Delta(y x) = (y + \Delta y)(x + \Delta x) - y x = y \Delta x + x \Delta y + \Delta y \Delta x \approx y \Delta x + x \Delta y.$$

ahol azt használtuk ki, hogy kis változás esetén a $\Delta y \Delta x$ tag elhanyagolható, ahogy azt az alábbi ábra is szemlélteti.



3.4.1. III/3.4.1. Az entalpia

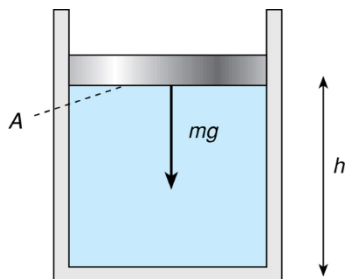
Kiindulópontunk legyen az előző részben már bemutatott konkrét eset: $x^{(1)} = S$, $x^{(2)} = V$, $x^{(3)} = v$. Ekkor a (III.78) összefüggésnek megfelelő energiák:

$$E = TS - pV + \mu v \quad (\text{III.83})$$

ahol TS a termikus, $-pV$ a mechanikai, μv az anyagi (más néven kémiai) kölcsönhatáshoz tartozik.

Vizsgáljuk meg először a mechanikai kölcsönhatást kifejező pV energiát, aminek szemléletes jelentését könnyű megmutatni (lásd III.22. ábra). (A p külső nyomás felléptének oka a probléma szempontjából lényegtelen: a nyomás származhat akármilyen más termodinamikai rendszertől, a pV „helyzeti” energia mindenképpen fellép.) Eszerint, ha egy termodinamikai rendszer a p nyomású környezettel mechanikai kapcsolatban áll, akkor pV nagyságú „potenciális” (vagy „helyzeti”) energiára tesz szert. Az együttes energia az ún. **entalpia** (H)

$$H = E + pV. \quad (\text{III.84})$$



III.22. ábra. A környezetével mechanikai kölcsönhatásban lévő rendszer speciális esete. Az A felületű m tömegű dugattyúval bezárt tartályban lévő anyagi rendszer lehet gáz vagy bármilyen rugalmasan deformálható test. A dugattyú mg erőt fejt ki, ami az A felületen $p = mg/A$ nyomást hoz létre. Ha az edény magassága h , akkor az m tömegnek az edény aljához viszonyított helyzeti energiája $mgh = pAh = pV$, ahol $V = Ah$ az edényt kitöltő test térfogata. A rendszer és a vele mechanikai kölcsönhatásban lévő test együttes energiája tehát: $E + pV$.

A (III.83) kifejezésben azonban nem pV , hanem $-pV$ szerepel (adott nyomás (p) és anyagmennyiség (v) mellett nagyobb térfogatnak kisebb belső energia felel meg). Emiatt az együttes energiát valójában (a (III.82) összefüggés szerint) úgy nyerjük, hogy a mechanikai kölcsönhatásra való képességet kifejezésre juttató $-pV$ energiát levonjuk a belső energiából (E -ből):

$$H = E - (-pV) = E + pV = TS + \mu v, \quad (\text{III.85})$$

Ebben a formában az energiaegyenlet azt jelenti, hogy a pV „potenciális” energia éppen **kompenzálja** azt a $-pV$ energiahiányt, amelyik a test térfogatváltozása folytán lép fel. A kompenzációtól függetlenül azonban a térfogat változásával az összenergia is változik. Ha a deformáció olyan lenne, hogy nem okozná más termodinamikai tulajdonságok megváltozását, a belső energia szétválasztható lenne egy mechanikai jellegű és egy nem mechanikai jellegű részre. Ez azonban sohasem fordul elő, így a szétválasztás sem lehetséges, ezért a feltételezett mechanikai jellegű energiarész csak a többivel együtt kezelhető (lásd III.12. megjegyzés).

III.12. megjegyzés. A szétválasztás elég jó közelítéssel lehetséges rugalmasan deformált szilárd testeknél (például rugók esetén), és ilyen alapon beszélhetünk a rugalmas erők potenciális energiájáról. Az azonban még ilyenkor is nyilvánvaló, hogy kompromisszumról van szó, hiszen rugalmas deformáció közben a testnek nemcsak a mechanikai adatai változnak meg, mert például a test fel is melegszik. A különböző kölcsönhatások esetén tehát nem elegendő megmondani, hogy az egyik test bizonyos kölcsönhatás révén mekkora energiát ad le, hanem azt is, hogy ugyanebben a formában a másik mennyit vesz fel.

Ezek után vizsgáljuk meg azt, hogy az entalpia, mint termodinamikai potenciálfüggvény miben különbözik a már ismert belső energiától. Az egyik fontos különbség, amiért az $E(S, V, v) \rightarrow H(S, p, v)$ transzformációt egyáltalán elvégeztük az, hogy az entalpia független változói között a térfogat (V) helyett a nyomás (p), azaz a térfogat intenzív párja szerepel.

Az entalpia megváltozása a belső energia megváltozásának ismeretében egyszerűen kifejezhető (lásd III.2. emlékeztető):

$$\Delta H = \Delta(E + pV) = [\Delta E + p\Delta V] + V\Delta p = [T\Delta S + \mu\Delta v] + V\Delta p. \quad (\text{III.86})$$

Mivel a gyakorlatban a folyamatok többnyire állandó (vagy közel állandó) nyomáson mennek végbe, ezért a $p =$ állandó eset ($\Delta p = 0$) különösen érdekes. Ekkor

$$\Delta H_p = T\Delta S + \mu\Delta v = Q_E + W_v, \quad (\text{III.87})$$

amennyiben a mólok száma sem változik ($v =$ állandó, azaz $\Delta v = 0$), akkor az entalpia éppen a hőközléssel egyenlő

$$\Delta H_{p,v} = Q_E. \quad (\text{III.88})$$

(Meg kell azonban jegyeznünk, hogy a (III.87) összefüggésből hőszigetelés esetén ($Q_E = 0$) csak a második tag marad meg, tehát ilyenkor az entalpiaváltozás az anyagi kölcsönhatáshoz tartozó kémiai munkát (például a fázisátalakulás munkáját) jelenti. Ily módon az entalpia és a hőközlés kapcsolata nem kizárólagos.)

Ha feltesszük, hogy a rendszer anyagmennyisége nem változik, általánosan azt mondhatjuk, hogy állandó nyomáson történő változások esetén $\Delta H_{p,v}$ egyenlő az átalakulási hővel (például párolgás esetén a párolgáshővel, kémiai reakció esetén a reakcióhővel). Így az a tény, hogy az entalpia állapotfüggvény, az időben sokkal korábban megfogalmazott **Hess-tétel** állításával egyenértékű.

Az entalpia és a belső energia egy másik fontos különbségére derül fény, ha megváltozásait hasonlítjuk össze. A (III.86) és a (III.76) összefüggés (lásd még III.2. emlékeztető) csak egy tagban különbözik egymástól: nevezetesen az entalpia megváltozásában (ΔH -ban) $-p\Delta V$ helyett $V\Delta p$ szerepel. Így azt is mondhatjuk, hogy az entalpiának állandó nyomáson végbemenő folyamatokban (H_p) ugyanaz a szerepe, mint a belső energiának állandó térfogaton végbemenőkben (E_v), anélkül, hogy a folyamatoktól elválaszthatatlan, de más célra **nem hasznosítható** mechanikai (térfogati) **munkát** figyelembe kellene venni (lásd a III.13. megjegyzés). Fontos azonban hangsúlyoznunk, hogy ettől még $\Delta H_p \neq \Delta E_v$, hiszen tudjuk, hogy például (állandó anyagmennyiség mellett ($v =$ állandó)) $\Delta H_{p,v}$ az állandó nyomáson, $\Delta E_{v,v}$ pedig az állandó térfogaton lejátszódó folyamatok során történő hőközléssel egyenlő, ami általában különbözik egymástól.



Germain Henry Hess (1802–1850) svájci származású, szentpétervári vegyész, a termokémia megalapítója szerint: adott kezdeti és végállapot közötti átalakulásnak megfelelő átalakulási hő összege független az átalakulás közbülső állomásaitól, csakis a kezdeti és végállapottól függ (Hess-tétel).

III.13. megjegyzés. A nem hasznosítható munkát egy példán keresztül talán szemléletesebbé tehetjük. Gondoljunk egy olyan toronydarura, amellyel éppen betonoznak. A darunak minden esetben – a beton súlyán kívül – fel kell emelnie a teherhordó horgot, valamint a beton szállítására alkalmas konténert is. Ezek emelgetése haszontalan munkavégzéssel jár, de elkerülhetetlen.

3.4.2. III/3.4.2. A szabad energia és a szabad entalpia

Az entalpia fogalmának bevezetésével egy folyamat során a **hasznosítható munkát** elválasztottuk a folyamattól elválaszthatatlan, nem hasznosítható mechanikai (térfogati) munkától oly módon, hogy ez utóbbi energiátagját mintegy „jóváíráskeppen” egyesítettük a belső energiával. A következő transzformációkkal valami hasonló vizünk véghoz a termikus kölcsönhatással kapcsolatban.

Tekintsük ismét az E , S , V , v , p , T , μ adatokkal jellemzett termodinamikai rendszert, amely ezúttal termikus kapcsolatban van a környezetével. Az előző részben a térfogat (V) változásakor az történt, hogy a $-p\Delta V$ munkát a környezet kompenzálta, emiatt lehetett az energiaváltozást az $E - (-pV)$ változásával leírni. Most a termikus kölcsönhatás során az entrópia növekedésekor közölt $T\Delta S$ hő kompenzálódik. Így az együttes energia változását az ún. **szabad energia** (F)

$$F = E - TS = -pV + \mu v \quad (\text{III.89})$$

megváltozása adja meg. Ennek a termodinamikai potenciálfüggvénynek ($F(T,V,v)$) a bevezetése Hermann Ludwig Ferdinand Helmholtz (1821–1894) német fizikus és fiziológus nevéhez fűződik, ezért gyakran **Helmholtz-féle szabad energiának** is nevezik.

A szabadenergia megváltozása az előzmények alapján így írható fel:

$$\Delta F = \Delta(E - TS) = \Delta E - T\Delta S - S\Delta T = -p\Delta V + \mu\Delta v - S\Delta T. \quad (\text{III.90})$$

A termikus kapcsolat miatt $T = \text{állandó}$, ezért:

$$\Delta F_T = -p\Delta V + \mu\Delta v = W_V + W_v, \quad (\text{III.91})$$

ami azt jelenti, hogy a szabadenergia-változás állandó hőmérsékleten és állandó anyagmennyiség esetén (tehát, ha $v = \text{állandó}$ is teljesül) a mechanikai (térfogati) munkával egyenlő

$$\Delta F_{T,v} = -p\Delta V = W_V. \quad (\text{III.92})$$

Ehhez hasonlóan változatlan hőmérséklet és térfogat mellett ($T = \text{állandó}$, $V = \text{állandó}$) viszont a kémiai munkát adja meg.

$$\Delta F_{T,V} = \mu\Delta v = W_v, \quad (\text{III.93})$$

A **szabad entalpiát** ($G(T,p,v)$), amit **Gibbs-potenciálnak** is szokás nevezni, a szabad energia mintájára származtathatjuk, azzal a különbséggel, hogy kiindulásul nem a belső energiát, hanem az entalpiát használjuk. Így

$$G = H - TS = E + pV - TS = \mu v. \quad (\text{III.94})$$

Ennek megváltozása:

$$\Delta G = \Delta(H - TS) = \Delta E + p\Delta V + V\Delta p - T\Delta S - S\Delta T = \mu\Delta v + V\Delta p - S\Delta T. \quad (\text{III.95})$$

A rendszer és a környezet termikus és mechanikai kapcsolata esetén ($T = \text{állandó}$, $p = \text{állandó}$)

$$\Delta G_{T,p} = \mu\Delta v = W_v, \quad (\text{III.96})$$

tehát ilyenkor a szabadentalpia-változás a kémiai munkával egyenlő.

A (III.94) összefüggésből a kémiai potenciál (μ) egy újabb megfogalmazását is kiolvashatjuk. Az látható ugyanis, hogy a **kémiai potenciál megegyezik** a rendszer egy móljára jutó szabad entalpiával, azaz a **moláris szabad entalpiával**.

3.4.3. III/3.4.3. A termodinamikai potenciálok változása kiegyenlítődési folyamatokban

Az előzőekben tárgyaltak alapján először azt mutatjuk meg, hogy izoterm ($T = \text{állandó}$) és izobár ($p = \text{állandó}$) kiegyenlítődési folyamatok során a rendszer szabad entalpiája csökken, és az egyensúly beálltakor minimális értéket vesz fel. Tekintsünk ezért egy egykomponensű rendszert, amelyet két részrendszerre osztottunk (1 és 2), és amelyek között minden kölcsönhatás megengedett. A kiegyenlítődési folyamat kezdetén a megfelelő kémiai

potenciál és a mólok száma az 1-es részrendszerben legyen μ_1 és ν_1 , a 2-es részrendszerben pedig μ_2 és ν_2 . A (III.96) összefüggés segítségével írjuk fel a szabadentalpia-változásokat a két részrendszerre:

$$\Delta G_{T,p1} = \mu_1 \Delta \nu_1, \quad \text{illetve} \quad \Delta G_{T,p2} = \mu_2 \Delta \nu_2. \quad (\text{III.97})$$

Tekintettel arra, hogy az egész rendszerben az anyagmennyiség, azaz a mólok száma állandó, $\Delta \nu_1 = -\Delta \nu_2$, így a teljes rendszerre a szabadentalpia-változás:

$$\Delta G_{T,p} = (\mu_1 - \mu_2) \Delta \nu_1. \quad (\text{III.98})$$

Ha $\mu_1 > \mu_2$, akkor az anyag az 1-es részrendszerből a 2-esbe áramlik, azaz ν_1 csökken, tehát $\Delta \nu_1 < 0$, következésképpen az (III.98) egyenlőség jobb oldala negatív. Fordított esetben ($\mu_1 < \mu_2$) csak a két tényező előjele cserélődik fel, de ugyanerre az eredményre jutunk. Az egyensúly beálltakor $\mu_1 = \mu_2$, ilyenkor $\Delta G_{T,p} = 0$. Ezek szerint általánosan igaz, hogy az önként végbemenő izoterm, izobár folyamatok esetén

$$\Delta G_{T,p} \leq 0. \quad (\text{III.99})$$

A termodinamika második főtételével kapcsolatban az izolált rendszerekben lejátszódó spontán folyamatokról már megmutattuk, hogy a folyamat során a rendszer entrópiája növekszik. Most találtunk egy olyan termodinamikai mennyiséget, amely a nem izolált rendszerek esetén az entrópiához hasonlóan meghatározott irányban változik és ezzel jellemzi az önként végbemenő folyamatok irányát (legalábbis izoterm és izobár feltételek mellett).

Ehhez a gondolatmenethez hasonlóan megmutatható, hogy amennyiben a kiegyenlítődési folyamat állandó hőmérsékleten ($T = \text{állandó}$) és állandó térfogaton ($V = \text{állandó}$) megy végbe, akkor a rendszer szabadenergiája (F) csökken, illetve az egyensúly beálltakor minimális értéket vesz fel (lásd III.14. megjegyzés):

$$\Delta F_{T,V} \leq 0. \quad (\text{III.100})$$

Ha pedig állandó entrópia mellett ($S = \text{állandó}$) és állandó nyomáson ($p = \text{állandó}$) megy végbe a folyamat, akkor ugyanez az entalpiáról mondható el:

$$\Delta H_{S,p} \leq 0. \quad (\text{III.101})$$

III.14. megjegyzés. A $\Delta F = \Delta E - T\Delta S$ és a $\Delta F < 0$ kifejezéseket néha a következők szerint értelmezik: ΔF negatív lesz, ha ΔE negatív és $T\Delta S$ pozitív. Ez azt sugallja, hogy a rendszer kisebb belső energiájú és nagyobb entrópiájú állapotok felé törekszik, miközben a szabadenergia-függvény ($F(T,V,\nu)$) értéke csökken. Ez az okoskodás hamis (annak ellenére, hogy bevett szokás így emlékeztetni a ΔF -re vonatkozó kifejezésre), mivel a kisebb F felé törekvés kizárólag a nagyobb összentrópiájú állapotok felé haladást jelenti. A rendszerek spontán akkor változnak, ha teljes entrópiájuk növekszik, és nem akkor, ha kisebb lesz belső energiájuk. Noha ΔF kifejezése olyan benyomást kelt, mintha a rendszer az alacsonyabb energiát kedvelné, de ez félrevezető. ΔS a rendszer entrópiaváltozása, és $-\Delta E/T$ a környezet entrópiaváltozásával egyenlő. E kettő összege törekszik maximumra.

3.4.4. III/3.4.4. A leggyakrabban használt termodinamikai potenciálfüggvények és néhány további tulajdonságuk

A környezetével kölcsönhatásban álló rendszert úgy közelítjük meg, mint az egyéb külső hatásoktól elszigetelt két homogén testet (rendszer^(r) és környezete^(k)), amelyeknek csak az egymás közötti lehetséges kölcsönhatásait tanulmányozzuk. Ilyenkor a megmaradó extenzív mennyiségek csak a két test között tudnak cserélődni. Amennyi energiát, térfogatot és anyagmennyiséget „lead” az egyik test, annyit „kap” a másik:

$$\Delta E^{(r)} = -\Delta E^{(k)}, \quad \Delta V^{(r)} = -\Delta V^{(k)}, \quad \Delta \nu^{(r)} = -\Delta \nu^{(k)}. \quad (\text{III.102})$$

Írjuk fel mindkét testre a belső energia változást, és hasonlítsuk össze őket:

$$\begin{aligned}\Delta E^{(r)} &= T^{(r)}\Delta S^{(r)} - p^{(r)}\Delta V^{(r)} + \mu^{(r)}\Delta v^{(r)}, \\ \Delta E^{(k)} &= T^{(k)}\Delta S^{(k)} - p^{(k)}\Delta V^{(k)} + \mu^{(k)}\Delta v^{(k)}.\end{aligned}\quad (\text{III.103})$$

A kompenzáció csupán az egész energiára teljesül, de az egyes munkatagokra külön-külön már nem. Így a teljes energiaváltozás (felhasználva a (III.102) egyenlőségeket is) természetesen nulla, de nem azonosan nulla:

$$0 = [T^{(r)}\Delta S^{(r)} + T^{(k)}\Delta S^{(k)}] - [(p^{(r)} - p^{(k)})\Delta V^{(r)}] + [(\mu^{(r)} - \mu^{(k)})\Delta v^{(r)}]. \quad (\text{III.104})$$

(Csak emlékeztetünk rá, hogy az entrópia nem megmaradó mennyiség, lásd a III/3.3.3. részt.) Kölcsönhatások esetén tehát nem elegendő megmondani azt, hogy az egyik test egy adott kölcsönhatás révén mekkora energiát ad le, hanem azt is, hogy a másik ugyanebben a formában mennyit vesz fel. Az egyik test által leadott és a másik által felvett energia közti különbséget (a (III.104) összefüggésben a szögletes zárójelekben lévő kifejezéseket) **nem kompenzált hőnek**, illetve **munkának** nevezzük (lásd III.15. megjegyzés).

III.15. megjegyzés. Az olyan kijelentés tehát, hogy a rendszer Q_E hőt adott át a környezetnek önmagában nem elegendő, hiszen ezzel még nem mondtuk meg azt, hogy a környezet mennyi hőt kapott meg ebből.

A legáltalánosabb esetben csak a belső energiát használhatjuk termodinamikai potenciálfüggvényként, ugyanis ott az energiacserekek közül egyikről sem tételezzük föl, hogy kompenzált. Amennyiben például $p^{(r)} = p^{(k)}$, akkor a mechanikai munkára teljesül a kompenzáció, így a belső energia helyett az entalpia is használható. A többi lehetséges esetet, azaz a leggyakrabban használt termodinamikai potenciálfüggvényeket az alábbi III.6. táblázatban tüntettük fel a rájuk jellemző jellegzetességekkel együtt.

Az előbbieket szerint tehát a hő nem a kölcsönhatáshoz, hanem a kölcsönhatásban részt vevő partnerekhez külön-külön rendelendő. Amennyiben ezt a körülményt figyelmen kívül hagyjuk és csak például az egyik test által leadott hővel (Q_E) számolunk, viszont az entrópia változást (ΔS) csak a másikra vonatkozóan vesszük figyelembe, akkor $Q_E \neq T\Delta S$. Az eltérést éppen a nem kompenzált hő (Q_{E^*}) szolgáltatja $Q_E + Q_{E^*} = T\Delta S$. Mivel a kompenzáció hiánya kiegyenlítődéshez vezet, ami entrópiainövekedéssel jár, ezért Q_{E^*} mindig pozitív. Emiatt $Q_E \leq T\Delta S$.

Az önként végbemenő, spontán (kiegyenlítődési) folyamat mindig olyan, hogy nem igényel munkabefektetést. A termodinamika gyakorlati szempontból egyik legfontosabb problémája az, hogy a rendszerben lejátszódó folyamatok révén a környezetben mennyi hasznos munkát végezhetünk, mekkora a hasznosítható munka maximális értéke? Másképpen fogalmazva a rendszer által a környezetnek átadott energia milyen mértékben fordítható hasznos munkára. Első gondolatunk az lehet, hogy megnézzük, mekkora a rendszer összenergiája a kiegyenlítődési folyamat megkezdése előtt, és mekkora a környezeti szintre való kiegyenlítődés után. Nyilvánvaló, hogy legjobb esetben is csak a két energia különbsége lenne hasznosítható, de az sem mindig fordítható munkavégzésre, hiszen nem kompenzált változások minden átalakulási energiátípussal kapcsolatban szükségszerűen fellépnek.

Így például a környezettel termikus kapcsolatban lévő rendszerben egy adott állapotváltozás maximális munkáját nem a belső energia megváltozása (ΔE), hanem a szabad energia megváltozása (ΔF) adja meg. Ha pedig a folyamat izoterm és izobár körülmények között zajlik, akkor legfeljebb a szabadentalpia-változás (ΔG) fordítható munkavégzésre. Ennek kapcsán értelmet nyer a szabad energia, illetve a szabad entalpia elnevezés is, minthogy ΔF a belsőenergia-változás (ΔE) azon része, amit munkavégzésre szabadon felhasználhatunk. (Ehhez hasonlóan ΔG az entalpiaváltozás (ΔH) azon része, amit munkavégzésre szabadon felhasználhatunk.)

3.7. táblázat - III.6. táblázat. A leggyakrabban használt termodinamikai potenciálfüggvények és legfontosabb jellemzőik

Termodinamikai potenciálfüggvény (és neve, ha van)	Független változók	Meghatározható állapotfüggvények	Nyomon követhető (nem kompenzált) energiacserekek	Kapcsolat a környezettel	Folyamat

$E = TS - pV + \mu$ v Belső energia	S, V, ν	$T(S), -p(V), \mu(\nu)$	$T\Delta S,$	$-p\Delta V,$	$\mu\Delta\nu$
$H = E + pV$ Entalpia	$S, -p, \nu$	$T(S), -V(-p), \mu(\nu)$	$T\Delta S - \mu\Delta\nu$	mechanikai	izobár
$F = E - TS$ Szabad energia	T, V, ν	$-S(T), -p(V), \mu(\nu)$	$-p\Delta V, \mu\Delta\nu$	termikus	izoterm
$X = E - \mu\nu$	S, V, μ	$T(S), -p(V), \nu(\mu)$	$T\Delta S, -p\Delta V, -$	anyagi	
$G = E - TS + pV$ Szabad entalpia	$T, -p, \nu$	$-S(T), -V(-p), \mu(\nu)$	$- \mu\Delta\nu$	mechanikai és termikus	izoterm-izobár
$Y = E + pV - \mu\nu$ Kötött energia	$S, -p, \mu$	$T(S), -V(-p), \nu(\mu)$	$T\Delta S, -$	mechanikai és anyagi	
$Z = E - TS - \mu\nu$ Térfogati energia	T, V, μ	$-S(T), -p(V), \nu(\mu)$	$-p\Delta V, -$	termikus és anyagi	

3.4.5. III/3.4.5. Híg oldatok szabad entalpiája és a komponensek kémiai potenciálja (kapcsolat a koncentrációval)

Jelöljük A-val az oldószert, B-vel az oldott anyagot, így az (III.94) összefüggés szerint a kétkomponensű oldat szabad entalpiája:

$$G = E + pV - TS = \mu_A \nu_A + \mu_B \nu_B. \quad (\text{III.105})$$

Az oldat belső energiája (E), valamint térfogata (V) egyszerűen felbontható komponenseik összegére, mivel ezek megmaradó mennyiségek:

$$E = E_A^0 \nu_A + E_B^0 \nu_B, \quad V = V_A^0 \nu_A + V_B^0 \nu_B, \quad (\text{III.106})$$

ahol E^0 , illetve V^0 valamely komponens egy móljának belső energiája, illetve térfogata az adott hőmérsékleten és nyomáson. Az entrópia esetében figyelembe kell vennünk az izoterm keveredéskor fellépő entrópiaváltozást is (lásd a III/3.3.5. rész (2) összefüggést, illetve a III.3. emlékeztetőt). Így az oldat entrópiája:

$$\begin{aligned} S &= S_A^0 \nu_A + S_B^0 \nu_B + \Delta S_A + \Delta S_B \\ &= S_A^0 \nu_A + S_B^0 \nu_B - R\nu_A \cdot \ln(c_A) - R\nu_B \cdot \ln(c_B), \quad (\text{III.107}) \end{aligned}$$

ahol c_A és c_B az oldószert illetve az oldott anyag koncentrációja térfogattörtben megadva ($c_A = \nu_A/V$, és $c_B = \nu_B/V$).

Helyettesítsük ezeket a kifejezéseket (III.106, III.107) a (III.105) összefüggésbe, és mindegyik tagból emeljük ki ν_A -t illetve ν_B -t:

$$\begin{aligned} G &= [\{E_A^0 + pV_A^0 - TS_A^0\} + TR \cdot \ln(c_A)]\nu_A + \\ &+ [\{E_B^0 + pV_B^0 - TS_B^0\} + TR \cdot \ln(c_B)]\nu_B = \mu_A \nu_A + \mu_B \nu_B. \end{aligned} \quad (\text{III.108})$$

Az egyenlet jobb és bal oldalát összehasonlítva kiolvashatjuk a megfelelő kémiai potenciálokat:

$$\mu_A = \mu_A^0 + RT \cdot \ln(c_A), \quad \mu_B = \mu_B^0 + RT \cdot \ln(c_B),$$

(III.109)

ahol μ_A^0 és μ_B^0 a megfelelő tiszta komponens moláris szabad entalpiáját [a (III.108) összefüggésben, a kapcsos zárójelben lévő rész], azaz kémiai potenciálját jelenti.

III.3. emlékeztető. Entropiaváltozás izoterm keveredéskor:

$$\Delta S = \Delta S_A + \Delta S_B = R \cdot \nu_A \cdot \ln \frac{V}{V_A} + R \cdot \nu_B \cdot \ln \frac{V}{V_B}$$

3.5. III/3.5. Az élő szervezet energiaforgalma

Az élővilág a Nap sugárzó energiáját használja fel közvetett vagy közvetlen formában. Az állatvilág a szénhidrátok, zsírok és fehérjék lebontásakor felszabaduló szabadenergiát használja. Ezen alaptáplálékok in vitro kalóriaértéke (1 kalória \approx 4,2 joule) valamivel nagyobb, mint az in vivo mérhető értékek. Ennek az a magyarázata, hogy az élelmiszer egy része (körülbelül 10%) nem használódik fel a szervezetben, továbbá a felhasználás útja, illetve a felhasználás során működtetendő biológiai apparátushoz szükséges energia nem azonos a különböző táplálékok esetében.

A termodinamika első főtétele, mint az egyik legáltalánosabb fizikai elv, a biológiai folyamatokra is érvényes. Biokalorimetriás mérések igazolták, hogy az állatok hőtermelése arányos a felvett táplálék energiatartalmával. A biokaloriméter olyan, a környezettől lehetőség szerint izolált rendszer, amelyben az állat életfeltételei rövid távon azért biztosítva vannak. Az új termikus egyensúly beálltakor meghatározott hőmérséklet és az eredeti hőmérséklet különbségét az állat hőtermelése okozza. A hőkapacitás ismeretében így direkt méréssel meghatározható az időegység alatt termelt energia.

Egy másik módszer szerint a kaloriméterben elektromos melegítővel is előállítják ugyanazt a hőmérséklet-különbséget, mint amelyet az állat hoz létre. Az elektromos melegítő paramétereinek ismeretében az időegység alatt leadott hő könnyen kiszámítható. Az energiamegmaradás elve ilyen kalorimetriás módszerekkel állatokon is kielégítő pontossággal igazolható.

Embereken direkt kalorimetriás méréseket ritkán végeznek. Az indirekt kalorimetria, az ún. alpanyagcserevizsgálat az oxigénfogyasztás vagy a szén-dioxid-termelés mérésén alapszik. Alpanyagcsere-nevezzük az ember nyugalmi állapotban, körülbelül 12 órás éhezés után végbemenő anyagcseréjét, amely nyugalmi helyzetben gyakorlatilag a szervezet változatlan állapotban való fenntartásához szükséges. Az ehhez tartozó energia felnőtt (70 kg-os) embernél 24 órára körülbelül 7100 kJ, de az alpanyagcsere függ a nemtől és a kortól is. Az átlagember huzamos munkavégzés során 74 W teljesítményre képes. Napi 10 órás munkát számítva ez körülbelül 2700 kJ. Ugyanennyi idő alatt az alpanyagcserehez szükséges energia nagyjából 3000 kJ. Ez azt jelenti, hogy az ember a 10 órás huzamos munkavégzés során összesen körülbelül 5700 kJ energiát használ el, és ebből 2700 kJ-t fordít munkavégzésre, ami csaknem 50%-os hatásfoknak felel meg. Ez sokkal nagyobb érték, mint például a hőerőgépeké.

Egy érdekes példa: a Bacillus pycnoticus entrópiaváltozása

Az élőlények bioenergetikai tanulmányozására válasszunk egy egyszerű példát, a baktériumot, növekedésének azon a szakaszán, amelyen a felépüléséhez szükséges egyik legfontosabb alapegységet, a glükózt előállítja. A baktériumok növekedését el kell választani a szaporodásuktól, amennyiben a növekedés elsősorban a sejttáplálék (például fehérjék, nukleinsavak, lipidek, membránok stb.) megszorodását jelenti. A baktérium növekedése növelni fogja rendezettségét, mivel a különböző rendezett struktúrák is növekednek a baktérium belsejében. Ezek szerint ha a baktériumot mint termodinamikai rendszert vizsgáljuk, akkor (az entrópia statisztikus értelmezése alapján) az **entrópiájának csökkennie kell**. Ez látszólagos ellentmondást teremt az élőlények energetikája és a termodinamika második főtétele között, mivel a második főtétel, mint láttuk, előírja, hogy az izolált rendszerek entrópiája nem változik vagy növekszik, de semmiképp sem csökken. Az „ellentmondás” egyszerűen feloldható, hisz az élőlények nem hogy nem izoláltak, de még csak nem is zárt rendszerek. Ha a baktériumot a közvetlen környezetével együtt tanulmányozzuk, amellyel mint nyitott rendszer energia- és anyagcserét folytat, akkor már érdemes megvizsgálni az így környezetével együtt izolált rendszernek

tekinthető baktérium entrópiaváltozását. A baktérium entrópiacsökkenésének legalább akkora vagy ugyanakkora entrópianövekedés felel meg a környezetben. Erre a jelenségre tette Schrödinger azt a találó megjegyzést, hogy az élőlények negatív entrópián élnek. Azaz a környezet entrópianövekedése és az élő szervezetek

entrópiacsökkenése között a következő összefüggésnek kell fennállnia: $\Delta S_k + \Delta S_b \geq 0$, ahol a ΔS_k a környezet, ΔS_b pedig a baktérium entrópiaváltozását jelöli. Ehhez hasonlóan a szabadentalpia-változásokra is felírható az egyenlőtlenség: $\Delta G_k + \Delta G_b \leq 0$.

A számítások megkönnyítése végett csak az egyenlőségeket tekintjük és Henry Linschitz (1919-) amerikai fiziko-kémikus nyomán számítással **megbecsüljük a Bacillus pycnoticus entrópiaváltozását a glükóz előállításakor**. Ezt az könnyíti meg, hogy ez a baktérium kizárólag hidrogént éget el energiaforrásként, így az abból nyerhető, munkavégzésre szabadon felhasználható szabadentalpia-változás egyszerűen kiszámítható. Az összefüggésből a szabadentalpia-változás definíciójának felhasználásával az entrópiaváltozás kifejezhető: $\Delta G_b = \Delta H_b - T\Delta S_b = -\Delta G_k$,

$$\Delta S_b = \frac{\Delta G_k + \Delta H_b}{T} \quad (1)$$

A Bacillus pycnoticus energiaforrásának, a hidrogénnek az oxidációja (egy móltra vonatkoztatva) $\Delta H_{H_2O} = -237$ kJ szabadentalpia-változással jár (ennyi a víz képződési szabadentalpiája 25 °C-on és atmoszferikus (101 kPa) nyomáson). A baktérium a szervezetének felépítéséhez szükséges szénforrásként szén-dioxidot használ. Ebből a $6CO_2 + 6H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_6 + 6O_2$ egyenletnek megfelelően képződik glükóz, amelyet azután a szervezet további bonyolult anyagcsere-folyamatok során az összes többi anyagának felépítéséhez felhasznál. A képződési entalpiák (H°) ismeretében ehhez

$$\Delta H_b = H^\circ_{C_6H_{12}O_6} - (6 \cdot H^\circ_{CO_2} + 6 \cdot H^\circ_{H_2O}),$$

$$\Delta H_b = -1280 - (6 \cdot (-394)) + (6 \cdot (-286)) = 2800 \text{ (kJ)}$$

energia szükséges (szintén egy móltra vonatkoztatva). Mérések alapján tudjuk, hogy egy mól szén-dioxid beépítéséhez a baktérium 8 mól hidrogént éget el, azaz 12 g szén beépítéséhez $8 \cdot (-237 \text{ kJ}) = -1896$ kJ energiát használ. Ezt 12-vel osztva megkapjuk a környezet egy gramm szén beépítésekor bekövetkező szabadentalpia-változását: $\Delta G_k = -158$ kJ. A hat szénatomot tartalmazó glükóz keletkezésekor az entalpiánövekedés (egy móltra) 2800 kJ volt, amit megint 1 g szénre átszámítva: $2800/(6 \cdot 12) = 39$ (kJ)-t kapunk.

Ha ezeket a számértékeket, valamint az élőlényekre rendszerint legkedvezőbb 37 °C = 310 K hőmérsékletet behelyettesítjük (1) összefüggésbe, akkor a $\Delta S_b = \frac{-158 + 39}{310} = -0,38$ (kJ/K) eredményt kapjuk (1 g szénre vonatkoztatva). Átvéve Linschitz becslését, hogy a baktériumok átlagosan 10% szenet tartalmaznak és tömegük 10^{12} g nagyságrendű, a baktériumsejtenkénti entrópiaváltozás $-38 \cdot 10^{15}$ kJ/K, azaz -38 pJ/K.

4. III/4. Transzportfolyamatok a biológiai membránon keresztül, membránpotenciál

4.1. III/4.1. Transzportjelenségek a sejt nyugalmi állapotában

Az élő szervezetekben a gázmolekulák, ionok és egyéb oldott molekulák diffúziója túlnyomórészt vizes fázisban történik, sok esetben azonban e diffúzió közegének a tulajdonságai jelentősen eltérnek a tiszta víz mint oldószer tulajdonságaitól. A néhány μm átmérőjű sejtek belsejében a molekulák mozoghatnak például a citoplazmában, membránnal körülhatárolt térrészekben, különböző sejt szervecskékben (sejtorganelumokban), mint például a mitokondrium, a sejtmag vagy az endoplazmatikus retikulum stb. Ezen organelumok belsejében igen nagy lehet a különböző molekulák (például fehérjék, nukleinsavak) sűrűsége (ez nagy viszkozitást eredményezhet), ami jelentős mértékben lelassítja a molekuláris diffúziót. Magának a citoplazmafolyadéknak is néhányszor nagyobb az átlagos viszkozitása, mint a vízé, s ráadásul η értéke helyről helyre is változhat, például az emlősök sejteinek

citoplazmájában található, fehérjékből felépülő hálózatszerű struktúra, a citoskeleton révén. A szervezeten belüli molekuláris diffúziót azonban nemcsak a viszkozitás, illetve strukturális hatások módosíthatják.

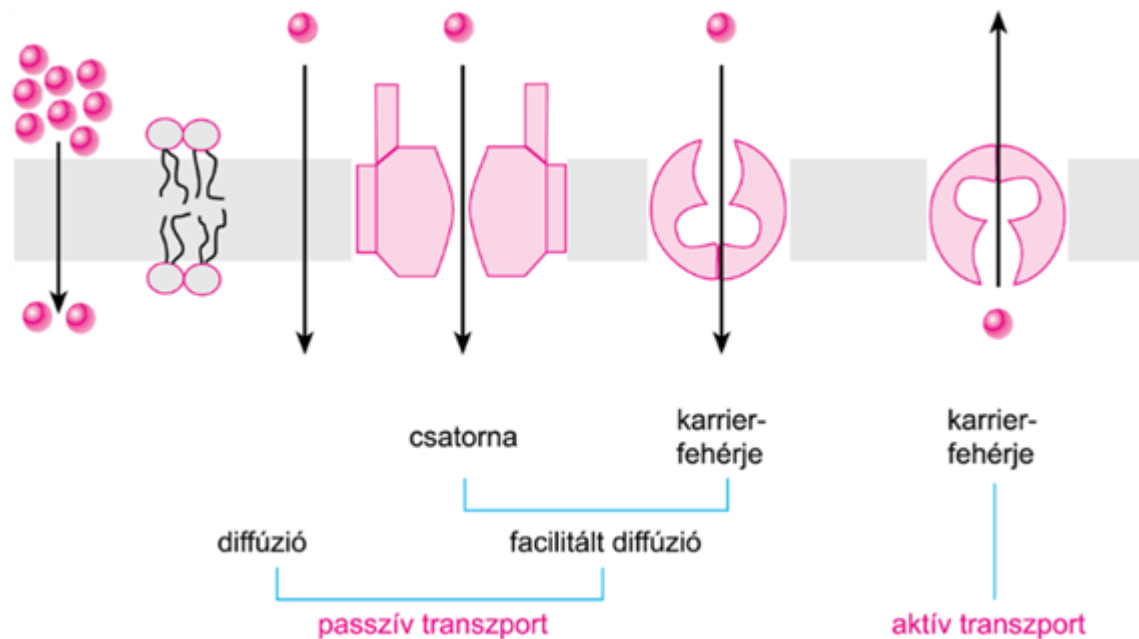
A sejtek, illetve a sejten belüli (intracelluláris) organellek tartalmát lipid kettős rétegből felépülő membránok határolják. E kettős rétegben számos, különféle funkciót ellátó fehérje is található, amelyek lipid-fehérje kölcsönhatások révén beépülnek a kettős rétegbe, vagy annak külső, illetve belső felszínéhez kapcsolódnak (lásd az I/5.1.2. részt). A biológiai membránok a szervezetben zajló molekuláris diffúzió szempontjából akadályt képeznek azért, hogy kémiai összetételüknél és speciális szerkezetüknel fogva csak bizonyos anyagok számára átjárhatóak, azaz a membránokon keresztül történő diffúzió erősen szelektív. A sejteket határoló ún. plazmamembrán e tulajdonsága biztosítja a sejtek szelektív anyagcserejét. Érezhető tehát, hogy amennyiben ezeket a jelenségeket a biofizika megközelítésében tárgyalni akarjuk, meg kell vizsgálnunk a „diffúzió” jelenségénél leírtak (III/2.1.2.) alkalmazhatóságát. A membránokon keresztül történő anyagtranszportot a molekuláris mechanizmusok és az energetikai különbségek alapján három kategóriába szokás sorolni (lásd a III.23. ábrát is):

1. passzív diffúzió;

2. facilitált (közvetített) diffúzió;

3. aktív anyagtranszport.

Fizikai értelemben a fenti három kategória közül csak a passzív diffúzióknak nevezett jelenség tekinthető „valódi” diffúzióknak. Tárgyalásunkat ezzel kezdjük.



III.23. ábra. A membránokon keresztül történő transzport típusainak összefoglalása

4.1.1. III/4.1.1. Töltéssel nem rendelkező részecskék passzív diffúziója

Ebben a leírásban a membrán szerkezetét részleteiben nem vesszük figyelembe, közegnek tekintjük, és egy fehérjementes lipid kettős réteg fizikai tulajdonságaival jellemezzük. A membránfelületre merőlegesen képzeljük el a transzport irányának megfelelő x tengely helyzetét. Diffúzió ebben a közegben (a membránban) akkor zajlik egy adott x helyen, ha koncentrációkülönbség áll fenn az x tengely mentén az adott hely Δx környezetében. Az ebből származó $\Delta c/\Delta x$ koncentrációesés (lásd a III/2.1.2. részt) szolgáltatja az áramlást fenntartó termodinamikai erőt. Az életfolyamatok szempontjából elsősorban a membrán teljes ($d \approx 5$ nm) vastagságán átáramló anyagáram-sűrűség érdekes (a membránon belüli áramlási viszonyok kevésbé érdekesek). Ennek egyszerű meghatározásához Fick I. törvényét (lásd a III/2.1.2. részben) használhatjuk, ha azzal a feltételezéssel élünk, hogy a koncentráció a membránon belül egyenletesen (lineárisan) változik, azaz:

$$J_m = -D \cdot \frac{\Delta c}{\Delta x} = -D_m \frac{c_{m2} - c_{m1}}{d}, \quad (\text{III.110})$$

ahol c_{m1} , c_{m2} a koncentráció a d vastagságú membrán belsejében a két szélén, D_m pedig a diffúziós együttható a membránon belül, amely nagyságrendekkel kisebb lehet annál, mint ami a vizes fázisra jellemző. (Természetesen a kirótt feltétel teljesülését kísérletileg ellenőriznünk kell.) A III.110 összefüggést egyszerűbb alakra hozhatjuk, ha a benne szereplő két állandót (D_m -et és d -t) összevonjuk. Ily módon a membrántranszportra jellemző új paraméterhez jutunk:

$$p_m = \frac{D_m}{d}, \quad \text{tehát} \quad J_m = -p_m(c_{m2} - c_{m1}). \quad (\text{III.111})$$

p_m , az ún. **permeabilitási állandó**, mértékegysége m/s.

A membrán belsejében az egyik, illetve a másik határfelületénél érvényes moláris koncentráció (c_{m1} , c_{m2}) általában nem azonos a kívülről mérhető, a membránt körülvevő vizes fázisra jellemző c_{v1} , illetve c_{v2} koncentrációval

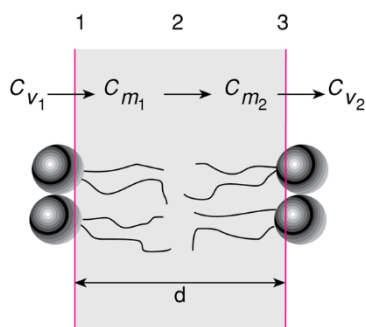
($c_{m1} \neq c_{v1}$, $c_{m2} \neq c_{v2}$, lásd a III.24. ábrát). Stacionárius diffúziót feltételezve azonban teljesülnie kell a

$$\frac{c_{m1}}{c_{v1}} = \frac{c_{m2}}{c_{v2}} = \text{állandó} = K \quad (\text{III.112})$$

feltételnek. Így a (III.111) összefüggés a K megoszlási hányadossal és a vizes fázisra vonatkozó koncentrációkkal a következő alakra hozható:

$$J_m = -p_m \cdot K(c_{v2} - c_{v1}) = -p(c_{v2} - c_{v1}), \quad (\text{III.113})$$

amelyben J_m , és a c_{vi} koncentrációk mérhető mennyiségek, tehát p meghatározható. Bár a $p = Kp_m$ mennyiség láthatóan különbözhet a „valódi” [(III.111)-ben bevezetett] permeabilitási állandótól, gyakorlati szempontból (az egyszerűbb mérhetőség miatt) **p-t használjuk permeabilitási állandóként**.



III.24. ábra. Vázlat a permeabilitási állandó értelmezéséhez. A membrán két szélső helyén a koncentráció c_{m1} és c_{m2} , a két határoló vizes fázisban mérhető koncentráció pedig c_{v1} és c_{v2} , ahol $c_{m1} > c_{m2}$, $c_{v1} > c_{v2}$

Egy adott molekulára (például H_2O -ra) más körülmények között is elvégezve a mérést többféleképpen is meghatározhatjuk a permeabilitási állandó értékét. Az elvégzett mérések több részecskére is igazolták, hogy a fenti közelítések elfogadhatóknak tekinthetők.

Diffúzióval jutnak át a membránon keresztül a hidrofób O_2 - és N_2 -, valamint a poláros H_2O -, urea-, glicerin-, CO_2 -molekulák. Sőt a fenti módon a nagyobb, nettó töltéssel nem rendelkező poláros molekulák, mint például a glükóz, vagy a szacharóz transzportja is leírható (lásd a III.25. ábrát).

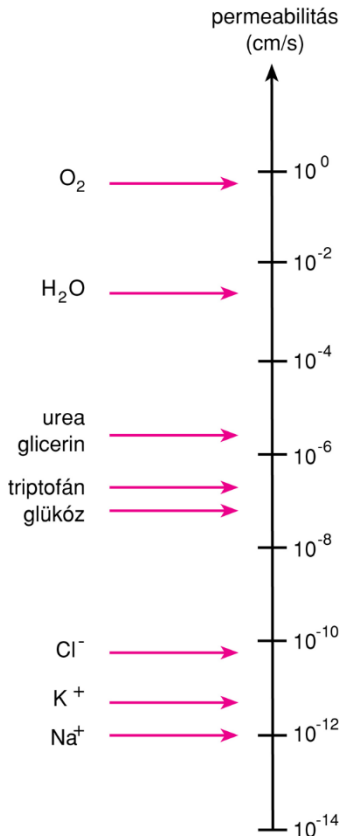
Bár a III/3.2.2. részben már említettük, de a membrántranszport-folyamatokkal kapcsolatban is fontos felhívni arra, hogy a diffúziót, azaz a semleges részecskék áramlását kiváltó termodinamikai erő (X) nem a koncentrációesés, hanem a kémiai potenciálesés (-gradiens). A jelenségre alkalmazott Onsager- egyenlet (lásd (III.54)) tehát:

$$J = L \cdot X = L \cdot \frac{-\Delta\mu}{\Delta x} \quad (\text{III.114})$$

A kémiai potenciálra vonatkozó (III.109) összefüggést ($\mu = \mu_0 + RT \ln c$) felhasználva (magasabb matematikai ismeretek birtokában) nyerjük a

$$J = -L \cdot RT \frac{\Delta \ln c}{\Delta x} = -L \cdot \frac{1}{c} RT \frac{\Delta c}{\Delta x} \quad (\text{III.115})$$

egyenletet, ahol az LRT/c kifejezés együttesen a D diffúziós együtthatót adja meg. Így visszajutunk Fick I. törvényéhez.



III.25. ábra. Mesterséges membránok kis molekulákra vonatkozó permeabilitási állandói

4.1.2. III/4.1.2. Ionok passzív diffúziója

Lipidmembránok permeabilitása ionokra nézve igen kis érték (lásd III.25. ábra). Nagyobb, töltéssel bíró molekulákra nézve a membrán gyakorlatilag átjárhatatlan. A töltéssel bíró részecskék (x irányú) transzportjára alkalmazva az Onsager-féle összefüggést a jelenséget úgy írhatjuk le, hogy a kémiai-potenciálesés helyett a (III.62)-ben bevezetett elektrokémiai potenciál ($\mu_e = \mu + zF\phi$) esését használjuk. Hiszen a részecskék a hozzájuk tartozó töltéssel együtt vándorolnak (lásd a III/3.3.2. részt). Ennek megfelelően: a k -adik típusú részecskére nézve (lehet ez például a Na⁺ ion) az anyagáram-sűrűség:

$$J_k = L_k \cdot X_k = -L_k \cdot \frac{-\Delta\mu_{ek}}{\Delta x} \quad (\text{III.116})$$

A $\Delta\mu_e/\Delta x$ mennyiséget a definíciós összefüggés alapján a (III.115) formulánál alkalmazottak figyelembevételével írhatjuk fel:

$$\frac{-\Delta\mu_{ek}}{\Delta x} = \frac{\Delta}{\Delta x} (\mu_k + z_k F \varphi) = \frac{\Delta\mu_k}{\Delta x} + z_k F \frac{\Delta\varphi}{\Delta x} = \frac{1}{c_k} RT \frac{\Delta c_k}{\Delta x} + z_k F \frac{\Delta\varphi}{\Delta x}, \quad (\text{III.117})$$

ahol z_k a részecske vegyértéke, F a Faraday-állandó, φ az elektromos potenciál. Ennek alapján látható, hogy a termodinamikai erő a semleges részecskék transzportjára alkalmazott gondolatmenethez (Fick I. törvényéhez) képest a $-z_k F \Delta\varphi/\Delta x$ taggal bővül. Tekintetbe véve a (III.115)-ből kiolvasható diffúziós együttható kifejezését:

$$D_k = L_k \frac{1}{c_k} RT \quad \text{és ebből} \quad L_k = c_k \frac{D_k}{RT} = \frac{c_k u_k}{N_A}, \quad (\text{III.118})$$

ahol u_k a k -edik részecske mozgékonyága a membránban, N_A pedig az Avogadro-szám továbbá felhasználtuk azt is, hogy a membránon belüli diffúziós együttható kifejezhető a részecske mozgékonyágával ($D_k = u_k kT$, lásd (III.33)).

Mindezek alapján a (III.116) összefüggés a következő alakot ölti:

$$J_k = L_k \cdot X_k = -D_k \left(\frac{\Delta c_k}{\Delta x} + \frac{z_k F \Delta\varphi}{RT \Delta x} \right) \quad (\text{III.119})$$

A (III.119) formula termikus egyensúlyban megadja az egyféle (itt a k -edik) töltött részecske (például a Na^+) transzportjának anyagáram-sűrűségét, amelyet időben állandó koncentrációesés és elektromos potenciálesés (gradiens) tart fenn.

Facilitált (közvetített) diffúzió

A biológiai membránokon, a mesterséges membránokhoz hasonlóan, a víz, valamint az apoláros, kisméretű molekulák viszonylag könnyen áthatolnak. Ezzel szemben lényeges különbség van a biológiai és a mesterséges membránok között az ionok, monoszacharidok, aminosavak és egyéb metabolitok transzportját illetően. Ezt a molekuláris transzporttípust olyan, membránban található, legtöbbször fehérje természetű közvetítőmolekulák képesek megvalósítani, amelyek szelektíven képesek diffúziós útvonalat biztosítani egyes molekula- vagy ionfélések számára. Idetartoznak például az enzimekhez hasonló tulajdonságokkal rendelkező specifikus **karrier-fehérjék** (más néven „permeázok”), az egyes ionok szelektív transzportját végző **ioncsatorna-fehérjék**, valamint az ionok átszállítására alkalmas, külső felszínükön hidrofób, gyűrűs szerkezetű „antibiotikumok”, az ún. **ionofórok**. Az ezen közvetítők segítségével lezajló, ún. **facilitált diffúzió** legfontosabb jellegzetességei a következők:

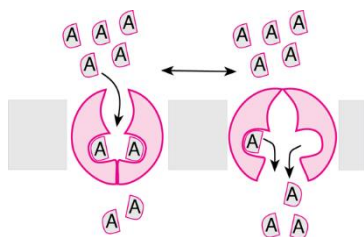
- a folyamat sebessége jelentősen nagyobb, mint amit a passzív diffúzióra vonatkozó Fick-törvények alapján várnánk,
- a folyamat erősen szelektív, azaz kizárólag egy molekulaféleség (esetleg egy szűk, szerkezetileg rokon molekulacsoport) transzportjára képes,
- mivel a membránon keresztül történő diffúzió (szemben a passzív diffúzióval) korlátozott számú „közvetítőmolekulán” keresztül valósul meg, a diffúzió sebessége maximumot mutat, azaz „telíthető” a koncentráció növekedésével,
- a facilitált diffúzió a membránon keresztül elvileg mindkét irányba működhet, mindenkor irányát a transzportálandó molekula vagy ion kémiai, illetve elektrokémiai potenciálesésének iránya szabja meg,
- a facilitált diffúzió – szemben a passzív diffúzióval – szelektíven gátolható a közvetítőmolekulára ható gátlószerekkel (ún. inhibitorokkal).

A transzportált részecske és a membránfehérje között létrejövő kapcsolat alapján a közvetített diffúzió két fő típusát különböztetjük meg. Az **ioncsatorna-fehérjék** (III.23. ábra) által közvetített diffúzió során a transzportálandó részecskék, többnyire ionok, nem kötődnek a membránfehérjéhez. Szerkezetüket tekintve az

ioncsatornák a sejtmembránt teljes egészében átérő, több fehérjeegységből felépülő szupramolekuláris struktúrák, amelyek hidrofíil pórusokat hoznak létre a membránon keresztül. Az ionok a pórusokon keresztül jutnak át a számukra egyébként nehezen átjárható sejtmembránon. A sejtmembrán ioncsatornáinak egyik lényeges tulajdonsága, hogy a csatornák funkcionális – nyitott vagy zárt – állapota bizonyos ingerekre meghatározott módon, nagyon gyorsan képes megváltozni. Vannak csatornák, amelyek állandóan működnek (pl. a mitokondrium külső membránjában lévő *porin*), a legtöbb csatorna átjárhatósága azonban szabályozott. A szabályozó ingertől függően a csatornák különböző típusúak lehetnek. A *feszültség vezérelte* csatornáka membránpotenciálra érzékenyek, adott tartományban kinyitnak, amúgy zárva tartanak. A *receptor vagy ligand vezérelte* csatornák jellemzője, hogy valamilyen molekula kötését kísérő konformációváltozások nyitják meg a csatornát. Maga a ligand érkezheth az extracelluláris oldalról (pl. egy neurotranszmitter, transzmitteraktivált csatorna) vagy lehet az intracelluláris tér egy ionja (pl. Ca^{2+} , ionaktivált csatorna). Bizonyos csatornák átjárhatóságát *mechanikai* behatások szabályozzák. Csatornafehérjéik gyakran rendelkeznek egy citoplazmába nyúló résszel, ami a citoszkeletonhoz kapcsolódik. A citoszkeleton által kifejtett húzóerő nyitja meg a csatornát.

A **kARRIERFEHÉRJÉK** az oldott iont vagy molekulát specifikusan megkötik, és valamilyen formában elősegítik annak a membránon való átjutását. A mechanizmussal kapcsolatos kérdések ma még nagyrészt tisztázatlanok. Valószínűnek látszik, hogy a karrierfehérjék nem flip-flop mozgással juttatják át az oldott komponenst a membránon. Hasonlóan kicsi a valószínűsége annak is, hogy a membrán két felszíne között ide-oda mozogva segítik elő a transzportot. Legvalószínűbb az a feltevés, hogy funkciójukat az enzimekhez hasonlóan reverzibilis konformációváltozások révén fejtik ki.

Az 1. ábra a karrierfehérjék által közvetített passzív transzport legfontosabb lépéseit mutatja be a feltételezett mechanizmusnak megfelelően. Az első lépés a transzportálandó szubsztrát megkötése a közvetítő membránfehérjemolekula által, amelyet a K_M egyensúlyi (kötési) állandó jellemez. A reakcióhoz (jelen esetben a transzporthoz) szükséges a karrier konformációjának megváltozása. Az ehhez szükséges „aktiválási energiát” a szubsztrát kötési energiája fedezi. A következő lépés a szubsztrát áthaladása a membránon, illetve leválása az átelles oldalon (transzportlépés). Ezután a közvetítőfehérje konformációja visszaalakul az eredetivé, megakadályozván a molekulák ellenirányú transzportját.



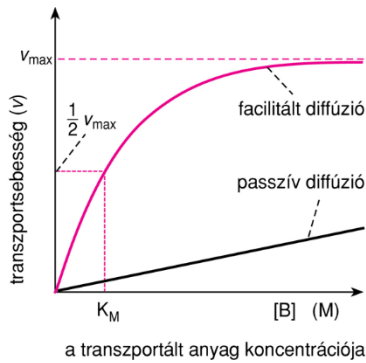
1. ábra. A karrierfehérjék által közvetített passzív transzport feltételezett mechanizmusa

A facilitált diffúzió reakciósémája lényegében azonos az enzimreakciókra is érvényes reakciósémával. Ebből következik, hogy a transzport sebessége arányos a közvetítőfehérje (A) és a transzportálandó molekula (B) által alkotott ütközési komplex (AB) koncentrációjával: $v_1 = k_1[AB]$ ahol k_1 a transzportálási lépés (transzlokáció) sebességi állandója. A stacionárius állapotra, illetve az ütközési komplex egyensúlyi koncentrációjára vonatkozó összefüggések (lásd a (III.43) és a (III.44) egyenleteket) felhasználásával, megkapjuk a transzportsebesség (v) és a transzportálandó szubsztrátmolekula koncentrációja közötti összefüggést:

$$v = \frac{k_1[A]_t[B]}{K_M + [B]}$$

ahol $[A]_t$ a közvetítőfehérje teljes koncentrációja.

A facilitált diffúzió kinetikai tulajdonságait, a passzív diffúzióval összehasonlításban, a 2. ábra mutatja be. Az ábrából jól észrevehető, hogy a passzív diffúzió, szemben a facilitált diffúzióval, nem specifikus, nem telíthető és lényegesen kisebb sebességgel játszódik le.



2. ábra. A facilitált és a passzív diffúzió kinetikai összehasonlítása

A transzport sebessége lényeges különbözik a csatornán keresztüli és a karrierek által közvetített esetben. Az ioncsatornákon másodpercenként több mint 10^6 ion haladhat át, ami több mint százszorosa az eddig megismert leggyorsabb karrier által közvetített transzport sebességének.

Facilitált diffúzió speciális típusa a membrán permeabilitásának növekedése **ionofórok** beépülésével. Az ionofórok kis, hidrofób molekulák, elnevezésük arra utal, hogy az ionokat képesek lipidoldékony komplexbe vinni. Ezeket a vegyületeket általában gombák vagy baktériumok termelik, és mint „biológiai fegyvereket” használják, mivel más baktériumok vagy gombák szaporodását gátolják. Az ionofórok két csoportba sorolhatók: *mobilis ionkarrierek* és *csatornaképzők*. Közös vonásuk, hogy a transportált ionok töltését leányékolva teszik lehetővé azoknak a membránon való átjutását. Mivel nincsenek energiát szolgáltató folyamatokhoz csatolva, az ionofórok által megvalósított iontranszport az elektrokémiai potenciál által meghatározott irányban játszódik le, és rendszerint erősen hőmérsékletfüggő.

A *mozgékony ionkarrierek* általában gyűrű alakú vagy gyűrűszerű struktúra kialakítására képes, nyílt szénláncú vegyületek. A gyűrű külső oldala hidrofób, ez az oka lipidoldékonyságuknak. Az ionhordozó képességet az biztosítja, hogy a gyűrű belsejében poláros csoportok helyezkednek el, amelyek megfelelő méretű ionokat képesek megkötni. Ennek köszönhető relatív specificitásuk. Ebben a csoportba sorolható például a valinomicin, nonaktin, monaktin, nigericin, ionomicin és az A23187 jelű ionofór. A valinomicin zárt szénláncú, gyűrű alakú molekula, hidrofób jellegét valin oldalláncok biztosítják. Igen erősen K^+ -szelektív, affinitása a K^+ -hoz több mint négy nagyságrenddel nagyobb, mint a Na^+ -hoz. Az A23187 ionofór kétértékű kationokra specifikus, de Ca^{2+} -kötő képessége jelentősen meghaladja Mg^{2+} -kötő képességét. A legszelektívebb Ca^{2+} -ionofór az ionomicin.

A *csatornaképző* ionofórok jellegzetes példája a gramicidin-A. Ez a vegyület 15 hidrofób aminosavból álló lineáris peptid, ami α -hélixet alkotva épül be a sejtmembránba. Két molekula gramicidin-A csatornát formál a lipid kettős rétegen át, amelyen keresztül egyértékű kationok szabad diffúziója indul meg. A dimerek nem stabilak, a monomerekkel disszociációs egyensúlyban vannak. A csatornák a fázisátalakulási hőmérséklet alatt is funkcionálnak, ahol a mobilis karrier által közvetített transzportfolyamatok „befagynak”, pontosabban fogalmazva a membrán gélszerű állapota miatt igen lelassul ez a folyamat. Ez a különbség lehetőséget ad egy-egy ionofór típusának azonosítására.

A csatornaképző ionofórokhoz némileg hasonlóak a polién antibiotikumok, amelyek megváltoztatják a membrán struktúráját. A nystatin a membrán koleszterinmolekuláival lép kölcsönhatásba, és viszonylag nagy méretű pórusokat alakít ki a membránban. Ezeken keresztül nagyobb méretű molekulák is diffundálhatnak. A nagy pórusméret fokozott anyagvesztést eredményezhet, ezzel kapcsolatos az ilyen antibiotikumok citotoxicitása.

Az ionofórok alkalmazása a membránkutatásban lehetővé teszi, hogy a sejt citoplazmájában bizonyos ionok koncentrációját szelektív módon lehessen változtatni. Segítségükkel az ionkoncentrációk jelentősége, valamint a koncentrációeltolódások következményei tanulmányozhatók

4.1.3. III/4.1.3. Aktív transzport

Az aktív transzport olyan folyamat, amely az oldott molekulát vagy iont a kémiai, illetve elektrokémiai potenciálessel ellenkező irányba szállítja. Ehhez természetesen energiát kell befektetni, ami háromféle módon valósulhat meg. Az **ATP-vel működő transzporterek**, vagy ATP-ázok az ATP hidrolízisekor keletkező energiát, a **fénnyel működő transzporterek** a fény energiáját hasznosítják erre a célra. A **csatolt transzporterek** egy adott elektrokémiai potenciálessel (gradiens) irányába folyó transzport során felszabaduló

energiát hasznosítják egy másik molekula gradiens ellenében történő mozgatásához. Ezért ez utóbbit gyakran mint másodlagos aktív transzportot említik.

Az aktív transzportot végző molekulák csoportosíthatók a szállított molekulák száma és a szállítás iránya alapján is. Néhány transzporter egyetlen molekulát juttat át a membrán egyik oldaláról a másikra, ezeket **uniportereknek** nevezzük. Más transzporterek két vagy több ion vagy molekula mozgását teszik lehetővé. Ha a két részecske szállítása azonos irányú, akkor **szimpporterről**, ha ellentétesen, akkor **antiporterről** beszélünk.

Példák az aktív transzportra

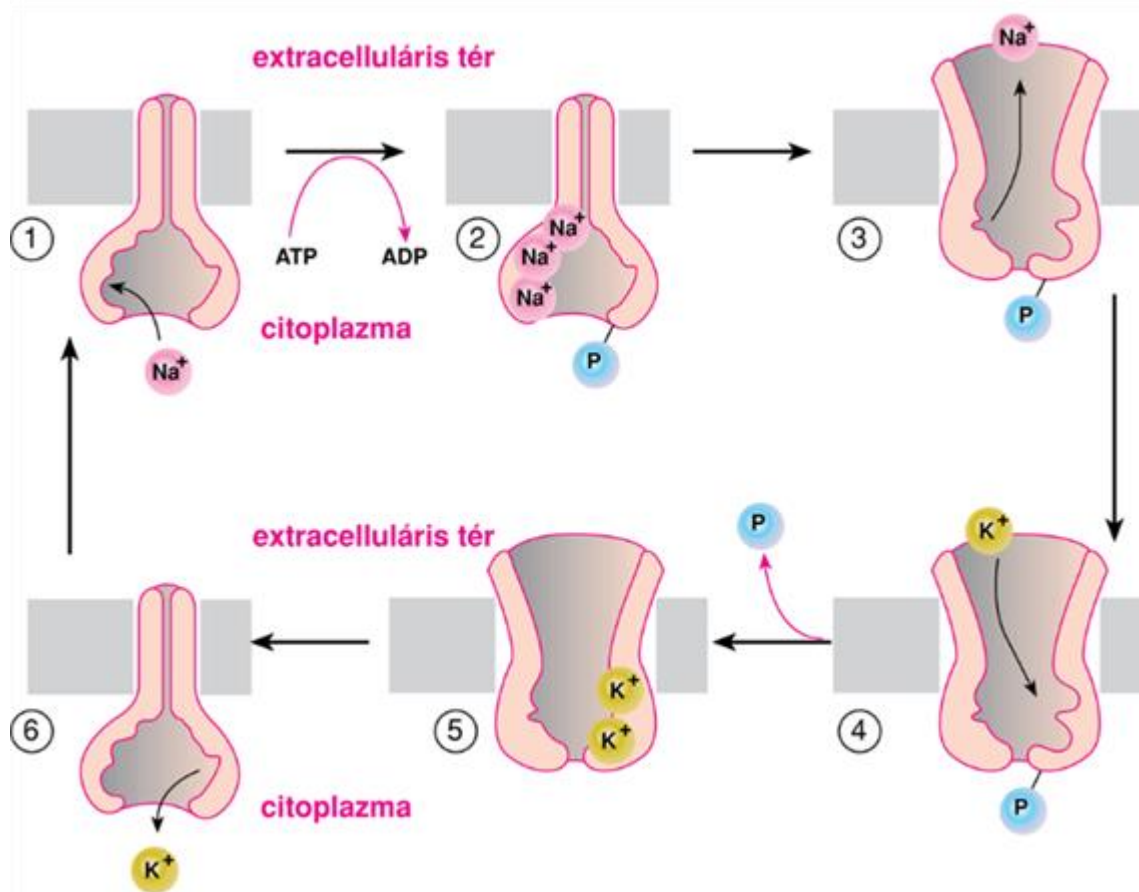
Mint ismeretes a Na⁺ion extracelluláris koncentrációja jelentősen meghaladja az intracellulárisat, míg a K⁺ ion koncentrációja a sejten belül nagyobb, mint az extracelluláris térben. Ezt az állapotot a **Na⁺-K⁺ pumpa**, egy *antiporter* tartja fenn, amely gyakorlatilag valamennyi állati sejt plazmamembránjában megtalálható. Ebben az esetben mindkét ion az elektrokémiai potenciálessel ellentétes irányban mozog. A pumpa működése az ATP hidrolíziséhez kapcsolt, vagyis a transzporter egy Na⁺-K⁺ ATP-áz. A folyamat jelentőségét jól mutatja, hogy általában egy sejt teljes energiaigényének harmada – ingerelhető sejtekben még nagyobb hányada – fordítódik ennek a működtetésére.

Jelenlegi ismereteink szerint a Na⁺-K⁺ ATP-áz működésének lényege, amint azt az ábra is szemlélteti, az alábbiakban foglalható össze. Az első lépésben az ATP-áz a a membrán intracelluláris oldalán Na⁺ionokat köt meg. Ezt követően egy ATP-molekula hidrolízise és a fehérje ehhez kapcsolódó foszforilálása során nyert energia felhasználásával a fehérje konformációja megváltozik. A konformációváltozás következtében a fehérje Na⁺kötőhelyéről a Na⁺ionok az extracelluláris oldalon disszociálnak, és a fehérjében kialakul a K⁺-kötőhely. A K⁺ionok kötődése majd a fehérje defoszforilációja újabb konformációváltozást eredményez. Ez a kötött K⁺-nak az intracelluláris térrészen való disszociációjához vezet, és ismét kialakul a Na⁺-kötőhely.

A Na⁺-K⁺ pumpa működése minden részletében még nem ismert. Annyi azonban bizonyított, hogy három „kipumpált” Na⁺-ra átlagosan két „bepumpált” K⁺ esik, és ehhez egy ATP-molekula használdik fel. A transzporter külön kötőhellyel rendelkezik a kétféle ion számára. A Na⁺-és K⁺-transzport, valamint az ATP-hidrolízis szigorúan csatolt folyamatok, csak együtt játszódnak le. Az ATP-áz molekulának az extracelluláris oldalon van egy inhibitor-kötő helye, az ide kötődő ouabain gátolja a K⁺ion transzportját.

A Na⁺-K⁺ pumpa elektrogén, vagyis több pozitív töltésű iont szállít kifelé, mint befelé. Hogy ez mégsem vezet a töltésseloszlás megváltozásához, annak az az egyik magyarázata, hogy a passzív Na⁺-beáramlás mértéke meghaladja a passzív K⁺-kiáramlás mértékét.

A Na⁺-K⁺ pumpa mellett kiemelkedő jelentőségű a **Ca²⁺-pumpa**. A citoszol Ca²⁺ion koncentrációja több nagyságrenddel kisebb, mint az extracelluláris téré. Ennek a jelentősége a sejt jelátadási folyamataiban kiemelkedő. A Ca²⁺ sejtből történő kijuttatását egyfelől a Ca²⁺-ATP-áz, egy uniporter, másfelől a Na⁺-Ca²⁺ exchanger, egy antiporter típusú transzporter végzi.



A csatolt transzporterek többségének működése a Na^+ -ionok már ismert extra- és intracelluláris koncentrációja közötti különbségre épül. A Na^+ -ionok elektrokémiai potenciálesés irányába történő transzportja szolgáltatja az energiát más molekulák gradiens ellenében történő szállításához. Az állati sejtekben gyakran ilyen mechanizmus szerint játszódik le a glükóz és a szacharóz, valamint az aminosavak felvétele. A Na^+ ion és a kotranszportban részt vevő másik molekula, például a glükóz kooperatív módon kötődnek a transzporterhez az extracelluláris oldalon, vagyis a Na^+ megkötődése olyan konformációváltozást idéz elő, amely a glükóz megkötődését elősegíti. Mivel a sejtben kívül nagy a Na^+ koncentráció, az nagy valószínűséggel kötődik a fehérjéhez, ami ezáltal az alacsony koncentrációban jelenlévő glükózt nagyobb affinitással köti. Az intracelluláris oldalon éppen a fordítottja történik: az alacsony Na^+ -koncentráció a disszociációnak kedvez, amit szükségszerűen követ a glükóz leválása is. A sejtől a *szimport*rendszer működése során bejutó Na^+ -mennyiséget a Na^+ - K^+ -ATP-áz pumpálja ki, így módon a Na^+ - K^+ pumpa közvetve a glükóztanszport egyik „hajtóereje”.

4.1.4. III/4.1.4. Makromolekula- és részecsketranszport

Makromolekulák és részecskék szállítása membránon keresztül transzportfehérjékkel nem lehetséges. Az ilyen transzport mechanizmusa alapvetően különbözik az iontranszportétól. A kifelé irányuló transzport, az **exocitózis** általában úgy megy végbe, hogy a szekréció tárgyát képező molekulák a citoplazmában található vezikulákban a plazmamembránhoz adszorbeálódnak, majd a plazmamembrán és a vezikulamembrán fúziójával a vezikula tartalma az extracelluláris térbe ürül.

Hasonló, de fordított irányban működő mechanizmus szerint játszódik le a makromolekulák felvétele, az **endocitózis**. Ilyenkor a plazmamembrán egy része befűződik, majd az extracelluláris folyadék egy meghatározott mennyiségét magába zárva lezárul, és végül intracelluláris vezikulát képezve leválik a plazmamembránról. Az endocitózisnak két fajtáját szokás megkülönböztetni. A **pinocitózis** során a lefűződő vezikulák kicsik, bennük csak oldószer (víz) és oldott molekulák szegregálódnak. A **fagocitózis** speciális sejtek (például makrofágok) funkciója, amelynek során nagyobb részecskék (például mikroorganizmusok, sejttörmelékek stb.) kerülnek a sejt belsejébe. Hasonló folyamat révén transzportálódnak a sejteken belül a riboszómák felszínén szintetizált makromolekulák, ilyenkor a Golgi-apparátusról vagy az endoplazmatikus retikulumról leválik egy-egy, az újonnan szintetizált makromolekulákat tartalmazó transzportvezikula.

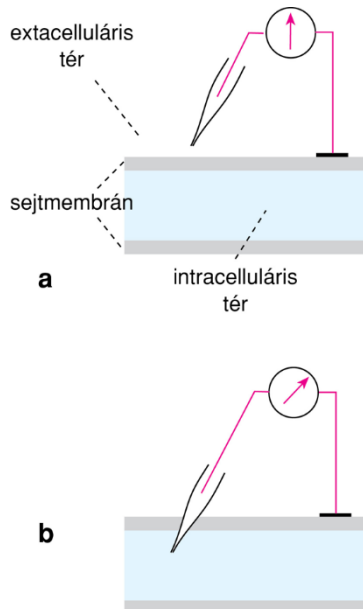
4.2. III/4.2. A nyugalmi membránpotenciál

A továbbiakban tárgyalandó ismeretek túlnyomó részét a tintahal óriás axonja, valamint preparált izomsejk vizsgálatával kapták, amelyek mérete lehetővé teszi, hogy a sejtekbe egy, esetleg két mikroelektrodot lehessen bevezetni. A mikroelektrodok igen vékony ($d < 0,5 \mu\text{m}$) üvegapillárisok, amelyek KCl-oldattal vannak megtöltve. (A K^+ és a Cl^- vízben mért mobilitása közel azonos, így a KCl-dal töltött elektród alkalmazásával az elektród nyílásánál el lehet kerülni a zavaró diffúziós potenciálok keletkezését.) Vezessünk egy idegrost belsejébe és helyezzünk a sejtmembrán külső felszínére egy-egy nem polarizálódó elektródot a III.26b. ábra szerinti elrendezésben. Ha a két elektród közé érzékeny feszültségmérő berendezést kapcsolunk, a mérőműszer elektromos potenciálkülönbséget jelez.

Tapasztalat szerint nyugalomban nemcsak az idegrostok, de valamennyi élő sejt belseje és külső felszíne között elektromos potenciálkülönbség mérhető, amit **nyugalmi potenciálnak** nevezünk. Az egyes sejtekre jellemzően a nyugalmi potenciál értéke -30 és -100 mV között változik. A negatív előjel megegyezés szerint azt jelenti, hogy az intracelluláris tér potenciálja mindig negatív az extracelluláris térhez képest.

A nyugalmi potenciál megértéséhez vizsgáljuk meg az extra- és intracelluláris tér kémiai összetételét és az azokat alkotó ionok koncentrációviszonyait. Az élő sejtet alkotó molekulák és ionok közül a membránpotenciál kialakulásával kapcsolatban kiemelt szerepe van a K^+ , a Cl^- és a Na^+ ionoknak, továbbá az intracelluláris térben jelen lévő foszfát- és fehérje-anionoknak, amelyekre nézve a sejtmembrán átjárhatatlan. Az egyértékű ionok fenti sorrendje egyúttal a hidratált ionok méretének növekvő sorrendjét is jelenti. Koncentrációjukra vonatkozóan sokféle sejt esetében végeztek méréseket. A III.7. táblázatban példaként három különböző sejtípus esetében kapott eredményeket tüntetjük fel. A sejtekre általánosan jellemző a sejtben belüli nagy K^+ - és kis Na^+ -koncentráció, míg az extracelluláris térben éppen fordított a helyzet. Az anionok közül a Cl^- ion koncentrációja az intracelluláris térben lényegesen kisebb, mint a sejt környezetében.

A membrán két oldala között tehát nemcsak az elektromos potenciál, de az egyes ionok koncentrációja is különböző. A membránpotenciál kialakulása szempontjából az ionok koncentrációesése mellett meghatározó, hogy a membrán nem azonos mértékben átjárható az egyértékű ionok számára és teljesen impermeabilis a nagy fehérje- és foszfát-anionokkal szemben.



III.26. ábra. Vázlat a nyugalmi membránpotenciál méréséhez. a) A regisztráló és az indifferens elektród is az axon külső felszínén foglal helyet. b) A regisztrálóelektród behatol az intracelluláris térbe, a mérőműszer potenciálkülönbséget jelez

4.2.1. III/4.2.1. A nyugalmi membránpotenciál értelmezése a Goldman–Hodgkin–Katz- (GHK-) egyenlettel

Az ionok membránon keresztül történő transzportjára korábban felírt egyszerű Onsager-egyenlet (III.119) szerint a k -adik egyértékű ion anyagáram-sűrűségét a következő összefüggés adja meg:

$$J_k = u_k k T \left(\frac{\Delta c_k}{\Delta x} + c_k \frac{F}{RT} \frac{\Delta \varphi}{\Delta x} \right), \quad (\text{III.120})$$

ahol felhasználtuk a diffúziós együttható és a mozgékonyág között fennálló ((III.33), $D_k = u_k k T$) kapcsolatot. Amennyiben Δx -et a membrán vastagságával azonosítjuk, $\Delta \varphi$ a nyugalmi membránpotenciálként lenne felfogható. Az egyes J_k ionáramok azonban valószínűleg nem függetlenek egymástól, a membránpotenciál valódi értékének kiszámításához ezt a kapcsolatot is tekintetbe kell venni. Ehhez azt a tapasztalatot használjuk fel, hogy nyugalomban a membrán két oldala között meglévő elektromos potenciálkülönbség nem változik. Emiatt a membránon átfolyó eredő elektromosáram-sűrűség, valamint – egyértékű ionokról lévén szó – az eredő anyagáram-sűrűség is zérus, azaz $\sum J_k = 0$. Ebbe az egyenletbe behelyettesítve az egyes ionoknak megfelelő J_k kifejezéseket (III.120), majd megoldva (a membrán két oldala közötti x_1 -től x_2 -ig terjedő szakaszra) megkapjuk a membrán két oldala között mérhető $U = (\varphi_{II} - \varphi_I)$ membránpotenciált (feszültséget):

$$U = (\varphi_{II} - \varphi_I) = \frac{RT}{F} \ln \frac{\sum_{k=1}^m p_k^+ c_{k,II}^+ + \sum_{k=1}^n p_k^- c_{k,I}^-}{\sum_{k=1}^m p_k^+ c_{k,I}^+ + \sum_{k=1}^n p_k^- c_{k,II}^-}, \quad (\text{III.121})$$

(III.121)

ahol m a pozitív töltésű, n pedig a negatív töltésű ionok fajtáinak a száma, p_k a k -adik ion permeabilitása, $c_{k,I}$ és $c_{k,II}$ pedig a k -adik ion koncentrációja az intra-, (I) illetve az extracelluláris (II) térben. A (III.121) kifejezést felírhatjuk a leginkább szerepet játszó ionokra:

$$U = (\varphi_{II} - \varphi_I) = \frac{RT}{F} \ln \frac{p_K [K^+]^{II} + p_{Na} [Na^+]^{II} + p_{Cl} [Cl^-]^I}{p_K [K^+]^I + p_{Na} [Na^+]^I + p_{Cl} [Cl^-]^{II}}. \quad (\text{III.122})$$

(III.122)

Ez a **Goldman–Hodgkin–Katz-egyenlet** (GHK), amely szerint nyugalomban a sejtmembrán két oldala között állandó elektrokémiai potenciálesések által fenntartott ionáramlás folyik olyan módon, hogy az egyes ionáram-sűrűségek egymást kompenzálják. Megjegyezzük, hogy a külső és belső tér között az ionok koncentrációkülönbsége állandó, aminek a fenntartása csak az ellenkező irányú aktív transzport, vagyis a Na^+/K^+ pumpa működésével lehetséges. A nyugalmi membránpotenciálnak ez a (passzív) transzportmodellje jelentős előrelépést eredményezett a membránpotenciál megértésében. A nyugalmi membránpotenciálnak a fenti összefüggés alapján számított értékei igen jó egyezést mutattak a mérés útján nyert értékekkel, ami alátámasztotta az elgondolás helyességét. A III.8. táblázatban néhány összehasonlítható számított és mért nyugalmi membránpotenciál-értéket mutatunk be.

3.8. táblázat - III.7. táblázat. Tipikus ionkoncentrációk néhány sejt típus esetében

	intracelluláris koncentráció (mmol/l)			extracelluláris koncentráció (mmol/l)		
	Na ⁺	K ⁺	Cl ⁻	Na ⁺	K ⁺	Cl ⁻
sejt						
tintahal óriásaxon	72	345	61	455	10	540
békaizom	20	139	3,8	120	2,5	120

patkányizom	12	180	3,8	150	4,5	110
-------------	----	-----	-----	-----	-----	-----

3.9. táblázat - III.8. táblázat. A nyugalmi potenciál mért ($U_{\text{mért}}$) és számított értékeinek összevetése két sejttípus esetében (mV-ban megadva): U_{GHK} a GHK-egyenlet alapján számított nyugalmi potenciál, $U_0(\text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Cl}^-)$ az egyensúlyi potenciál a III.7. táblázat adataival a Nernst-egyenlet alapján, 25 °C-on számolva

	tintahal óriásaxon	békaizom
$U_{\text{mért}}$	-62	-92
U_{GHK}	-61,3	-89,2
$U_{0\text{Na}^+}$	+47	+46
$U_{0\text{K}^+}$	-91	-103
$U_{0\text{Cl}^-}$	-56	-88

4.2.2. III/4.2.2. A nyugalmi membránpotenciál és a Nernst-egyenlet kapcsolata

Az előzőekben tárgyalt GHK-egyenlet és a mögötte álló formalizmus helyesen írja le a nyugalmi membránpotenciál létrejöttét mint jelenséget. Ez a megközelítés óriási jelentőségű volt, hiszen – mint látni fogjuk – alkalmas arra is, hogy megfelelő kiterjesztésekkel értelmezze a helyi (lokális) potenciálváltozások természetét, sőt leírja az ingerületi állapotban tapasztalható akciós potenciál tulajdonságait. Ez a modell azonban az egyes ionokat, azok permeabilitási viszonyait elektromos áramlási paraméterként veszi figyelembe, és nem foglalkozik azzal, hogy részleteiben biokémiai, molekulaszervezeti oldalról hogyan alakulnak ki ezek a jellemző paraméterértékek. Mivel a membránpotenciál létrejötte élettanilag alapvetően fontos jelenség, ennek magyarázatára a kutatók sokféle megközelítéssel próbálkoztak.

Egy lehetséges elképzelés szerint a membrán egy zárt rendszert elválasztó hártya, amelyen az ionok átjárhatnak, és a membránpotenciál a zárt rendszer, iononként egymástól függetlenül kezelt termodinamikai egyensúlyára jellemző. E feltétel mellett a hártya két oldalán az elektrokémiai potenciál (minden ionra külön-külön) megegyezik azaz $\mu_{e,i}^{\text{II}} - \mu_{e,i}^{\text{I}} = 0$, ahol az I és II indexek a membrán két oldalára vonatkoznak, az i index pedig az i -edik iont jelenti. A megfelelő elektrokémiai potenciál kifejezéseket behelyettesítve (lásd (III.62) és (III.109)) kapjuk:

$$\mu_0 + RT \ln c_i^{\text{I}} + zF\varphi_i^{\text{I}} = \mu_0 + RT \ln c_i^{\text{II}} + zF\varphi_i^{\text{II}} .$$

Az egyenletből az elektromos potenciálkülönbséget kifejezve az alábbi összefüggést nyerjük:

$$\varphi^{\text{II}} - \varphi^{\text{I}} = \frac{RT}{zF} \ln \frac{c_i^{\text{I}}}{c_i^{\text{II}}} ,$$

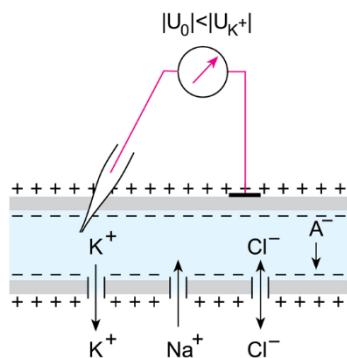
ami a Nernst-egyenlettel analóg ($R/F = k/e$) (lásd még a I/3.1.2.c rész (I.29) összefüggést). Amennyiben egyetlen ionra tekintünk, megállapítható, hogy a membrán két oldalán nyugalmi állapotban az ionkoncentráció különböző. Ezt mutatja be a III.7. táblázat is. Ebben az esetben iononként alkalmazhatjuk a Nernst-egyenletet és ennek alapján megadhatjuk egy-egy „koncentrációs elem” elektromotoros erejét (egyértékű ionokra):

$$U_0 = \varphi^{\text{II}} - \varphi^{\text{I}} = \frac{RT}{F} \ln \frac{c^{\text{I}}}{c^{\text{II}}} . \quad (\text{III.123})$$

A III.8. táblázat (alsó része) kétféle sejtmembránra, Na^+ , K^+ , Cl^- ionokra mutat be ilyen adatokat. Látható, hogy a Nernst-egyenlet eltérő eredményekre vezet, és csak a Cl^- ionok esetében van mindkét érték a mért, illetve GHK- egyenletből számolt érték közelében (annál kicsit kisebbek).

Láthatjuk viszont, hogy például a tintahal óriásaxonban a Na^+ ion egyensúlyi potenciálja +47 mV-nak adódik. Ez az érték egyértelműen mutatja, hogy a Na^+ nyugalmi állapotban nincs egyensúlyban. (A Na^+ -egyensúly hiánya, valamint a membrán korlátozott Na^+ -permeabilitása miatt meglévő Na^+ -szivárgás csökkenti a K^+ -kiáramlással létrehozott membránpotenciált is, ezért annak abszolút értéke kisebb lesz, mint a K^+ egyensúlyi potenciálja (lásd a III.27. ábrát).

Ezek a problémák mutatják, hogy a Nernst-egyenlet önmagában nem alkalmas a membránpotenciál jellemzésére. A sejtmembrán és környezete nem tekinthető egyensúlyban levő zárt rendszernek, és az egyes ionok viselkedése nem független egymástól (lásd még a *Donnan-egyensúly biológiai membránokra*).

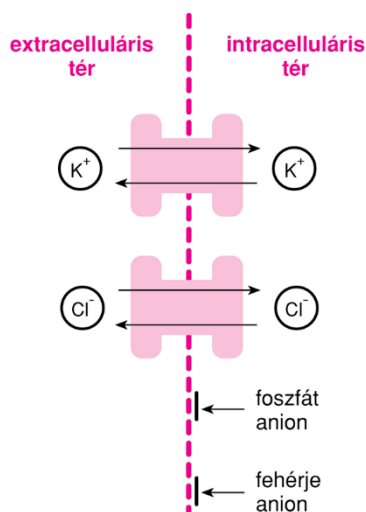


III.27. ábra. A nyugalmi potenciál kialakulása a membrán K^+ , Na^+ , és Cl^- permeabilitásának figyelembevételével

Donnan-egyensúly biológiai membránokra



Frederick George Donnan (1870–1956) angol vegyész a XX. század elején vizsgálta a féligáteresztő hártvány két oldalán kialakuló koncentrációkülönbséget biner elektrolitoldatok egyensúlya esetén. Azt az egyensúlyi koncentrációkülönbséget, amely egy féligáteresztő membrán két oldalán elhelyezkedő sóoldat ionjai között elektroneutralitás mellett kialakul, ha az egyik térfél a membránon átjutni képtelen polielektrolitot tartalmaz, **Donnan-egyensúlynak** nevezzük. A Donnan-egyensúlyt biológiai membránokra a következő módon képzelhetjük el.



Kiindulásként helyezzünk az „intracelluláris” (*II.*) térrészbe meghatározott mennyiségű átjutásra képtelen polianiont olyan módon, hogy a kísérő- kation K^+ legyen (ez biztosítja az elektromos neutralitást). Az „extracelluláris” (*I.*) térrészbe helyezzünk KCl oldatot. Tekintettel arra, hogy a membrán permeabilis mind a K^+ , mind a Cl^- ionokra, a koncentrációkülönbség miatt a Cl^- ionok az *I*-es térrészből a *II*-es térrész felé diffundálnak. A koncentrációkülönbség természetesen nem csökken nullára, mivel az említett Cl^- ionáram a *II*-es térrészben az *I*-es térrészhez képest negatív töltésfelesleget hoz létre, a kialakuló elektromos erőtér pedig gátolja a Cl^- ionok diffúzióját. A folyamat addig tart, amíg az elektromos erőtér által létrehozott Cl^- ionáram egyensúlyba nem kerül az ellenkező irányú diffúziós árammal. A polianion koncentrációkülönbségének a kiegyenlítődésként történő megváltozását a membrán szelektív permeabilitása nem teszi lehetővé. Az elektromos tér a szigetelő lipid kettős réteg két oldalán egy meghatározott felületi töltéssűrűséget hoz létre. Az egyensúly beállta előtt természetesen megindul a K^+ ionoknak a Cl^- ionokkal párhuzamos vándorlása is azért, hogy az *I*-es és *II*-es térrészben az elektromos semlegesség továbbra is fennmaradjon. A dinamikus egyensúly beálltakor elektromos kettős réteg alakul ki úgy, hogy az elektromos erőtér és a koncentrációkülönbségek miatti ellentétes töltésáramlások egymással egyensúlyt tartanak mind a K^+ mind a Cl^- ionokra nézve. A modell szerint a két térrészre külön teljesülnie kell az elektromos neutralitásnak, vagyis

$$[K^+]^I = [Cl^-]^I = c \quad \text{és} \quad [K^+]^{II} = [Cl^-]^{II} + na, \quad (1)$$

ahol c az *I*-es térrészben a sókoncentrációt, na pedig a *II*-es térrészben az átjutásra képtelen anion koncentrációját jelöli. Az egyensúly feltétele a neutralitást figyelembe véve a kémiai potenciálok azonossága a membrán két oldalán, azaz

$$\mu_{K^+}^0 + RT \ln [K^+]^I + \mu_{Cl^-}^0 + RT \ln [Cl^-]^I = \mu_{K^+}^0 + RT \ln [K^+]^{II} + \mu_{Cl^-}^0 + RT \ln [Cl^-]^{II}.$$

Ebből következőleg adódik az átjutásra képes ionok koncentrációira a

$$\frac{[K^+]^{II}}{[K^+]^I} = \frac{[Cl^-]^I}{[Cl^-]^{II}} = r \quad (2)$$

összefüggés. Az elektroneutralitásból következő feltételeket (1) is tekintetbe véve, (2) alapján r -re a következő másodfokú egyenlet adódik:

$$rc = \frac{c}{r} + na \quad \text{azaz} \quad r^2c - c - nar = 0, \quad (3)$$

mivel $[K^+]^{II} = rc$ és $[Cl^-]^{II} = \frac{c}{r}$.

A (3) másodfokú egyenlet megoldása az

$$r = \frac{na + \sqrt{4c^2 + (na)^2}}{2c} \quad (4)$$

összefüggésre vezet. A koncentrációk közötti nagyságrelációkra pedig a $[K^+]^{\text{II}} \geq [K^+]^{\text{I}} = [Cl^-]^{\text{I}} \geq [Cl^-]^{\text{II}}$ adódik.

Mivel általában $r \neq 1$, az ionkoncentrációk különbségéből (a Nernst-egyenlet alapján) adódik egy 0-tól különböző potenciálkülönbség, amelyet **Donnan-potenciálnak** szokás nevezni. A (4) összefüggésből az is látszik, hogy $r = 1$ csak $na = 0$ mellett teljesül, egyébként ha a membránon átjutni képtelen anionok is találhatók a rendszerben, $r > 1$ minden esetben. A citoplazmamembránra alkalmazva ez annyit jelent, hogy a Donnan-potenciál mindig negatív és egyértelműen a citoplazmában található nem permeábilis anionok következménye.

A (4) összefüggésből következik az is, hogy r értéke (és ezzel együtt a Donnan-potenciál) a sejten belüli a membránon átjárni képes anionkoncentráció (na) növekedésével nő, a sejten kívüli sókoncentráció (c) növekedésével pedig csökken.

Diffúziós membránpotenciál

A sejtmembrán környezetében kialakuló transzportjelenségek és elektromos potenciálviszonyok értelmezésénél nemcsak az egyensúlyi feltételeket kell megfontolnunk, hanem azt is, hogy ezek az állapotok az ionok mozgása, diffúziója során alakulnak ki.

Ha egy meghatározott koncentrációjú elektrolit (például HCl-oldat) rétegre ugyanazon elektrolitból egy kisebb koncentrációjú oldatot rétegezzük, a koncentrációkülönbségek miatt megindul a H^+ és Cl^- diffúziója a kisebb koncentrációjú tartomány felé. Mivel a H^+ ionok mozgékonyabbak (nagyobb a diffúziós állandójuk, mivel $D = ukT$), a diffúzió során a Cl^- ionokhoz képest mintegy „előreszaladnak”. Ennek eredményeképpen a változó koncentrációjú rétegekben a töltésegysúly felborul, és az átmeneti tartomány kisebb koncentrációjú részében relatíve több lesz a mozgékonyabb H^+ , ezért ez az oldal pozitívabb potenciálon lesz, mint a töményebb része az oldatnak. Ez a diffúziós potenciál annál nagyobb, minél inkább eltér a pozitív és a negatív ionok mozgékonyasága (u) egymástól.

Természetesnek tűnik, hogy ez a diffúziós potenciál csak átmenetileg létezik, mert a tekintett rendszerben a koncentrációkülönbségek előbb-utóbb kiegyenlítődnek. Az oldatban mérhető diffúziós potenciálok gyakorlati jelentőségét az is csökkenti, hogy azok kialakulását bármilyen egyéb áramlás (konvekció) megzavarja, illetve megszüntetheti. Ezzel ellentétben a diffúziós potenciál jóval stabilabb lehet olyan rendszerekben, amelyekben a különböző koncentrációjú térrészeket szelektív permeabilitású membrán választja el. Biológiai membránokról általánosan ismert, hogy azok permeabilitása függ az ionok fajtájától. Az ilyen membránokkal elválasztott különböző koncentrációjú oldatok esetén fellépő diffúziós potenciálokról is elmondható, hogy azok átmeneti jelenségek, ha a membrán permeábilis minden ionra nézve. Természetesnek tűnik, hogy a különböző mozgékonyaság esetén a koncentrációviszonyoknak is szerepük van a diffúziós potenciál kialakításában.

Ha a Donnan-egyensúlynál bemutatott ábrán leírt zárt rendszer membránjának permeabilitása a különböző ionfajtákra nézve különböző és a rendszer II-es térrészében a membránon átjutni képtelen polianionok is előfordulnak, akkor (a Donnan-egyensúly beállta előtt) a membrán két oldala között mért változó diffúziós potenciál értéke a Donnan-potenciál értékéhez közelít, és az egyensúly beálltakor értéke azzal megegyezik. Az egyensúlyhoz „vezető úton” minden állapot egy kváziegyensúlynak felel meg, amit a két oldal külön-külön vett elektromos semlegessége, valamint a koncentrációeloszlások és az ionáramok közötti átmeneti egyensúly jellemez. Ez az egyensúly azért átmeneti, mert igaz, hogy az ionáramoknak az összege nulla, de ez nem teljesedik az egyes ionok áramlására külön-külön. Ezért az ionmegoszlások időben változnak, ami a diffúziós potenciál megváltozásával jár.

Egyetlen egyértékű só ($z = 1$) tartalmazó rendszerben a pozitív és a negatív töltésű ionok anyagáram-sűrűségét a (III.116) Onsager-egyenlet alapján írhatjuk fel (lásd még (III.115), (III.117), (III.118)):

$$J^+ = - \frac{c^+ u^+}{N_A} \left[RT \frac{\Delta \ln c^+}{\Delta x} + F \frac{\Delta \varphi}{\Delta x} \right], \quad J^- = - \frac{c^- u^-}{N_A} \left[RT \frac{\Delta \ln c^-}{\Delta x} - F \frac{\Delta \varphi}{\Delta x} \right].$$

(Az egyenletekben szereplő második tag előjele a pozitív és a negatív töltésű ionokra ható erő irányát tükrözi.) Egy membránnal két térrészre osztott rendszerben teljesülnie kell a $J^+ = J^-$ feltételnek, egyébként töltésfelhalmozódás lépne fel. Az egyenlet megoldása a

$$F\Delta\varphi = \frac{u^+ - u^-}{u^+ + u^-} RT \ln \frac{c^{II}}{c^I}$$

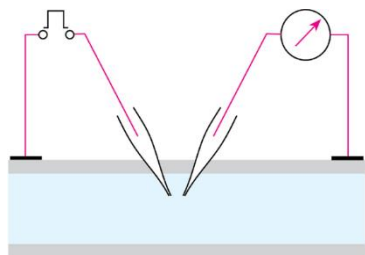
összefüggést eredményezi, ahol c^I , illetve c^{II} az I -es és II -es oldalon mérhető sókoncentráció.

Ez a tárgyalásmód kapcsolatot létesít a membránon átdiffundáló ionok jellemzői és a membrán két oldala között mérhető diffúziós potenciál között. Ha a rendszerben többfajta a membránon áthatolni képes anion és kation található és a fenti gondolatmenetet kiterjesztjük, a GHK-egyenlethez jutunk.

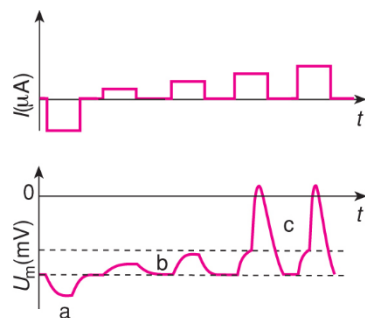
4.3. III/4.3. Membránpotenciál-változások az ingerküszöb alatt

4.3.1. III/4.3.1. Helyi (elektrotónusos) membránpotenciál-változások és elektromos modelljük

A nyugalmi potenciál mérésénél használt regisztrálóelektród (III.27. ábra) mellé helyezünk egy másik elektródpárt a III.28. ábra szerinti elrendezésben. Az intracelluláris térbe vezetett második elektródon át a sejtbe adott erősségű áramot vezetünk. Az áram irányával szabályozható módon (abszolút értékben nézve) tovább növelhetjük vagy csökkenthetjük a nyugalmi membránpotenciált (ennek megfelelően a membrán hiperpolarizálódik vagy depolarizálódik).



III.28. ábra. Kísérleti elrendezés vázlata a nyugalmi potenciál befolyásolásához

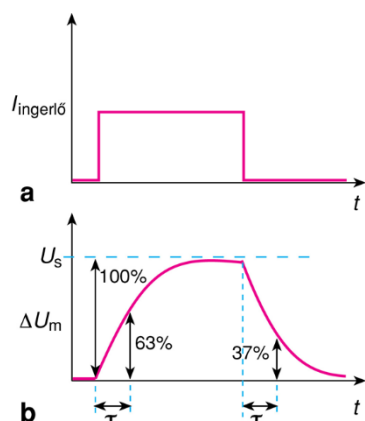


III.29. ábra. Négyzet alakú áramimpulzusok (felső sor) hatására ingerelhető sejtek membránján kialakuló membránpotenciál változások (alsó sor): a) hiperpolarizáció, b) küszöb alatti depolarizáció, c) küszöb feletti depolarizáció

A III.29. ábrán négyzet alakú áramimpulzus-sorozatra adott membránpotenciál-válaszjeleket mutatunk be. Látható, hogy egy küszöbérték alatt az áram irányától függetlenül a hatás erősségével arányos nagyságú válaszjeleket kapunk. A küszöbérték felett depolarizáló hatás esetén a válaszjel jellege az előzőtől különböző, és nagysága független attól, hogy a kiváltó hatás mennyivel haladta meg a küszöbértéket. Ez a jellegzetes válaszjel az ún. „akciós potenciál”, ami a sejtmembrán ingerületi állapotát jellemzi. Ezzel a feszültségjellel majd a III/4.4. részben foglalkozunk.

A mérésorozat másik fontos eredménye maga a válaszjelalak (ebben a részben a továbbiakban csak a küszöb alatti válaszjeleket tanulmányozzuk). A III.30. ábrán egy ennek megfelelő ingerlő áramimpulzust (négyzetgimpulzust) és a hatására kapott membránpotenciál válaszjelet mutatunk be. A hirtelen változó ingerlő

jel felfutó és lefutó ágához képest időben elhúzódo válaszjelet kapunk. Ehhez hasonló feszültségváltozások tapasztalhatók egy RC-kör feltöltődésekor, illetve kisülésekor (lásd a VII/1.2.2. részt). Ez a felismerés vezetett ahhoz a következtetéshez, hogy a sejtmembrán elektromos szempontból párhuzamos RC-körrel modellezhető.



III.30. ábra. a) Küszöb alatti depolarizáló áramimpulzus és a hatására bekövetkező elektrotónusos potenciálváltozás. b) A potenciálváltozás meredeksége az időállandóval (τ) jellemezhető (U_s a telítési érték, ami az RC-körben az U_T telepfeszültség megfelelője)

Ez nem meglepő, hiszen a sejtmembrán a permeabilitási állandókkal jellemzett, az egyes ionokra vonatkozó specifikus vezetőképességgel és kapacitív jelleggel is rendelkezik. Ugyanis a membrán egy nagy felületű szigetelőréteg, amelynek a két oldalán töltések halmozódnak fel. Az ennek megfelelő fajlagos kapacitás például emlősneuron esetén 10 nF/mm^2 körül van, ami például -70 mV membránpotenciál mellett körülbelül $4 \cdot 10^{11} \text{ C}$ töltés-felhalmozásra ad lehetőséget cm^2 -enként. (Megjegyezzük, hogy ez a látszólag rendkívül nagy szám csak elenyésző hányada a sejtben lévő összes pozitív illetve negatív töltéseknek.) Egy neuron felülete $0,01$ – $0,1 \text{ mm}^2$, így kapacitása általában

$0,1$ – 1 nF lehet.

A membrán kapacitív tulajdonsága mellett tekintetbe kell vennünk, hogy az egyes ionok, azaz töltések a szelektív ioncsatornákon keresztül át tudnak diffundálni a membrán egyik oldaláról a másikra („szivárgó áram”). A membrán tehát az egyes ionfajtákra nézve különböző vezetőképességgel rendelkezik. Mérési adatok szerint a membrán kapacitása időben állandó és nem függ a membránpotenciáltól. Vezetőképessége nyugalmi állapotban szintén állandó, ingerületi állapotban azonban a membránpotenciál és az idő függvényében jellegzetesen változik (lásd III.4.4.2.).

A fentiek szerint a III.30. ábrán bemutatott válaszjel jellege alapján a sejtmembrán egy olyan RC-körrel modellezhető, amelyben az egyes ionoknak megfelelő vezetőképesség (permeabilitás), elektromos ellenállásokkal van figyelembe véve, a két oldal közötti koncentráció-különbségnek megfelelő egyensúlyi potenciálok pedig mint elektromotoros erők szerepelnek (lásd III.31. ábra). Egy kiválasztott ion vándorlása membránon át az aktuális membránfeszültség (U_m) és az adott ion egyensúlyi potenciáljának különbsége (U_{0j}) hozza létre. Így Ohm-törvénye szerint a j -edik ionra nézve szelektív csatornán folyó **konduktív áram** erőssége I_j az alábbi összefüggéssel adható meg:

$$I_j = \frac{U_m - U_{0j}}{R_j}, \quad (\text{III.124})$$

ahol $1/R_j$ a csatorna vezetőképessége (permeabilitása), U_{0j} az adott ion egyensúlyi potenciálja, U_m pedig a membránpotenciál (feszültség).

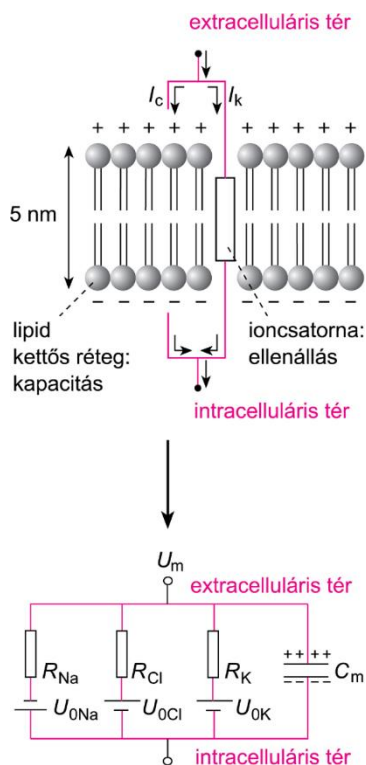
A GHK-egyenletnek megfelelő transzport-modell szerint nyugalmi állapotban $\Sigma I_j = 0$. Ennek a

$$\Sigma I_j = I_k = I_{Cl} + I_{Na} + I_K = 0 \quad (\text{III.125})$$

összefüggés felel meg. Ha azonban a sejtmembrán időbeli potenciálváltozásait is tekintetbe vesszük, akkor a kapacitív árammal (I_c) is számolnunk kell. Emiatt a transzportmodell alapfeltétele módosul az

$$I_C + I_k = 0 \quad (\text{III.126})$$

feltételre.



III.31. ábra. A membrán elektromos modellje. A membrán keresztirányú ellenállással (R_{Na} , R_{Cl} , R_K), kapacitással (C_m) és elektromotoros erővel (U_{0Na} , U_{0Cl} , U_{0K}) jellemezhető.

4.3.2. III/4.3.2. A membrán elektromos modelljéből származó eredmények

Az RC-kör modell alkalmas arra, hogy a mért membránpotenciál válaszfüggvény jelalakját értelmezzük, és ebből fontos következtetésekhez jussunk.

Az ingerlő áram ($I_{\text{ingerlő}}$) figyelembevételét úgy kell megtennünk, hogy a nyugalmi állapotra érvényes transzportmodell feltételei ezzel együtt fennálljanak:

$$I_C + I_k - I_{\text{ingerlő}} = 0. \quad (\text{III.127})$$

Megállapodás szerint $I_{\text{ingerlő}}$ negatív, ha pozitív töltések áramlanak be a sejtbe és fordítva. A **kapacitív áram** (I_C) az ismert összefüggés alapján ($I \cdot \Delta t = \Delta Q = C \cdot \Delta U$):

$$I_C = C_m \frac{\Delta U_m}{\Delta t}. \quad (\text{III.128})$$

A (III.127) egyenletbe behelyettesítve a konduktív (III.124) és kapacitív (III.128) áramra felírt összefüggéseket:

$$C_m \frac{\Delta U_m}{\Delta t} + \frac{U_m - U_0}{R_m} - I_{\text{ingerlő}} = 0. \quad (\text{III.129})$$

A (III.129) egyenletből meghatározhatjuk a membránpotenciál időbeli változását. A sugárzási intenzitásgyengülés (II/1.1.3.), vagy a radioaktív bomlási törvénynél (II/3.2.2.) megismert gondolatmenethez hasonlóan belátható, hogy a membránpotenciál időbeli változását az alábbi függvény írja le:

$$U_m(t) = U_t \left[1 - e^{-\frac{t}{R_m C_m}} \right], \quad (\text{III.130})$$

ahol t az áramimpulzus kezdetétől ($t = 0$) eltelt idő, U_i pedig a membránpotenciál telítési értéke az új egyensúly kialakulásakor. Megmutatható, hogy U_i -nek az ingerlés előtti nyugalmi membránpotenciáltól való eltérése egyenesen arányos az ingerlő impulzus nagyságával. U_m (III.130) összefüggés szerinti változása jó egyezést mutat a III.30b. ábrán is bemutatott kísérleti eredményekkel.

A kitevő nevezőjében szereplő idő dimenziójú mennyiség a membrán időállandója (τ), vagyis

$$\tau = R_m C_m \quad (\text{III.131})$$

C_m -ről az előzőekben szóltunk. R_m a membránt helyettesítő párhuzamos RC kör eredő ellenállása.

Az időállandó – hasonlóan az RC-kör időállandójához – azt az időt jelenti ami alatt a membránpotenciál változása eléri a telítési érték 63%-át

($1-(1/e)$ -ed részét lásd III.30b. ábra). Az ingerlés befejezése után a membránpotenciál nem ugrásszerűen tér vissza nyugalmi értékére, hanem exponenciális függvény szerint csökken:

$$U_m(t) = U_i e^{-\frac{t}{R_m C_m}} \quad (\text{III.132})$$

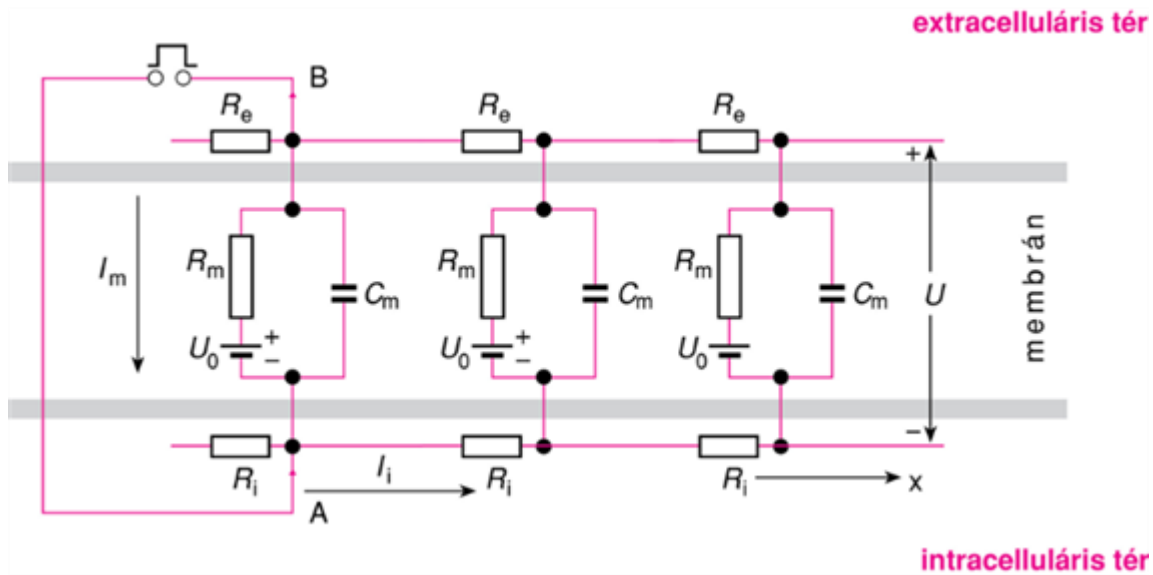
A csökkenés meredeksége szintén az időállandóval (τ) jellemezhető, ami azt az időt jelenti, ami alatt a membránpotenciál a kezdeti értékről az e -ed részére (37%-ára) csökken.

A membránpotenciál pillanatnyi értéke az áramimpulzus alatt és az ingerlés befejezése után függ a membrán időállandójától, vagyis vezetőképességétől és kapacitásától, valamint az ingerlő impulzus nagyságától és irányától. Az impulzus okozhat depolarizációt, mint azt a fentiekben láttuk; ellenkező irányú töltéseltolódás pedig hiperpolarizációhoz vezet [III.29. ábra a) és b) része]. Mind a hiperpolarizáció, mind a depolarizáció mértéke – ha az nem ér el egy bizonyos küszöbértéket – arányos az ingerlő impulzus amplitúdójával.

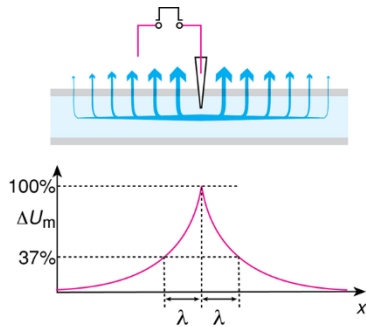
Az ideg- és izomsejtek működése szempontjából fontos kérdés az ingerrel keltett **feszültségváltozás terjedése a membránon**. A III.31. ábrán vázolt modellt továbbfejlesztve (az áramkör többszöri megismétlésével) egy nagyobb membránszakasz modelljét alkothatjuk meg (lásd a III.32. ábrát). Egy ilyen kiterjesztett modell alkalmas arra, hogy egy lokális változás hatását jellemezzük a kiszemelt hely (x_0) távolabbi környezetében (a membrán felületére fektetett x tengely mentén). Ez a változás szintén kiszámítható az elektromos modellből, és az adódik, hogy a membránpotenciál előidézett megváltozása exponenciálisan csökken az x_0 helytől mért távolság függvényében.

$$U_m(x) - U_m(x_0) = e^{-\frac{x}{\lambda}} \quad (\text{III.133})$$

A csökkenés meredekségét jellemző λ térkonstans a membrán elektromos tulajdonságaitól, nevezetesen a membrán keresztirányú (R_m) és az intracelluláris tér (R_i) ellenállásától függ. λ azt a távolságot adja meg, amelyen a lokálisan (négyzetgimpulzussal) keltett feszültségváltozás maximális értéke (100%) e -ed részére (37%-ra) csökken. Ez a távolság arányos $\sqrt{R_m/R_i}$ -vel. Látható, hogy mind a keresztirányú ellenállás növekedése (mielinhüvely), mind R_i – például a sejtátmérő növekedése révén bekövetkező – csökkenése λ növekedéséhez vezet, aminek nagy jelentősége van az ingerületvezetés sebességének szempontjából. Az $\Delta U_m(x)$ függvényt a III.33. ábrán szemléltetjük.



III.32. ábra. A sejtmembrán elektromos modelljének továbbfejlesztése a membránra adott impulzus hatásának értelmezésére



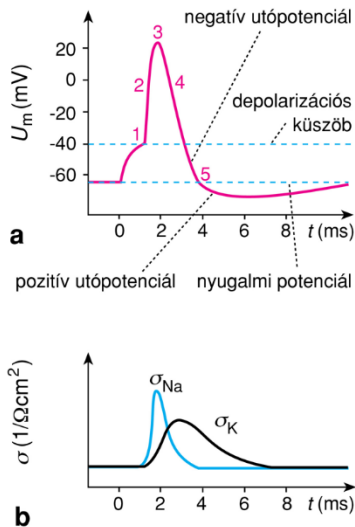
III.33. ábra. Az elektrotónusos potenciálváltozás maximális amplitúdója az ingerlés helyétől távolodva, a térkonstans értelmezése

4.4. III/4.4. A membránpotenciál tulajdonságai ingerületi állapotban: az akciós potenciál

4.4.1. III/4.4.1. Az akciós potenciál jelalakja

A III.34. ábrából kitűnik, hogy ha a depolarizáló áram által szállított töltés (vagyis az ezzel arányos depolarizáció mV-okban kifejezett mértéke) egy küszöbértéket meghalad, a depolarizáció az áramimpulzus nagyságától függetlenné válik. („Minden vagy semmi” törvény.) Az így kialakuló ~ ms időtartamú feszültségjel az **akciós potenciál**, ami állandó amplitúdóval terjed az ideg- vagy izomrostban.

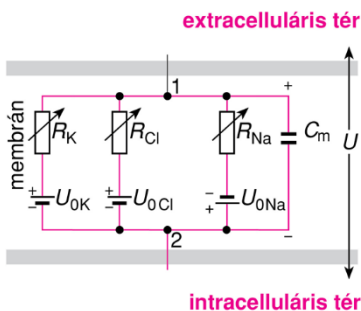
Az akciós potenciál lefolyása során annak jellemző szakaszai jól elkülöníthetők (III.34a. ábra). A membrán fokozatos depolarizációja során elérkezünk egy kritikus értékhez – **depolarizációs küszöb** –, amit a csúcspotenciál kialakulása követ. A csúcs felszálló ágát **depolarizációs**, a leszállót pedig **repolarizációs** szakasznak nevezzük. Általánosan igaz, hogy a két folyamat közül az előbbi játszódik le gyorsabban. A repolarizáció során megkülönböztethetünk egy negatív vagy depolarizációs és pozitív vagy hiperpolarizációs utópoteenciált. A különböző sejtformák akciós potenciáljai között lehetnek eltérések a potenciálcsőcs nagyságában és az egyes szakaszok időtartamában. A depolarizációs küszöb még adott sejt esetén sem tekinthető állandónak, függ az objektum állapotától és jellegzetesen változik az akciós potenciál lezajlása során. A potenciálcsőcs környezetében végtelen nagy, az ingerelhetőség szempontjából ez az abszolút refrakter szakasz. A csúcs lezajlását követően az ingerküszöb magasabb az eredeti értékénél (relatív refrakter szakasz), majd folyamatosan csökkenve éri el a nyugalmi állapotnak megfelelő értékét. Mindezen folyamatok hátterében a feszültségérzékeny ioncsatornák akciós potenciál alatti viselkedése áll.



III.34. ábra. a) Az akciós potenciál alatti feszültségváltozás az idő függvényében és a feszültségérzékeny ioncsatornák állapotának változása az egyes szakaszokban. 1) Na^+ -csatornák nyitása, 2) K^+ -csatornák nyitása, 3) Na^+ -csatornák egy részének inaktiválódása, 4) további K^+ kiáramlás, Na^+ -csatornák teljes bezáródása, 5) K^+ -csatornák zárása. b) a feszültségérzékeny Na^+ - és K^+ -csatornák fajlagos vezetőképességének tipikus változása az akciós potenciál ideje alatt.

4.4.2. III/4.4.2. Ionáramok az akciós potenciál alatt

Az előző (III/4.3.) pontban alkalmazott elektromos modell jelentős szerepet játszott az akciós potenciál jelalakjának értelmezésében is. Az elektromos modellt kidolgozó kutatók (Hodgkin, Huxley, Katz) arra gondoltak, hogy modelljük alkalmas az akciós potenciál leírására is, csak meg kell találni azokat a paramétereket, amelyeknek az ingerületi állapotban bekövetkező időbeli változása elvezet ehhez a speciális válaszjelhez. Egy új módszert az ún. „voltage-clamp” technikát kidolgozva bebizonyították, hogy ingerületi állapotban az ionok permeabilitása jellegzetes időbeli változást mutat (lásd A „voltage-clamp” módszer). Miután kísérletileg meghatározták ezeket a permeabilitás (vezetőképesség)-függvényeket, behelyettesítve az elektromos modell (III.35. ábra) egyenleteibe, meghatározták a membránpotenciál időbeli változását. Az így nyert függvény visszaadta az akciós potenciál jelalakját. A nyugalmi állapotban, a helyi megváltozások, valamint az ingerületi állapot esetén kialakuló membránpotenciál értelmezésére szolgáló modell kifejlesztéséért és alkalmazásáért méltán nyertek Nobel-díjat (1963-ban, illetve 1970-ben) a munkában részt vevő kutatók.



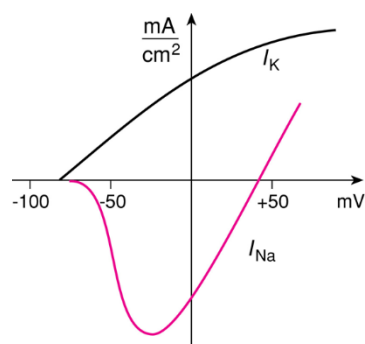
III.35. ábra. A membrán Hodgkin által módosított elektromos modellje, ami az állandó R_m helyett az ioncsatornák változó fajlagos vezetőképességét veszi tekintetbe

Az ingerület ideje alatt tehát a Na^+ és K^+ ionokra nézve a membrán átteresztőképessége megváltozik, az egyes ionokra eltérő módon (III.34b ábra).

A III.34b. ábra segítségével kövessük nyomon a membránpermeabilitás változását és az ionáramok irányát az akciós potenciál lefolyása alatt. A membrán depolarizációja során elérkezünk egy kritikus depolarizáció értékhez, amikor is a feszültségvezérelt Na^+ -csatornák kezdenek kinyitni. A megnövekedett Na^+ -permeabilitási állandó a Goldman–Hodgkin–Katz-egyenletnek megfelelően a membránpotenciál értékét a Na^+ -megoszlásnak megfelelő egyensúlyi potenciál felé tolja el, ami további depolarizációt eredményez. Ennek következtében a Na^+ ionok nagy mennyiségben áramlanak az intracelluláris tér felé a koncentrációesésnek megfelelően. A Na^+ ionok

jelenléte az intracelluláris tér negatív potenciálját zérus felé tolja, vagyis a depolarizáció fokozódik. Ez a Hodgkin-ciklus a pozitív visszacsatolás jellegzetes példája, amikor egy rendszer működésében beálló változás úgy hat vissza magára a rendszerre, hogy a primer változás mértékét fokozza. A teljesen nyitott Na^+ csatornák mellett a sejt egy ún. „nyugalmi” állapot felé tartana, ha a csatornák nyitott állapota stabil konformáció lenne. Ez azonban nem következik be, mert a Na^+ -csatornák automatikusan inaktíválódnak. Inaktív állapotban a csatornák nem vezetnek, a sejt ingerküszöbe végtelen nagy, az ilyen refrakter állapotban a sejt nem ingerelhető. A K^+ -csatornák nyitását még a Na^+ -csatornák is kinyitó depolarizáció hozza létre, azonban ezek a csatornák a Na^+ -csatornához képest késleltetve lépnek működésbe. Ilyen körülmények között a Na^+ -permeabilitás tovább csökken, a K^+ -permeabilitás nő. Az aktív pumpa is K^+ ionokat pumpál be a sejtbe, Na^+ ionokat pedig a sejtől ki. Mindezen folyamatok hatására visszaáll az eredeti nyugalmi állapot, sőt a K^+ -csatornák késleltetett záródása miatt átmeneti hiperpolarizáció lép fel. Az áramok maximális nagyságát és irányát mutatja a III.36. ábra a membránpotenciál függvényében. A nyugalmi potenciált helyreállító mechanizmus a negatív visszacsatolási elv alapján működik. A K^+ -csatornák záródása után a Na^+ -csatornák inaktívált állapotból egyszerű zárt állapotba kerülnek. Ebben az állapotban a sejt már újra ingerelhetővé válik, de ingerküszöbe magasabb a nyugalmi értéknél (relatív refrakter szakasz).

Látható, hogy a két ionfajta viselkedése jelentősen eltér egymástól. Érdekes adat a III.36. ábrából leolvasható membránpotenciál-érték, amely mellett a Na^+ -áramlás leáll ($I_{\text{Na}^+} = 0$): 45 mV. Ez az érték közelíti nyugalmi állapotban a Donnan-egyensúlynak megfelelő értéket, amelyet ellentétes értelmű előjellel a párhuzamos RC-modell elektromotoros ereje képvisel.



III.36. ábra. Ionáramsűrűség-értékek a voltage-clamp módszer segítségével állandó értéken tartott membránfeszültség függvényében

A „voltage-clamp” módszer

A „voltage-clamp” módszer esetén a mérőelektrodon kívül egy másik elektródpárt is alkalmazunk. Erre rákapcsoljuk azt a feszültséget, ami az aktuális membránpotenciált (U) beállítja. Ha a beállított feszültség eléri, vagy túlhaladja a depolarizációs küszöbszintet, akkor akciós potenciál indul el, és létrejön az arra jellemző ionvándorlás. Ez természetesen megváltoztatná az előírt U feszültséget. A megváltozást az említett elektródra helyezett feszültséggel kompenzáljuk, és ebben az esetben a kompenzáló áram nagysága egyenlő a mindenkori ionárammal, amit tulajdonképpen mérni akarunk. A teljes áram mérésén kívül a módszer lehetővé teszi az egyes ionok áramának mérését külön-külön is. E célból az extracelluláris folyadékhoz megfelelő anyagot kell adni, amely a membrán nátrium-, illetve káliumionra vonatkozó áteresztőképességét blokkolja (például tetrodotoxin, illetve tetraetil-ammónium).

4.4.3. III/4.4.3. Az akciós potenciál terjedése

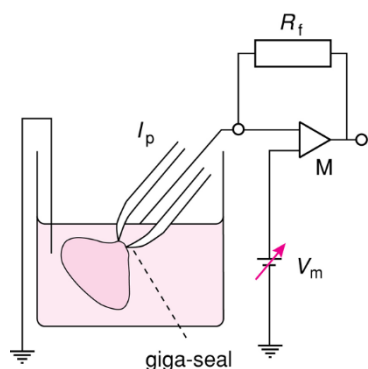
Ha a sejtmembrán egy meghatározott helyén kiváltott depolarizáció eredményeképpen kinyílnak a Na^+ -csatornák, akkor kialakul az akciós potenciál. Mivel a sejtmembránt mindkét oldalról vezető elektrolit veszi körül, a lokális elektromos télerősség-változások minden irányban továbbterjednek. A terjedés közben a közeg ellenállása miatt azonban a változások amplitúdója a távolság növekedésével rohamosan csökken, így azt várhatnánk, hogy egy jól meghatározott helyen kiváltott akciós potenciál lokális jelenség (vagyis terjedése közben nagymértékben csillapodik). Ha ténylegesen ez lenne a helyzet, az akciós potenciál alkalmatlan lenne arra, hogy segítségével a szervezet egymástól távol eső helyei között információátvitel menjen végbe. Valójában az akciós potenciál a neuronok membránján (beleértve az axon membránját is) gyengítetlenül továbbterjed. Az ehhez szükséges erősítést („reléállomás”-funkciót) a feszültségvezérelt Na^+ -csatornák kinyitása biztosítja. Az akciós potenciál helyével szomszédos régiókban a térkonstanssal szabályozott exponenciális lecsengés szabályai szerint (lásd III/4.3.2.) depolarizáció következhet be. Ez a depolarizáció például egy -90 mV nyugalmi

potenciálhoz képest a közeli régiókban olyan mértékű lehet, hogy ott a membránpotenciál értéke $-30-40$ mV lesz (depolarizációs küszöb), ez pedig elegendő ahhoz, hogy a feszültségvezérelt Na^+ -csatornák kinyíljanak. Tekintettel arra, hogy a Na^+ -csatornák záródását egy 1 ms ideig tartó inaktivált állapot követi, amely alatt a csatornák nem nyithatók, az akciós potenciál csak egy irányban terjed („visszafelé” nem!). A refrakter állapot megszűntével a depolarizációs hullám már olyan távolságba kerül, hogy annak hatása az ingerküszöböt nem éri el.

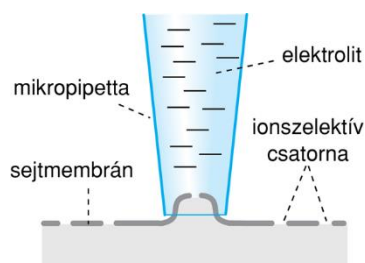
Ingerelhető emlőssejtek esetén az akciós potenciál terjedési sebessége 1 m/s és 30 m/s közé eshet.

A membránpotenciál mérésének módszerei

Elektrofiziológiai módszerek. A kis sejtek vizsgálatában problémát jelent, hogy a sejtek mérete miatt még mikroelektrodokkal sem mérhető a membránpotenciál. Új lehetőségeket jelentett az Erwin Neher és Bert Sakmann által az 1970-es években kidolgozott **patch-clamp** technika, amiért a két tudós 1991-ben Nobel-díjat kapott.

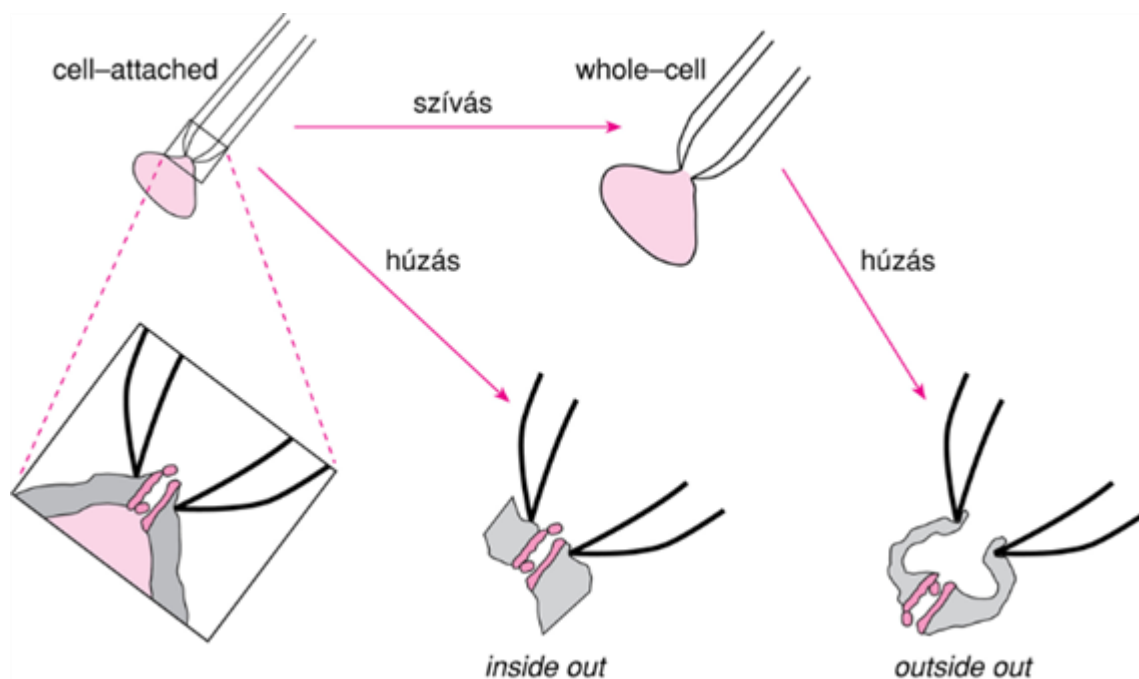


1. ábra. A patch-clamp mérőberendezés elektromos blokkdiagramja (I_p : pipettán átfolyó áram, R_f : visszacsatoló ellenállás, M: műveleti erősítő, V_m : voltage-clamp potenciál)



2. ábra. A pipetta és a membrán elhelyezkedésének vázlatja

Az 1. és 2. ábrán szemléltetett technika lényege röviden a következő. Egy vékony, csúcsán megközelítőleg $0,5-1$ μm átmérőjű üvegapillárist vagy más néven pipettát gyenge szívás mellett a sejtmembránra illesztünk. Az elektrolitoldatba merülő sejt felszínének molekulái és a pipetta között igen nagy (gigaohm) ellenállású kontaktus jön létre, ami lehetetlenné teszi a membrán és a pipetta között a töltött részecskék kiáramlását. A pipettába tetszőlegesen megválasztott összetételű elektrolitot töltünk. A méréshez használt egyik elektród a pipettafolyadékba, a másik a sejt körüli oldatba merül. Az elektródon keresztül áram csak a pipetta nyílása alatt lévő membránfolt (folt = patch) ioncsatornáin keresztül folyhat.



3. ábra. Patch-clamp konfigurációk

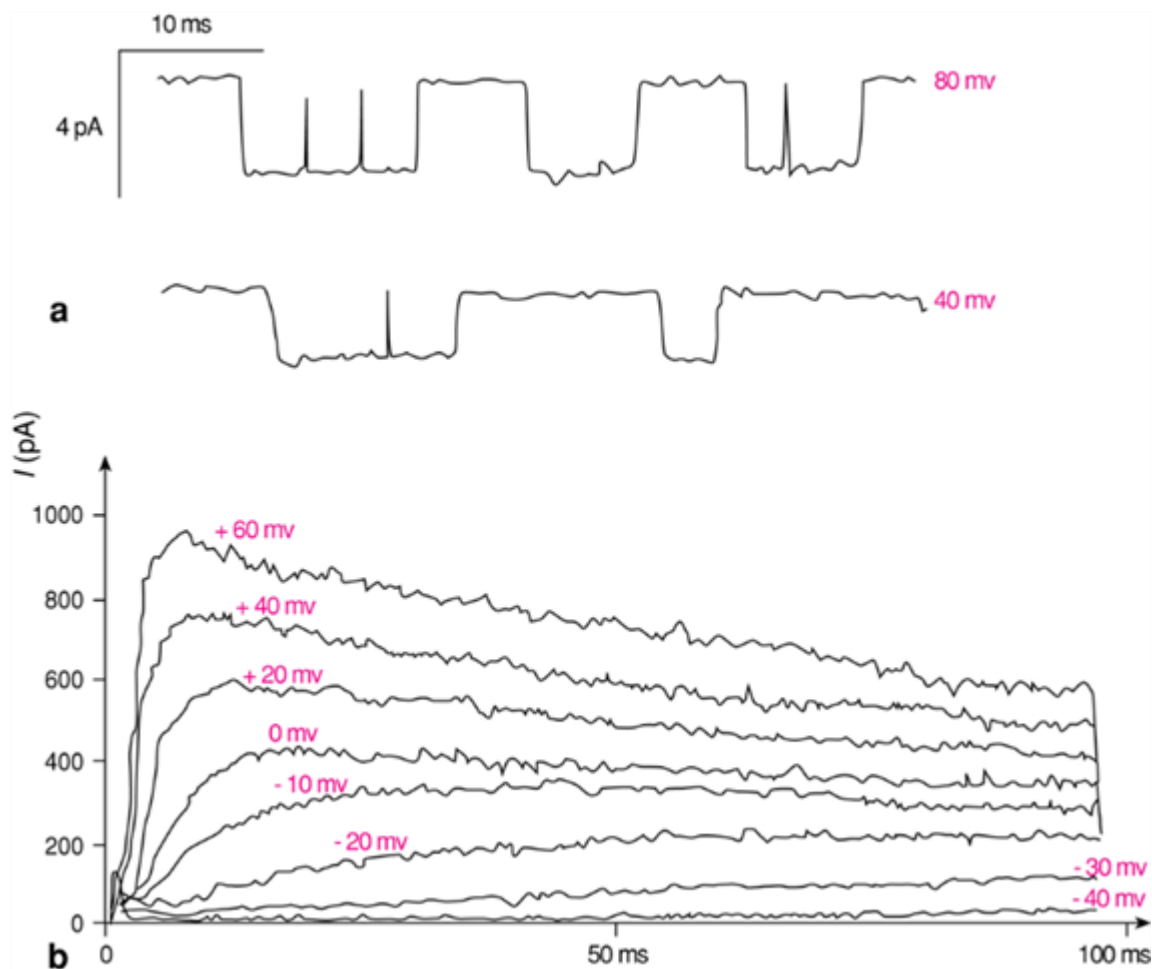
Ez az elrendezés, amit a 3. ábrán is szemléltetünk, az úgynevezett *sejt felszínén izolált folt* (Cell Attached Patch, CAP) konfiguráció. A pipettán átfolyó áram ez esetben megegyezik a pipetta által határolt membráncsatornában átfolyó árammal. A sejtmembrán potenciálját ekkor egy általunk meghatározott értékre állíthatjuk be negatív visszacsatolással működő áraminjektor segítségével. A csatornákon folyó áramot áramerősség-feszültség átalakító segítségével mérhetjük. A nagy ellenállás miatt pA nagyságrendű áramerősség is már jól mérhetővé válik. A CAP-konfiguráció a fiziológiai viszonyokat jól közelítő mérési elrendezés, amely a pipetta alatt elhelyezkedő kevés számú ioncsatorna miatt kiválóan alkalmas élő sejtek **egyedi ioncsatornáinak** (single channel recording) vizsgálatára (2. ábra). A 4a. ábrán egy ilyen mérés során K^+ -csatornáról készült felvétel részletét mutatjuk be. A csatorna kinyitásakor K^+ ionok áramlanak ki a sejtől a pipettába, amit a negatív irányú áramkiterések jeleznek. A csatorna ionkonduktanciája pS nagyságrendű. Az ionáramra jellemző, hogy egyetlen csatorna nyitása esetén nagysága mindig azonos. A nyitott állapot időtartama általában néhány ms, egy csatormanyitás alatt 10^5 - 10^7 ion halad át a csatornán.

A további lehetséges mérési elrendezéseket foglaltuk össze a 3. ábra segítségével. Ha egy erőteljes szívással a pipetta által bezárt membránt átszakítjuk, a pipettában lévő elektródoldat és az intracelluláris tér közötti barrier megszűnik. Ez a *teljes sejt elrendezés* (Whole Cell Configuration, WCC) lehetővé teszi a teljes membránfelületen átfolyó áram mérését. A 4b. ábrán humán limfocita feszültségfüggő K^+ -csatornájának árama látható a görbék mellett jelzett mértékű patch-depolarizáció során.

Ennek a mérési elrendezésnek a segítségével az ún. áramzár (current clamp) mérési módban a sejtmembránpotenciálját is megmérhetjük. Ha ugyanis ebben az elrendezésben a mérőelektród és az extracelluláris oldalon elhelyezett referenciaelektród között folyó áram erősségét nullára állítjuk be, a két elektród között mért feszültség a membránpotenciállal azonos nagyságú, de ellenkező előjelű lesz, hiszen e két feszültség algebrai összege az a zérus eredő feszültség, amely a pipettaáram nulla értéken való tartásához szükséges.

Ezzel a módszerrel vizsgálható például különböző gyógyszereknek a sejtek ioncsatornáira gyakorolt hatása, receptor-ligand kapcsolódás hatása a sejtek elektromos vezetőképességére, a csatorna nyitási, zárási kinetikájára, aktivációjára, átlagos nyitvatartási idejére, inaktivációjára stb.

A fenti mérési elrendezéseken túl a sejtről leválaszthatunk egy kis membráncsatornákat. Ez történhet úgy, hogy az eredeti intracelluláris membránfelszín néz a környező pufferoldat felé, vagy úgy, hogy az eredeti extracelluláris oldal érintkezik a környező oldattal. Az előbbi az *inside out*, az utóbbi az *outside out* konfiguráció.



4. ábra. Humán perifériás limfocita egyedi ioncsatorna a) és teljes sejt b) K^+ árama, a görbék mellett jelzett mértékű és időtartamú depolarizáció során

Fluoreszcens festékek alkalmazása a membránpotenciál mérésére

A módszer céljaira olyan fluoreszcens molekulák felelnek meg, amelyek megváltoztatják spektroszkópiai tulajdonságaikat elektromos térben. A fluoreszcenciaemisszió tulajdonságaiból eredően ezek a festékek (amelyek kifejlesztésében a magyar származású Grinvaldnek úttörő szerepe volt) az elektromos térerő változására rendkívül gyorsan reagálnak, és így alkalmasak a membránpotenciál terjedésének idegrendszeri elemekben való tanulmányozására.

A festékek egy másik jelentős csoportja ugyan nem változtatja meg a spektroszkópiai tulajdonságait elektromos térben, de mivel nettó pozitív vagy negatív töltéssel rendelkeznek, az elektrokémiai gradiensnek és az oldékonyságnak megfelelően oszlik meg a membrán két oldalán (illetve magában a membránban is). Ha a töltés változik, akkor az elektrokémiai gradiens változását a festék újraeloszlása követi. Ezek a változások kalibrálhatók, és a fluoreszcencia-spektroszkópiai mérés elvégzése után a membránpotenciál változása kiszámítható.

A jelenleg használt festékek vagy pozitív (karbocianinok), vagy negatív (oxonolok) töltésfelesleggel rendelkeznek. Ennek megfelelően az előbbieket alkalmazva minél nagyobb a membránpotenciál (azaz negatívabb a sejt belseje), annál több festék van a sejtekben. A negatív töltésű festékek kétségtelen előnye, hogy nyugalmi membránpotenciál-viszonyok mellett (a sejt belseje negatív) ezek nem jutnak be a sejtekbe, tehát toxikus hatásuk sincs. További előnyük, hogy a plazmamembrán potenciálját esetenként jelentősen meghaladó mitokondriumpotenciál nem zavarhatja a potenciálmérést. Ilyenkor minél kisebb a sejt belsejében található festék koncentrációja, annál nagyobb a membránpotenciál. A fluoreszkáló tulajdonságú festékek nagy érzékenységű vizsgálatokat tesznek lehetővé akár spektrofluoriméterekben (ilyenkor adott sejtszuszpenzió átlagos paramétereit mérjük), akár áramlási citométerben (egyedi sejtek adatait mérjük nagy sebességgel).

4. fejezet - IV. rész – Az érzékszervek biofizikája

Könyvünk ezen fejezete – eltérően a többitől – olyan területet érint (az érzékszervek működése), amelynek megértése bizonyos anatómiai, élettani ismereteket igényel. Ezért – anélkül, hogy részletekbe bocsátkoznánk – szükségesnek tartjuk a fizikai, biofizikai vonatkozások megértéséhez nélkülözhetetlen alapok rövid felidézését.

Az érzékelés: különféle impressziók észlelése (pl. fény, hang, szag, tapintás, vagy éhség) az öntudatunk bizonyítékai. Az **érezékszervek** olyan egységei szervezetünknek, amelyek **információt gyűjtenek és továbbítanak** a külvilágból, ill. testünk belső állapotáról a központi idegrendszerbe.

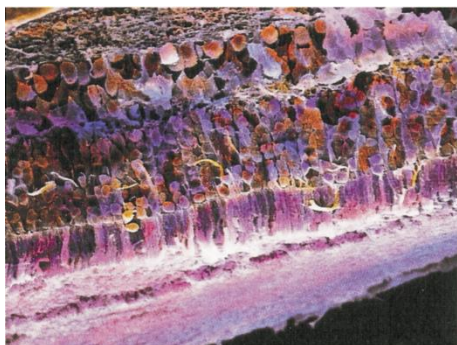
1. IV/1. Az érzékelés folyamatának általános törvényszerűségei

1.1. IV/1.1. A folyamat alapvető elemei és jellemzői

1.1.1. IV/1.1.1. Érzékelősejtek, receptorok, érzékszervek

Az információt mikroszkopikus struktúrák milliói, az ún. **receptorsejtek** gyűjtik össze. Ezek a test szinte minden részén megtalálhatók, a bőrben, az izmokban, az ízületekben, a belső szervekben, a véredények falaiban és a speciális érzékszervekben, úgy mint a szemben vagy a belső fülben (l. IV.1. ábra). A receptorok általában egy speciális ingerhatásra „szakosodtak”, pl. a fény egy bizonyos hullámhossztartományára, meghatározott alakú molekulákra, vibrációra vagy éppen a hőmérsékletre. Ingerületi állapotban a receptorsejthez kapcsolódó idegsejt „**tüzelni kezd**”, azaz elektromos impulzusok, **akciós potenciálok** sorozatát generálja. Az idegrost a fenti módon kódolt információt a gerincvelőbe, ill. az agyba továbbítja.

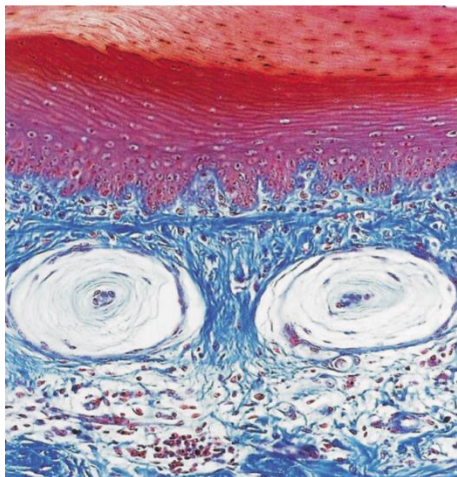
A legtöbb akcióspotenciál-sorozat áttételeken keresztül az agykéreg egy speciális részére kerül, melynek területén az egyes ingerek hely szerint elkülönülten képeződnek le. Az információk végső feldolgozása az agykéreg asszociációs területeinek feladata.



IV.1. ábra a. Példák különböző receptorokra - A szem retinájának metszeti képe a receptorsejtekkel



IV.1. ábra b. Példák különböző receptorokra - A belső fül szőrsejtjei



IV.1. ábra c. Példák különböző receptorokra - Nyomásérzékelő receptorok az ujjban

Különleges érzékszervek

A látásra, a hallásra, az ízeleésre és a szaglásra „szakosodott” receptorsejtek az ún. speciális érzékszervekben koncentrálnak. Ilyenek a „retina” a szemben, a „csiga” a fülben, az „ízlelőbimbók” a nyelven és a „szaglősejtek” az orrban. Az információ szintén idegrostok közvetítésével jut az agykéreg jól elkülönült részeire.

Tapintó és belső érzékszervek

Ezek az érzékszervek szolgáltatják a térbeli helyzet, a fájdalom a nyomás, a hőmérséklet és a vérben megtalálható egyes anyagok (pl. O₂, CO₂) koncentrációjából fakadó érzetek érzékelését.

A térbeli helyzet (propriocepció) receptorai, melyek az izmokban és az ízületekben található, szolgáltatják a testrészeink térbeli elhelyezkedésére vonatkozó információt. A fájdalomérzés az egyik legősibb, legprimitívebb érzékünk, amely a veszélyes nagyságú ingerre figyelmeztet, úgy a bőrben, mint a test belső részeiben megtalálhatók.

A bőrben sokféle receptorsejt található. Némelyik a bőrre ható nyomást érzékeli, mások pedig a szőrök, hajszálok elmozdulását jelzik. A bőr ingerlésének különböző fajtái eltérő érzékelést okoznak. Ilyenek a fájdalom, a csiklandozás, éles vagy tompa nyomás, a meleg vagy a hideg érzékelése.

1.1.2. IV/1.1.2. A receptorok fajtái, szerepe

A receptorokat vagy receptorsejteket, sokféleképpen osztályozhatjuk, ezek közül néhány lehetőséget a IV.1. táblázat mutat be.

Arisztotelész az emberi érzékelés tanulmányozásakor 5-féle érzékelésmódot említ. A fenti táblázat szerint ezek az exteroceptorokhoz kapcsolódó érzékelésmódok, az ún. **modalitások**, a látás, a hallás, a szaglás, az ízelelés és a tapintás. A modalitások közé tartoznak még az interoceptorokhoz kapcsolódók is, pl. a szomjúság, a légszomj érzése, a fájdalom, az izomfáradtság vagy a gyomorfeszülés stb. érzése. A modalitások valamilyen **fizikai vagy kémiai inger** érzékelésére specializálódtak. Az egyes modalitások által szolgáltatott **pszichofizikai érzetet**, vagy benyomást **kvalitásnak** is nevezik, ezek **fokozatait** pedig **kvantitásoknak** hívják. Minden érzékelésmechanizmus egy bizonyos ingererősség felett kezd el működni, ezt a fizikai, kémiai határt **ingerküszöbnek** nevezik. Az emberi test normális működésére nézve veszélyes erősségű ingereket fájdalomérzet kíséri, amit **fájdalomküszöbnek** neveznek.

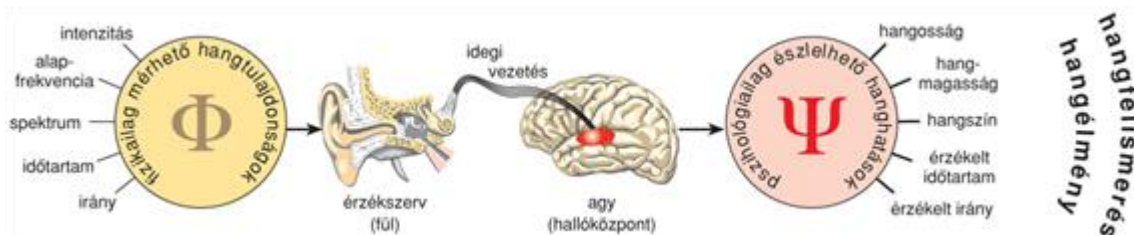
Az érzékelés folyamatát az ingertől az érzékelésig a hallás példáján keresztül szemléltetjük (IV.2. ábra). Az ábrából jól látható, hogy a hanginger több fizikai mennyiség (Φ = **fizika**) segítségével írható le, (intenzitás, frekvencia, stb.). Ezeket a műszerekkel is mérhető mennyiségeket az érzékszerv érzékeli, átalakítja, majd az agy megfelelő részére továbbítja. A pszichofizikai érzet összetevői (Ψ = **pszicho**) itt keletkeznek (hangosság, hangmagasság stb.). A fenti mennyiségek közötti összefüggés matematikailag is kifejezhető:

$$\Psi(\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots) = f[\Phi(\phi_1, \phi_2, \phi_3 \dots)].$$

(IV.1)

ahol $\phi_1, \phi_2, \phi_3 \dots$ az inger, $\psi_1, \psi_2, \psi_3 \dots$ az érzet egymásnak megfelelő jellemző paraméterei, f pedig a közöttük levő függvénykapcsolatot jelöli. A később ismertetendő pszichofizikai törvények a fenti általános összefüggés egy-egy speciális részét fejezik ki.

A IV.2. táblázat az előbbi fogalmaknak az érzékelt fizikai mennyiségekkel való összefüggéseit mutatja be néhány példán keresztül.



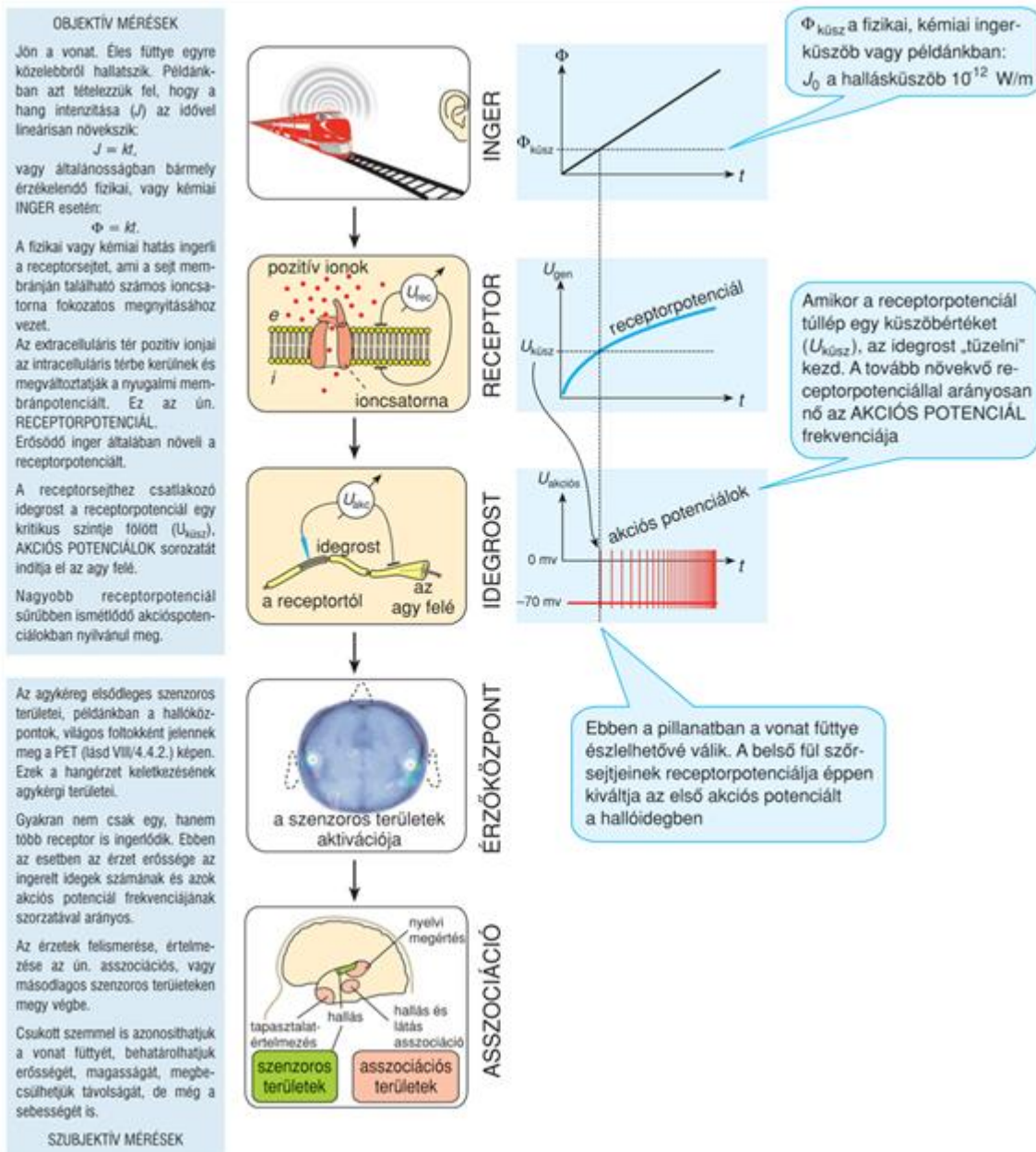
IV.2. ábra. Az érzékelés folyamata a hallás esetében

4.1. táblázat - IV.1. táblázat. A receptorok osztályozása

Osztályozás	Receptorsejt csoport	vagy	Mit érzékel? (fizikai, kémiai mennyiségek)	Példa
Inger szerint	Fotoreceptor		Fény (J, λ)	Retina a szemben
	Kemoreceptor		Kémiai anyagok (<i>koncentráció</i>)	Ízlelőbimbók a nyelven, szagérzékelők az orrban, vérkoncentráció-receptorok (O_2, CO_2)
	Termoreceptor		Hőmérséklet-változás (ΔT)	Bőr mint hőérzékelő
	Mechanoreceptor		Nyomás (tapintás) (p)	Bőr, szőr
	Baroreceptor		Nyomás (p)	Érfal (arteria carotis)
Hely szerint	Exteroceptor		A külvilág állapotát	Szem, fül, orr, nyelv, bőr
	Interoceptor		A test belső állapotát	Baroreceptor az érfalban, izomfeszülés, fájdalomérzékelő
	Proprioceptor		Testrészeink térbeli helyzetét	Izomorsó, ízület
Bonyolultság szerint	Általános érzékszervek		Egyedi vagy csoportos receptorsejtek	Hő, tapintás
	Speciális érzékszervek		Összetett érzékszervek	Szem, fül, orr, nyelv (nagyszámú receptorsejt)

4.2. táblázat - IV.2. táblázat. Példák receptorokkal kapcsolatos fogalmakra és kapcsolataikra

INGEREK (jellemző mennyiség)	TARTOMÁNY	INGERKÜSZÖB	FÁJDALOMKÜSZÖB	MODALITÁS (érzékelés mód)	ÉRZÉKELÉS HELYE (ÉRZÉKSZERV)	KVALITÁS (minőségi jellemző, milyen?)	KVANTITÁS (mennyiségi jellemző, mennyi?)	PERCEPCIÓ (érzetértelmezés)
Fény (J, λ)	10^{-9} lux – 10^5 lux, 400-800 nm	1-2 foton, 10^{-9} lux, (egy gyertya fénye 50 km-ről)	100 000 lux	LÁTÁS	Szem (retina)	Szürkeskál a, színárnyalat	Fényesség, színtelítettség	Kép-, mozgásfelismerés, látványélmény
Hang ($J, f, t \Delta t, rad$)	10^{-12} W/m ² – 10^{-10} W/m ² , 20-20000 Hz	10^{-12} W/m ² (1000Hz-en) (óra ketyegése 6 m-ről)	10 W/m ²	HALLÁS	Fül (Corti szerv)	Hangosság, „oktáv”, hangszín, ritmus, hangirány	Sonhangosság, abszolút hangmagasság, időtartam, hangirányszög	Hang-, beszédfelismerés, zenei élmény
Folyadék koncentráció (c)	–	konyhasó: 2 mmol/l (egy teáskanál só 50l vízben)	–	ÍZLELÉS	Nyelv (ízlelőbimbók)	Édes, savanyú, sós, keserű	Enyhe, erős	Cukor, uborka, só, aszpirin íze
Gázkoncentráció (c)	–	vajsav: 9 µg/l, parfüm: (egy csepp parfüm egy előadóteremben)	–	SZAGLÁS	Orr (szaglóhárom)	Illatos, semleges, bűzös	Enyhe, erős, „penetráns”	Parfüm, páraillat, égerszag
Nyomás (p)	–	(1 cm-ről az arcbőrrre ejtett légszárny)	–	TAPINTÁS	Bőr	Sima, érdes, szúró	–	Csiklandozás, simogatás, tűszúrás
Hőmérséklet (T)	$T_{bőr} - 30$ °C – $T_{bőr} + 40$ °C	$T_{bőr} \pm 1$ °C	$T_{bőr} - 30$ °C, $T_{bőr} + 40$ °C	HŐÉRZÉKELÉS	Bőr (hideg- és melegreceptorok)	Hideg, meleg érintése, sugárzó hő	Jeges, hűvös, langyos, meleg, forró	Jég, vasaló, tűz



Mérési lehetőségek

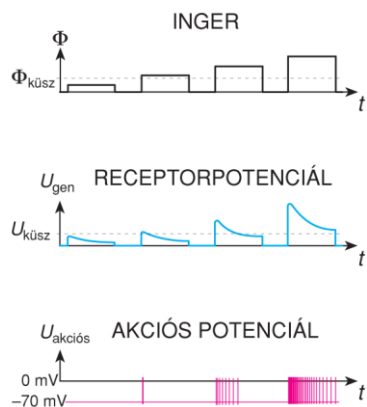
„Objektív” méréseknek nevezzük a műszerekkel kivitelezhető, azonos kiindulási körülmények esetén a mérést megismételve (a hibahatáron belül) azonos eredményt adó módszereket. Fenti példánkban ilyenek az inger intenzitásának, a membránpotenciálnak és az ideg akciós potenciáljának mérései. Az agyi érzőközpontok és asszociációs területek érzetei azonban nem egyszerűen fizikai, fiziológiai körülmények függvényei. Ezek a mérések nem függetleníthetők az egyén mentális és egyéb állapotától, ezért az agykéreggel kapcsolatos pszichofizikai, pszichológiai vizsgálatokat „szubjektív” méréseknek nevezzük. Ma már a modern képalkotó eljárások lehetővé teszik az emberi agy szenzoros működésének egyre pontosabb feltárását (elektroencefalográfia (EEG, I. VII/2.2.), magnetoencefalográfia MEG, pozitron-emissziós tomográfia (PET, I. VIII/4.4.2.), mágneses rezonancia képalkotás (MRI, I. VIII/4.1.).

1.1.3. IV/1.1.3. A receptorok és az idegrost

A receptorok analóg jelátalakítóknak tekinthetők, melyek az érzékelt ingert elektromos jellé, membránpotenciál-változássá alakítják. Ez az ún. **receptor-potenciál** vagy **generátorpotenciál**. A receptorhoz kapcsolódó idegszál a **küszöb feletti ingereket akciós potenciálok** sorozatává (IV.3. ábra) alakítja, melynek frekvenciája a

receptorpotenciál függvénye. Ez a „frekvenciában kódolt” impulzussorozat fut végig az idegroston, míg el nem jut az agykéreg megfelelő érzőközpontjába.

Állandó ingerekre csaknem minden érzékszerv lecsengő érzetválasszal felel. Ez sok esetben negatív visszacsatolás révén valósul meg. Köznapi szóval megszokásnak vagy idegen szóval **adaptációnak** nevezik. Pl. háttérzaj, átlagos fényerősség, szag-, ízinger vagy az ülés nyomásérzete. A IV.3. ábrán $U_{\text{küsz}}$ az idegrost ingerküszöbét, $\Phi_{\text{küsz}}$ pedig az ennek megfelelő fizikai ingerküszöböt jelenti.



IV.3. ábra. Különböző erősségű ingerek hatása a receptorpotenciálra, ill. az akciós potenciálok keletkezésére. (Figyeljük meg az adaptáció jelenségét!)

IV/1.2. Az inger és az érzet közötti összefüggések

Az inger és az érzet közötti összefüggést az ún. pszichofizikai törvények írják le. Ezek érvényessége, elfogadottsága a tudományos körök sokat vitatott témája volt az elmúlt évtizedekben. Az alábbiakban a pszichofizikai méréseken alapuló törvényszerűségeket ismertetjük.

1.1.4. IV/1.2.1. Abszolút és relatív küszöbinger

Azt az ingerintenzitást, ami az érzet kiváltásához éppen szükséges, küszöbingernek nevezzük. Az **abszolút küszöbinger** (ϕ_0) az érzékelés szempontjából idealizált körülményekre vonatkozik. Fény érzékelése esetén a küszöbinger a teljes sötétséghez adaptálódott szem küszöbérzékenységet ($J_0 = 10^{-9}$ lux), vagy a hallást vizsgálva süketszobában a legkisebb intenzitású nesz meghallását ($J_0 = 10^{-12}$ W/m²) jelenti.

A **relatív küszöbingert** mindig egy adott háttér-intenzitású környezetben észlelhetjük, más néven különbségérzékenységnek is nevezhetjük. Definiáljuk a háttérintenzitást (ϕ), és az ettől éppen megkülönböztethető intenzitást (ϕ_r). A relatív küszöbingert a két mennyiség különbsége jelenti:

$$\Delta\phi = \phi_r - \phi \quad (\text{IV.2})$$

A fényérzékelés példájánál maradván egy adott fényerejű megvilágításnál (ϕ) addig növeljük a fény intenzitását (ϕ_r), amíg a változtatás észrevehetővé nem válik. Hallás esetén egy bizonyos „hangerőn” hallgatva a rádiót $\Delta\phi$ jelenti azt a hangintenzitás-különbséget, melynek hangosságváltozását éppen észleljük.

1.1.5. IV/1.2.2. A Weber-törvény

Ernst Weber az 1830-as években felfedezte, hogy a relatív küszöbinger a háttérintenzitással arányos:

$$\Delta\phi = k\phi, \quad (\text{IV.3})$$

azaz növekvő háttéringer esetén a relatív küszöbinger vele arányosan nő. A „ k ” arányossági tényezőt „Weber-törtnek” is nevezik. Mivel

$$k = \frac{\phi_r - \phi}{\phi} = \frac{\Delta\phi}{\phi},$$

(IV.4)

a Weber-tört a szóban forgó érzékelés relatív hibájaként is értelmezhető. Minden modalitáshoz más-más relatív küszöbinger tartozik, ahogy azt a IV.3. táblázat mutatja.

4.3. táblázat - IV.3. táblázat. A Weber-tört értékei különböző érzékelések esetén

MODALITÁS	Weber-tört (k)
Látás (fényerősség)	0,079
Látás (vonalhosszúság becslése)	0,029
Hallás (hangosság)	0,048
Nyomásérz. (nyomás az ujjon)	0,022
Nyomásérz. (súlyérzékelés)	0,020
Nyomásérz. (vibráció az ujjbegyen)	0,036
Ízlelés (sós íz érz.)	0,083
Elektromos áramütés érz.	0,013

1.1.6. IV/1.2.3. A Weber–Fechner-törvény

Gustav Fechner (1850) feltételezése szerint az érzékelésre jellemző érzeterősség nagysága (ψ) nem mérhető, szemben a relatív küszöbingerrel ($\Delta\phi$). Fechner arra a később tévesnek bizonyult következtetésre jutott, hogy az inger relatív megváltozása ($\Delta\phi/\phi$) arányos az érzeterősség megváltozásával:

$$\Delta\psi = \text{konst.} \cdot \frac{\Delta\phi}{\phi}. \quad (\text{IV.5})$$

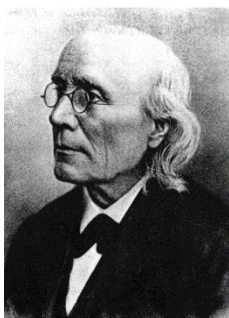
A fenti egyenlet megoldásából származik a csaknem 100 évig érvényesnek tartott „Weber–Fechner-féle pszichofizikai alaptörvény” logaritmikus összefüggése:

$$\psi = \text{konst.} \cdot \lg \frac{\phi}{\phi_0}, \quad (\text{IV.6})$$

ahol ϕ_0 az abszolút küszöbinger. A törvény jól írja le a hang magasságának érzékelését 100 és 1000 Hz között. Az összefüggés azonban nincs összhangban a tapasztalattal, amikor az érzékelés több nagyságrendet fog át.



Ernst Weber (1795–1878)



Gustav Fechner (1801–1887)

1.1.7. IV/1.2.4. A Stevens-törvény

S. S. Stevens az 1950-es évektől vitatta a Weber–Fechner-törvény érvényességét. Feltételezése szerint az inger relatív megváltozása ($\Delta\phi/\phi$) az érzet relatív megváltozásával ($\Delta\psi/\psi$) arányos:

$$\frac{\Delta\psi}{\psi} = \text{konst.} \cdot \frac{\Delta\phi}{\phi} \quad (\text{IV.7})$$

A fenti kifejezés azt az állítást is tartalmazza, hogy az inger relatív hibája arányos az érzékelés relatív hibájával. Az egyenlet megoldásával juthatunk az általánosan érvényesnek bizonyult hatványkitevős Stevens-törvényhez:

$$\psi = \text{konst.} \cdot \left(\frac{\phi}{\phi_0} \right)^n \quad (\text{IV.8})$$

Az „n” kitevő az érzékelés fajtájára jellemző konstans, ϕ_0 pedig itt is az abszolút küszöbinger, mint összehasonlítási alap. Amennyiben $n < 1$, **kompresszív**, ha $n > 1$, akkor **expanzív** függvényről beszélünk. A IV.4. táblázat a különböző modalításoknak megfelelő hatványkitevőket ismerteti.

4.4. táblázat - IV.4. táblázat. A különböző modalításoknak megfelelő hatványkitevő (n) értékek

MODALITÁS	„n”	MODALITÁS	„n”
HALLÁS, hangosság (1000 Hz)	0,3	HŐÉRZÉKELÉS, környezeti hőmérséklet	1,0
LÁTÁS, fényesség (5°-os fényfolt, sötétkez szokott)	0,33	LÁTÁS, hosszúságbecslés	1,0

szem)			
LÁTÁS (villanás fényessége)	0,5	NYOMÁS (nyomásérzet a tenyéren)	1,1
SZAGLÁS (kávéillat)	0,55	ÍZLELÉS (só)	1,3
Vibráció (ujj, 250 Hz)	0,6	NYOMÁS (súlyérzékelés)	1,45
NYOMÁS Vibráció (ujj, 60 Hz)	0,95	NYOMÁS Erő (kézi erőmérő)	1,7
SZAGLÁS (heptán)	0,6	ELEKTROMOS ÁRAMÚTÉS (bőr)	3,5
ÍZLELÉS (szacharin)	0,8	ELEKTROMOS ÁRAMÚTÉS (fog)	7,0

IV.1. megjegyzés. Az 1960-as években „objektív” akcióspotenciál-mérésekkel próbálták összehasonlítani a „szubjektív” érzetamplitúdó-becsléssel kapott mérési eredményeket. Egy középfül-operációnak alávetett páciens engedélyezte, hogy a műtét közben feltárják az agyba vezető ízérző ideget és azon méréseket végezzenek. Úgy az akciós potenciál frekvenciája, mind az amplitúdóbecslés eredménye egybeeső, hatványfüggvény jelleget mutatott.



Stanley Smith Stevens (1906–1973)

A Stevens-törvény gyakorlati igazolása

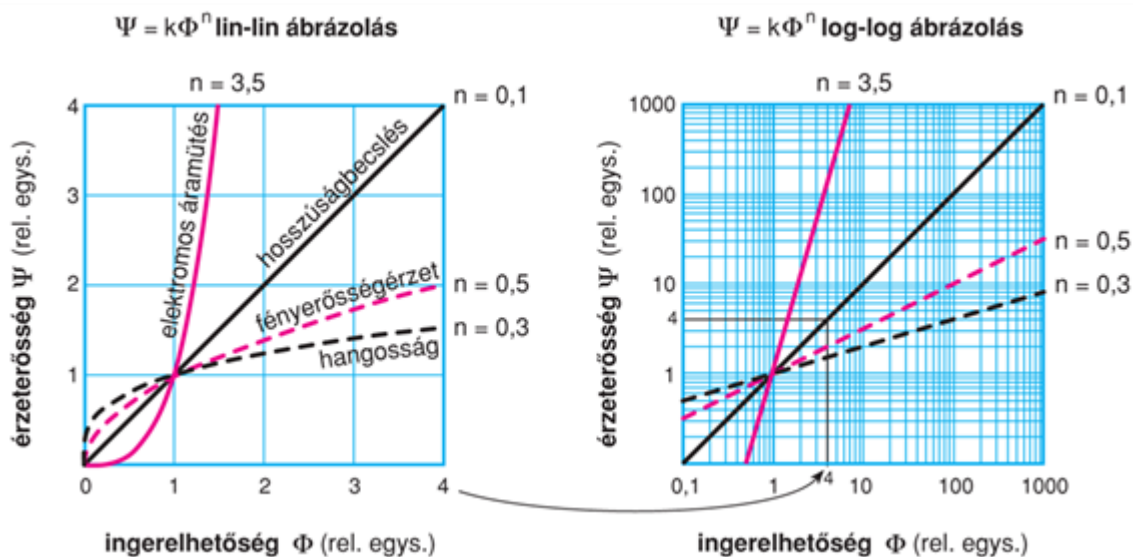
Stevens széles körű pszichofizikai mérésekkel igazolta modelljének érvényességét. Méréseiben kétféle módszert alkalmazott.

Az ún. „**amplitúdóbecslés**” módszerénél a kísérleti személy a véletlenszerűen beállított ingerintenzitásokhoz tartozó relatív érzetét számmal becsülte meg. Kiindulásként egy bizonyos intenzitású alapingerhez egy számot rendeltek, és a kísérleti személy a későbbi ingereket ehhez a számhoz viszonyította.

Ennél sokkal pontosabb mérési adatokat szolgáltatott az ún. „**modalitások közötti illesztés**” (cross-modality matching), aminél az egyik modalitás érzetét kellett egy másikéval azonos szintre állítani. Tipikus példája a fenti módszernek, hogy a vizsgált érzet erősségét a kísérleti személy egy kézi erőmérő ugyanolyan erősnek érzett összenyomásával jellemzi.

Ha a Stevens-törvényt leíró összefüggést logaritmáljuk: $\lg \psi = \lg (\text{konst.}) + n \lg \phi - n \lg \phi_0$, amiből a konstansok összevonása után, $\lg \psi = n \lg \phi + \text{konst.}$ ($y = nx + \text{konst.}$), akkor a $\lg \phi$ és a $\lg \psi$ között fennálló lineáris összefüggéshez jutunk, melynek „*n*” a meredeksége.

A logaritmikus ábrázolásmód amúgy is elkerülhetetlen, a sokszor 10 nagyságrendnél is nagyobb ingerintenzitástartomány miatt.



A Stevens-törvény ábrázolása lin-lin, ill. log-log koordináta-rendszerben

A Stevens-törvény érvényességét a hallás tárgyalásánál (lásd IV/3.5.2.) is látni fogjuk.

2. IV/2. A látás

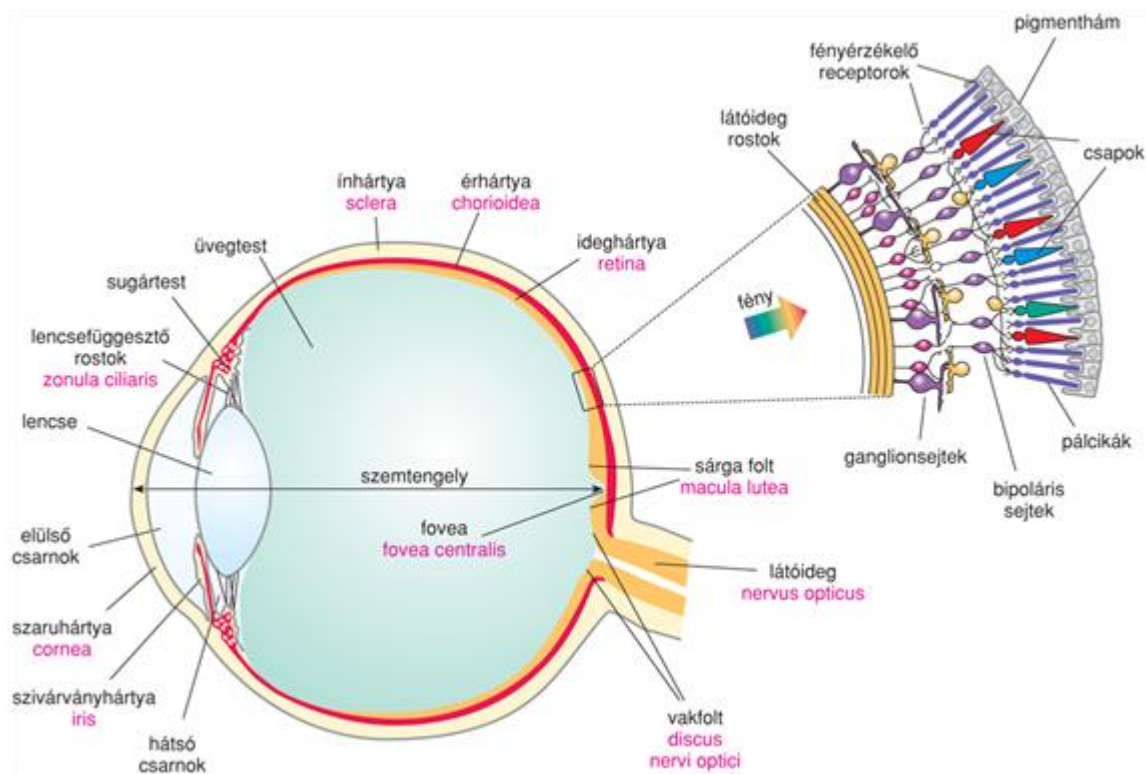
Egyik legfontosabb érzékszervünk a szemünk. Az egészséges emberi szem az elektromágneses sugárzás látható fénynek nevezett, körülbelül 400 nm és 800 nm közötti hullámhosszú tartományát fogja fel. Az elektromágneses spektrumnak a látható fényel határos tartományai az ultraibolya (10 nm–400 nm) és az infravörös (800 nm–1,3 μm) (l. IV.2. megjegyzés).

A szemnek a látásban betöltött szerepe sokrétű. Részt vesz a környezet optikai leképezésében, a változó fényintenzitásokhoz való alkalmazkodásban, a fény elektrokémiai jellé, majd idegimpulzusokká alakításában és a képi információ előzetes kiértékelésében is.

IV.2. megjegyzés. Léteznek állatfajok, amelyek a számunkra nem látható ultraibolya sugarakat is képesek érzékelni. Sok, nekünk fehérnek tűnő virágot a rovarok színesnek látnak az ultraibolya-tartományban. Nemrég egy emlős állatról is (a *Glossophaga soricina* nevű színvak denevér) sikerült kimutatni, hogy látása a rövid hullámhosszak felé 310-nm-ig terjed.

2.1. IV/2.1. A szem vázlatos szerkezete

A molekuláris szinttől a szerveken át az ökoszisztémáig szoros összefüggés van a biológiai rendszerek szerkezete és működése között. Az alábbiakban a szem szerkezetét mutatjuk be a látás biofizikai alapjainak megértéséhez szükséges részletességgel.



IV.4. ábra. Az emberi szemgolyó vázlatos szerkezete

2.1.1. IV/2.1.1. A szem és a retina felépítése

Az emberi szem egy hozzávetőlegesen 2,5 cm átmérőjű gömb alakú szerv, amely formáját a belsejében uralkodó 10–22 Hgmm (1,3–2,9 kPa) túlnyomásnak köszönheti. A szemgolyó három rétegből áll, vázlatos szerkezetét a IV.4. ábra mutatja be.

A legkülső erős fehér burok az ínhártya (sclera), amely elől átmegy az átlátszó szaruhártyába (cornea). A középső réteget a szívárványhártya (iris), a sugártest (corpus ciliare) és az érhártya (choroidea) alkotja. A sugártesthez kapcsolódó lencsefüggesztő rostok (zonula ciliaris) rögzítik a lencsét. Az iris közepén található nyílás a pupilla. A legbelső réteg az ideghártya (retina), amely a fényreceptorokat is tartalmazza.

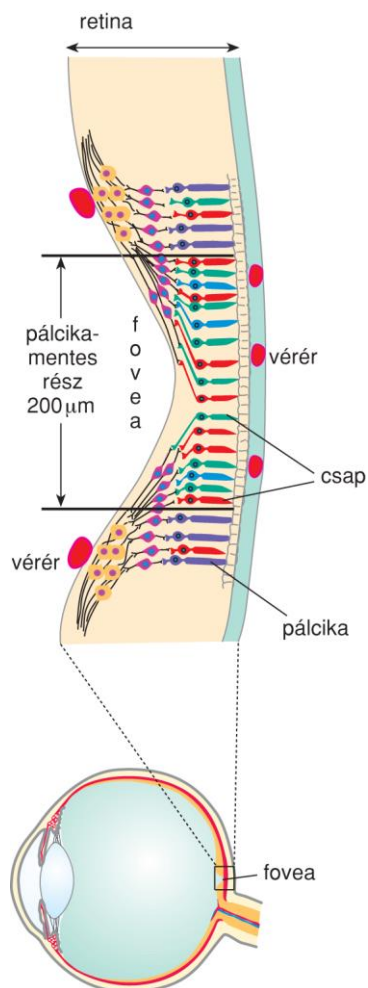
A központi idegrendszer részét képező ideghártya fogja fel a fényingert és továbbítja az agy felé a kiváltott ingerületet. Emellett a retina a vizuális információ értelmezését is elkezd, például felismer megvilágításbeli kontrasztokat és mozgásokat. A retinában a látási információ feldolgozásában több mint 60- fajta idegsejt vesz részt, amelyek alaptípusait, és azok elrendeződését a IV.4. ábra szemlélteti.

A retinára eső fény érzékelését végző sejteknek két csoportját különböztetjük meg: csap- és pálcikasejteket. A pálcikasejtek száma egy egészséges szemben 120 millió, a csapoké 6,5 millió. A csapok felelősek a normális fényintenzitások mellett nappali ($1-10^5$ lux), a pálcikák pedig a szürkületi ($10^{-9}-10$ lux) látásért. A látási információ előzetes kiértékelésében résztvevő idegsejteknek az alábbi négy fő típusát különböztetjük meg: horizontális, bipoláris, amakrin- és ganglionsejtek. A szemet elhagyó látóideget a ganglionsejtek axonjai képezik. A retinában több egymás mellett elhelyezkedő receptorsejtből származó inger egyetlen ganglionsejtre jut. Ezt a jelenséget az ingerületi jel konvergenciájának nevezzük. A pálcikasejtek jele erőbben konvergál, mint a csapsejteké. Mindkét típusú receptorsejt működését több serkentő vagy gátló jellegű szinapszis befolyásolja. Ezeknek a retinális képképzésben van fontos szerepük.

Az emberi szem érdekessége, hogy a retinában a receptorsejtek nem a szem belseje felé fordulnak, hanem az érhártya felőli oldalon helyezkednek el. A fényérzékeny sejteknek és a pigmentált epitheliumnak az érintkezése fontos a fotoreceptorok megvilágítás utáni gyorsabb regenerációjához. Az ilyen elrendeződés ugyanakkor azzal jár, hogy a fénynek át kell haladnia a retinán ahhoz, hogy a fényreceptorokat elérje. Ugyanez azt is eredményezi, hogy az idegrostoknak át kell menniük a fényérzékeny sejteket tartalmazó rétegen ahhoz, hogy kijussanak a szemből. A látóidegköteg becsatlakozásának helyén fényreceptorok nem találhatóak. Ez a vakfolt (IV.3. megjegyzés). Normális körülmények között létét azért nem érzékeljük, mert az agy a vakfoltra eső hiányzó

képrészletet annak környezetével, vagy a másik szemből jövő információ alapján (a két szem vakfoltja a látómező más-más részeire esik) pótolja.

A látómező közepén lévő tárgyak a retinának a sárga folt (macula lutea) nevű részére képeződnek le. Ennek a közepén található mélyedés a fovea, ahol nincsenek pálcikasejtek, és a csapsejtek sűrűsége a legnagyobb. A fény akadálytalanabb érzékelése érdekében erről a helyről a IV.5. ábrán látható módon oldalra tolódnak a vérerek és az ingerület feldolgozásában részt vevő idegi elemek. A receptorsejtek mögött a pigmentált epithelium helyezkedik el, amely a nagy melanintartalmánál fogva elnyeli a rá eső fényt, és így csökkenti a nemkívánatos visszaverődéseket.

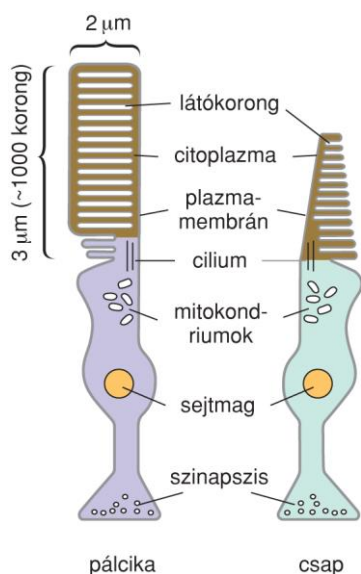


IV.5. ábra. A fovea szerkezetének vázlata

IV.3. megjegyzés. A lábasfejűek szemében a csapok és a pálcikák a retinának a legfelsőbb rétegében helyezkednek el úgy, hogy a beérkező fény abszorpciója kisebb veszteséggel mehessen végbe. Ezeknek az állatoknak nincs vakfoltjuk sem.

2.1.2. IV/2.1.2. A fotoreceptor sejtek szerkezete

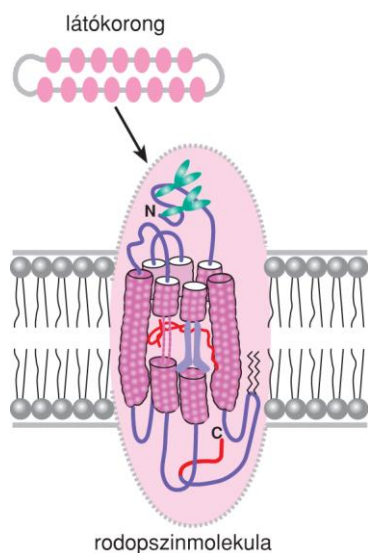
A fotoreceptor-sejtek egy külső és egy belső szegmentumból állnak, amelyeket egy vékony csillószerű rész kapcsol össze (IV.6. ábra). A pálcikasejtek külső szegmentumát 1000-1500 sűrűn egymás mellé tömörülő lapos membrán vezikula tölti ki. Ezek a korong alakú képződmények az ún. fotoreceptív korongok, a sejt plazmamembránjából keletkeznek lefűződéssel. A csapsejtekben a kültág plazmamebránjának az egymásra simuló ki- és behajlásai hoznak létre a pálcikák fotoreceptív korongjaihoz hasonló membránstruktúrát. Ez a kültágban elhelyezkedő membránrendszer felelős a fény érzékeléséért, míg a beltág végzi a sejt metabolizmusának nagy részét. A beltág tartalmazza a szinaptikus végződéseket is. Ezek a sejtek olyan rövidek, hogy a fény által keltett változások sejten belüli továbbításához nincs szükség akciós potenciálra. A külső szegmentum potenciálváltozásai a belső szegmentumra is áterjednek, és direkt módon modulálják a neurotransmitter-szekréción.



IV.6. ábra. A pálcika- és a csapsejtek elektronmikroszkópos képe (felül) és vázlatos szerkezetük (alul)

A pálcikasejtek fényérzékelését a bennük lévő fényérzékes anyag, a rodopszin teszi lehetővé. A rodopszin a G-proteinhez kapcsolt receptorok népes családjába tartozik, és a fotoreceptív korongok membránjának mintegy 80-90 tömegszázalékát teszi ki. Ez a legalaposabban tanulmányozott receptorok egyike. Két részből áll: egy fehérjekomponensből és egy ehhez kovalensen kötött pigmentből (IV.7. ábra). A rodopszin integráns membránfehérje, amely hét transzmembránhélixet és a membránból hosszan kinyúló citoplazmikus véget tartalmaz. A fehérje alkotó az enzimtulajdonságokkal rendelkező opszin. A rodopszin fényelnyelésért felelős pigmentje a 11-cisz-retinál A, amelynek oldatbeli abszorpciós maximuma az ultraibolya-tartományba, 380 nm köré esik. A pálcikasejtek rodopszinjában az elnyelés maximuma kb. 500 nm-re változik meg. Ennek az az oka, hogy a fehérjekörnyezet a retinál abszorpciós maximumát erősen eltolja.

A csapok a pálcikák rodopszinjához hasonló, 11-cisz-retinált tartalmazó kromoproteineket, ún. fotopszinokat tartalmaznak. Három eltérő fotopszin létezik. Ezek spektrális tulajdonságai különböznek egymástól, amiért a 11-cisz-retinál eltérő fehérje környezete a felelős. Minden csapsejtben csak egyfajta fotopszin fejeződik ki. Ennek megfelelően három eltérő spektrális tulajdonságú csapsejt fordul elő az emberi szemben.



IV.7. ábra. A rodopszin molekula szerkezete

2.2. IV/2.2. A látás biofizikai alapjai

2.2.1. IV/2.2.1. Optikai leképezés a szemben

A látás előfeltétele, hogy a szem optikai rendszere a vizsgált objektum képét a retinára vetítse. A fény a pupillán át a szaruhártya, a csarnokvíz, a lencse és az üvegtest közötti határfelületeken megtörve jut az ideghártyáig. Ezek a felületek egy hozzávetőleg 60-65 dioptriás törőrendszert alkotnak, amely a tárgyaknak a fordított állású valódi képét hozza létre a szemfenéken. A nagyobb szög alatt látszó tárgyak retinára vetülő képe nagyobb, ezért a közeli tárgyak nagyobbak és így részletdúsabbnak látszanak. Megállapodás szerint 25 cm-nek tekintjük a tiszta látás távolságát, amely a legkényelmesebb olvasási távolság a legtöbb ember számára.

A pupilla szabályozza a retinára jutó fény mennyiségét: nagy intenzitásoknál akarunktól függetlenül összehúzódik, gyenge fényben pedig kinyílik. A pupilla átmérője tipikusan 2 mm és 8 mm között változik. A szembe jutó fény mennyisége a pupilla területével arányos:

$$P = J \cdot \pi \cdot \left(\frac{d}{2}\right)^2 \quad (\text{IV.9})$$

ahol P a szembe jutó fényteljesítmény, J a szemre eső fény intenzitása, d pedig a pupilla átmérője. Ily módon a lencsébe jutó fény mennyisége:

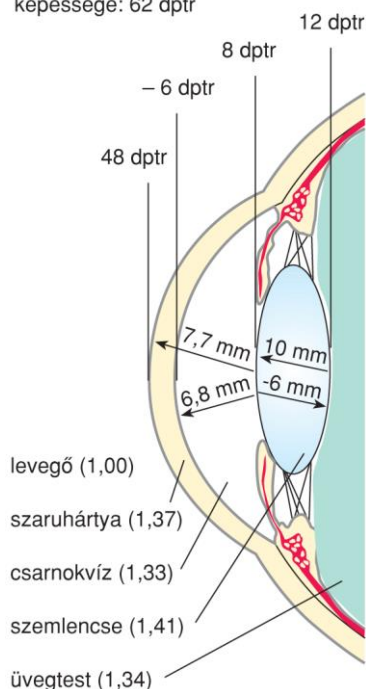
$$P_{\max}/P_{\min} = (d_{\max}/d_{\min})^2 = 16, \quad (\text{IV.10})$$

azaz, 16-szorosan változtatható. Az intenzitáskülönbségek további feldolgozását a retina végzi. A pupilla mérete a retinára eső kép élességét is befolyásolja: összeháródása növeli, kinyílása csökkenti a keletkező kép mélységélességét. Emiatt egy erősen megvilágított tárgy a retinán még elfogadható élességű képet adhat úgy is, hogy a képsík kissé a retina elé vagy mögé esik.

A szem eltérő törésmutatójú szövetei közötti határok körkörös szimmetrikus görbült felszínek, amelyek görbülete a szélek felé kisebb, így csökkentve a keletkező kép torzulását. Ha csak paraxiális sugarakkal modellezzük a retinára eső kép létrejöttét, a szem törőfelületei különböző sugarú gömbsüvegekkel közelíthetők. Ismerve az egymás melletti szövetek törésmutatói közötti különbséget ($n-n'$) és az őket elválasztó felületek görbületi sugarát (r) a felületek törőképesége (D) kiszámolható (IV.8. ábra, lásd: II.16 egyenlet):

$$D = \frac{n-n'}{r} \cdot (\text{IV.11})$$

A szem teljes törő-
képesége: 62 dptr



IV.8. ábra. A képképzésben fontos törőfelszíneket alkotó szövetek görbületi sugarai, törésmutatói, és az ebből számolt törőképeségek

A szembe érkező fény először a levegő-szaruhártya felszínén törik meg. A létrejövő optikai kép szempontjából igen fontos, hogy a szaruhártya bolyhos felszínét vékony sima könnyréteg borítja, amely pislogáskor mindig újraképződik.

A fény a levegő-szaruhártya és a szaruhártya-csarnokvíz felületeken megtörve a szemlencséhez érkezik. A héjszerű struktúrába rendeződő átlátszó rostokból álló szemlencse a környezeténél magasabb törésmutatóját a sejtekben lévő nagy fehérjekoncentrációnak köszönheti. A rostok egymáson elmozdulva lehetővé teszik a lencse görbületi sugarának változtatását. Ezáltal a csarnokvíz-lencse és a lencse-üvegtest felületek törőképessége szabályozhatóvá válik, lehetővé téve a különböző távolságban elhelyezkedő tárgyakhoz való akkomodációt.

Közeli tárgyakra fókuszálva a sugárizom összehúzódik, belső átmérője csökken, így a lencsefüggesztő rostok ellazulnak és a lencse a természetes rugalmasságánál fogva domborúbb lesz (IV.9. ábra). A sugárizom elernyedésekor a felfüggesztőapparátus megfeszíti a lencse tokját, a lencsét laposabbra húzza, és a távoli tárgyak válnak élessé (IV.9. ábra).

Az egészséges szem 25 cm-től a nagyon távoli tárgyakig képes éles képet vetíteni a retinára. Annak meghatározásához, hogy mekkora törőképesség-változásra képes a szemlencse a két végletre való alkalmazkodás során, induljunk ki a leképezés törvényéből (I. II/2.1.2.):

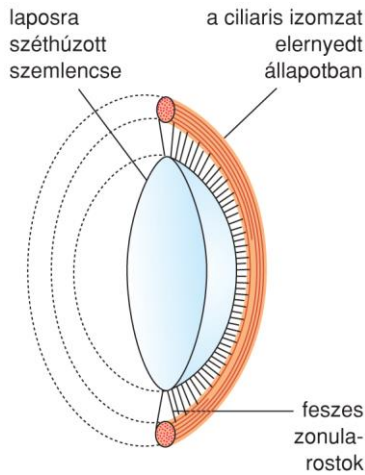
$$D = \frac{n_t}{t} + \frac{n_k}{k}, \quad (\text{IV.12})$$

ahol D a szem törőképessége, t a tárgytávolság, k a retinán keletkező kép távolsága a szem fénytörő rendszerétől, n_t és n_k pedig a tárgy és a szem közötti közeg (levegőre $n_t = 1$), illetve az üvegtest törésmutatója. Mivel n_t , n_k és k nem változik, fenti összefüggést mind a közelre, mind a távolra akkomodálódott szemre felírva, és a két egyenletet kivonva egymásból, azt kapjuk, hogy az egészséges szemlencse

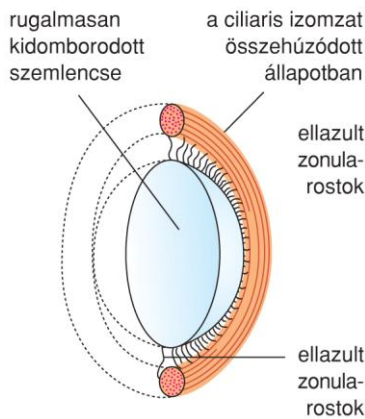
$$\Delta D = \frac{1}{0,25\text{m}} - \frac{1}{\infty} = 4 \text{ dioptria} \quad (\text{IV.13})$$

törőképesség-változásra képes. A fiatal szem igen távoli és a 8-10 cm közel lévő tárgyakról is tud éles képet alkotni, ami 10-12 dioptria törőképesség-változásnak felel meg.

Az öt méternél távolabbi tárgyakról a retinára vetülő kép jól leírható az ún. redukált szem modellel, amelyben a szem bonyolult optikai rendszerét egyetlen törőfelülettel helyettesítjük. A törőfelület görbületi sugara 5,1 mm, a görbületi középpontja a K csomópont. Minthogy a csomóponton keresztülmenő fénysugarak nem törnek meg, a tárgy képét úgy kapjuk, hogy a IV.10. ábrán látható módon a tárgy pontjairól egyeneseket húzunk a redukált szem K csomópontján keresztül a csomópont mögött 17 mm távolságban lévő retináig. Az azonos szög alatt látszó távoli tárgyak retinára vetülő képe azonos nagyságú.

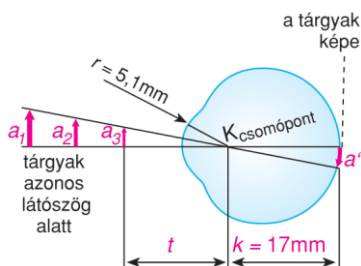


A ciliaris izomzat elernyed állapotban. A lencse lapos, akkomodálatlan



A ciliaris izomzat összehúzódott állapotban. A lencse domború, közelre akkomodált

IV.9. ábra. Közelre és távolra akkomodálódott szem



IV.10. ábra. A retinán keletkező kép szerkesztése a redukált szem modelljét használva (A tárgy és a szem méretének egymáshoz való viszonya didaktikai okokból torzított.)

2.2.2. IV/2.2.2. A szem képképzésének hibái és azok korrigálása

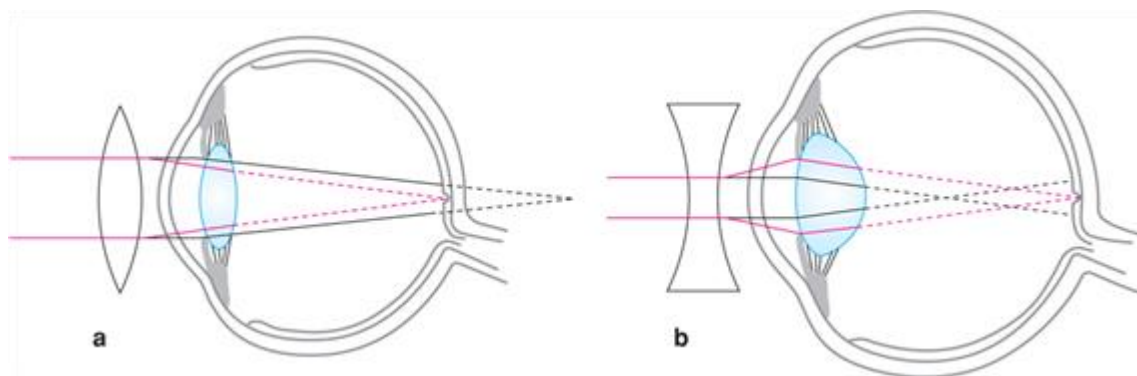
Amennyiben a szem törőképessége a normálistól eltér vagy a szemgolyó méretarányai különlegesek, látásproblémák adódhatnak (IV.11. ábra). A rövidlátó szem törőképessége túl nagy, vagy a retina van túl távol, így a végtelen távoli tárgy képe a retina előtt jön létre. Korrekció nélkül a rövidlátó szem a közeli tárgyakat megfelelően képezi le, azonban távolikat nem látja élesen. Szórólencse alkalmazásával a szembe érkező fénysugarak széttartóvá tehetők és a probléma korrigálható. A távollátó szem esetében a közeli tárgy képe a

retina mögött jön létre. Az ilyen szem a távoli tárgyakat élesen látja, a közeliakat viszont képtelen a retinára fókuszálni. Ez a szemhiba gyűjtőlencse alkalmazásával javítható ki. Az öregkori távollátásban szenvedő szem a távoli tárgyakat élesen látja, de a közeliakat képtelen a retinára fókuszálni. A távollátástól azonban eltér, mivel az öregkori távollátásban a szemlencse rugalmasságának csökkenése okozza a problémát. A szemlencse maximális törőképeség-változásának korral történő csökkenését a IV.12. ábra mutatja. Emiatt a szem már nem képes az egészséges szemre jellemző 4 dioptriás törőképeség-változásra. Ha gyűjtőlencse alkalmazásával (olvasószemüveg) a közeli tárgyakat élessé tesszük, akkor a távoli tárgyakról alkotott kép lesz életlen.

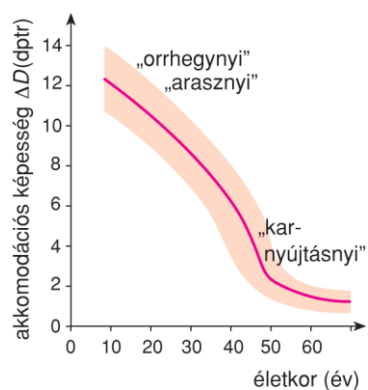
Előfordul, hogy a szem valamelyik optikai leképezőeleme (általában a cornea) nem körkörösen szimmetrikus. Ilyenkor a szem kérdéses törőfelülete nem gömbsüveg, hanem közelítőleg ellipszoid formájú. Ennek eredményeként a tárgy egyetlen pontjából kiinduló fénysugarak pont helyett egy vonalra képeződnek le, ún. asztigmatizmus lép fel. Ez a hiba hengeres lencsés szemüveggel korrigálható.

Mínt hogy a törésmutató-változás a levegő-szaruhártya átmenetnél a legnagyobb, a szem törőképesége nagyon érzékeny a cornea külső sugarának kis változásaira. Ezt használja ki a lézeres látásjavító műtét (lásd IX/1.2.3.), amely során a cornea külső görbületét változtatják meg.

Eddig a szemnek (és általában minden optikai képalkotó rendszernek) a három legegyszerűbb lehetséges hibáját (ún. aberrációját) említettük. Ezek a szem törőfelületeinek és a retina felszínének olyan hibáiból adódnak, amelyekben az optimális felülettől való eltérés gömbsüveg vagy henger formájú volt. Az optikai leképezéseknek más hibái is lehetnek. A szem esetén ezeket a képalkotásért felelős törőfelületeknek vagy a retinának olyan egyenetlenségei okozzák, amelyeknél az optimális törőfelülettől való eltérés már bonyolultabb formájú. Az egészséges szem maximális feloldóképességét ezek a hibák határozzák meg. A szem bonyolultabb optikai hibái egy aberrométer nevű eszközzel mérhetők, amely a retináról visszaverődő gyenge lézersugár segítségével térképezi fel a szem optikáját. A már említett lézeres korrekciós műtéttel a szem képalkotó felszíneinek eltéréseiből eredő, bonyolultabb leképezési hibák javíthatók.



IV.11. ábra. Fénysugarak útja a távollátó (a), ill. a rövidlátó (b) szemben. A fekete vonalak a korrigálatlan, a piros a korrigált sugarakat jelölik



IV.12. ábra. A szem akkomodáció-képességének függése a kortól

2.2.3. IV/2.2.3. A szem feloldóképessége

Azt a legkisebb látászöveget, amelynél két különálló pontot meg tudunk különböztetni egymástól a látászöghatárnak nevezzük. Az egészséges szemre ez kb. 1 szögperc ($1'$). A szem egyénenként változó feloldóképessége (látásélesség) a kísérletileg meghatározott α látászöghatárnak a normális (1 szögperces) látászöghatárhoz viszonyított százalékban megadott értéke:

$$\text{látásélesség} = \frac{1'}{\alpha} \cdot 100\% \quad (\text{IV.14})$$

A fény hullámtermészete miatt a hibátlan optika képalkotása sem pontszerű. Az egyes tárgyponatok képe a fény diffrakciója és interferenciája következtében – a geometriai optika által jósolt egyetlen pont helyett – koncentrikus korongok sokasága (IV.13. ábra). Két egymástól távoli tárgyponat esetén ezek az ún. Airy-korongok egymástól jól elkülönülnek. A két tárgyponat közelítve egymáshoz az Airy-korongok egyre jobban átfednek. Létezik a tárgyponatoknak egy olyan kritikus távolsága, amikor a két pontot még éppen meg lehet különböztetni. Ez a képalkotás felbontásának hullámoptikai határa. A tárgyponatokat tovább közelítve a két pont képe egyetlen koronggá olvad össze. A retinán keletkező kép hullámoptikai elmosódása adott hullámhossznál a pupilla átmérőjétől függ. Minél kisebb a pupilla mérete, annál nagyobb az Airy-korongok átmérője, vagyis annál erősebb a kép elhomályosodása. Megmutatható, hogy a radiánban kifejezett látászöghatár az alábbiak szerint számolható ki a pupilla d átmérőjéből és a fény λ hullámhosszából:

$$\alpha_H = 1,22 \cdot \frac{\lambda}{d} \quad (\text{IV.15})$$

A pupilla átmérője a fényviszonyoktól függően hozzávetőleg 2-8 mm, a látható fény hullámhossza pedig 400–800 nm tartományban változhat. A legkedvezőtlenebb esetben ($\lambda = 800$ nm, $d = 2$ mm) a látászög szögpercben kifejezett hullámoptikai határa:

$$\alpha_H = 1,22 \frac{800}{2 \cdot 10^6} = 4,88 \cdot 10^{-4} \text{ rad}, \quad \alpha_H = 4,88 \cdot 10^{-4} \frac{360^\circ}{2\pi} \cdot 60 \frac{'}{^\circ} \approx 1,68'$$

(IV.16)

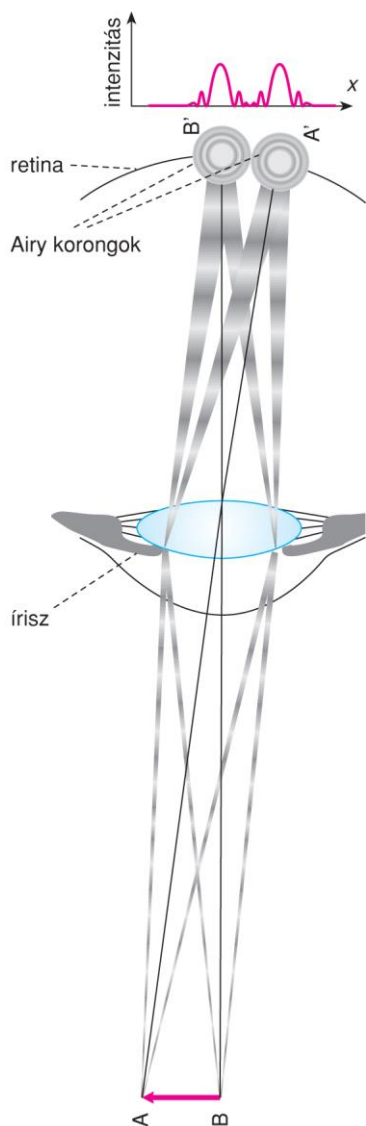
Ugyanílyan pupillaátmérőnél a fenti számítás a kék fényre ($\lambda = 400$ nm) $\alpha_H \approx 0,8'$ látászöghatárt eredményez. Közepes hullámhossz és pupilla értékeket feltételezve ($\lambda = 550$ nm, $d = 4$ mm) $\alpha_H \approx 0,6'$.

A fenti hullámoptikai megfontolás teljesen általános érvényű, minden optikai képalkotó eljárást érint. A szem feloldóképességének van egy másik, biológiai korlátja is, amely a receptorsejtek méretéből fakad. A szem látászöghatárának megállapításához elterjedten használt a Landolt ábra (lásd keretes rész). Ezt akkor tudja helyesen érzékelni a szem, ha a gyűrű kerületén lévő sötét-világos-sötét mintázatnak a képe legalább három fényérzékeny sejtre esik a retinán. A fovea centralisban a csapok méhsejtekhez hasonló hatszöges elrendezésben helyezkednek el; átlagos méretük kb. $2 \mu\text{m}$ (l. IV.14. ábra). Ebből a redukált szem modellt alkalmazva a biológiai szempontból lehetséges legkisebb látászöghatár (α_B szögpercben megadva):

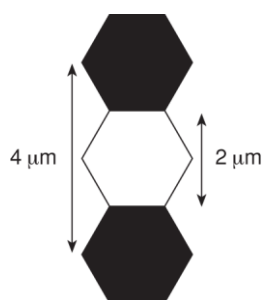
$$\alpha_B = \frac{4\mu\text{m}}{1,7 \cdot 10^4 \mu\text{m}} = 2,35 \cdot 10^{-4} \text{ rad}, \quad \alpha_B = 2,35 \cdot 10^{-4} \frac{360^\circ}{2\pi} \cdot 60 \frac{'}{^\circ} \approx 0,8'$$

(IV.17)

Látható, hogy a biológiai és a hullámoptikai látászöghatárok nagyjából egybeesnek, vagyis a pupilla változásai, a receptor sejtek spektrális érzékenységi tartománya és a receptor sejtek mérete egymáshoz jól illeszkednek. A természet mindegyiknél a határokig kihasználta a lehetőségeket, de nem hozott létre fölöslegest.



IV.13. ábra. A fénydiffrakció hatása a szem képalkotására



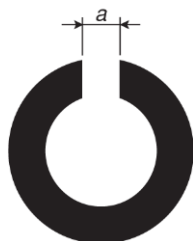
IV.14. ábra. Magyarázat a biológiai szempontból lehetséges legkisebb látószöghatár számításához

A Landolt ábra

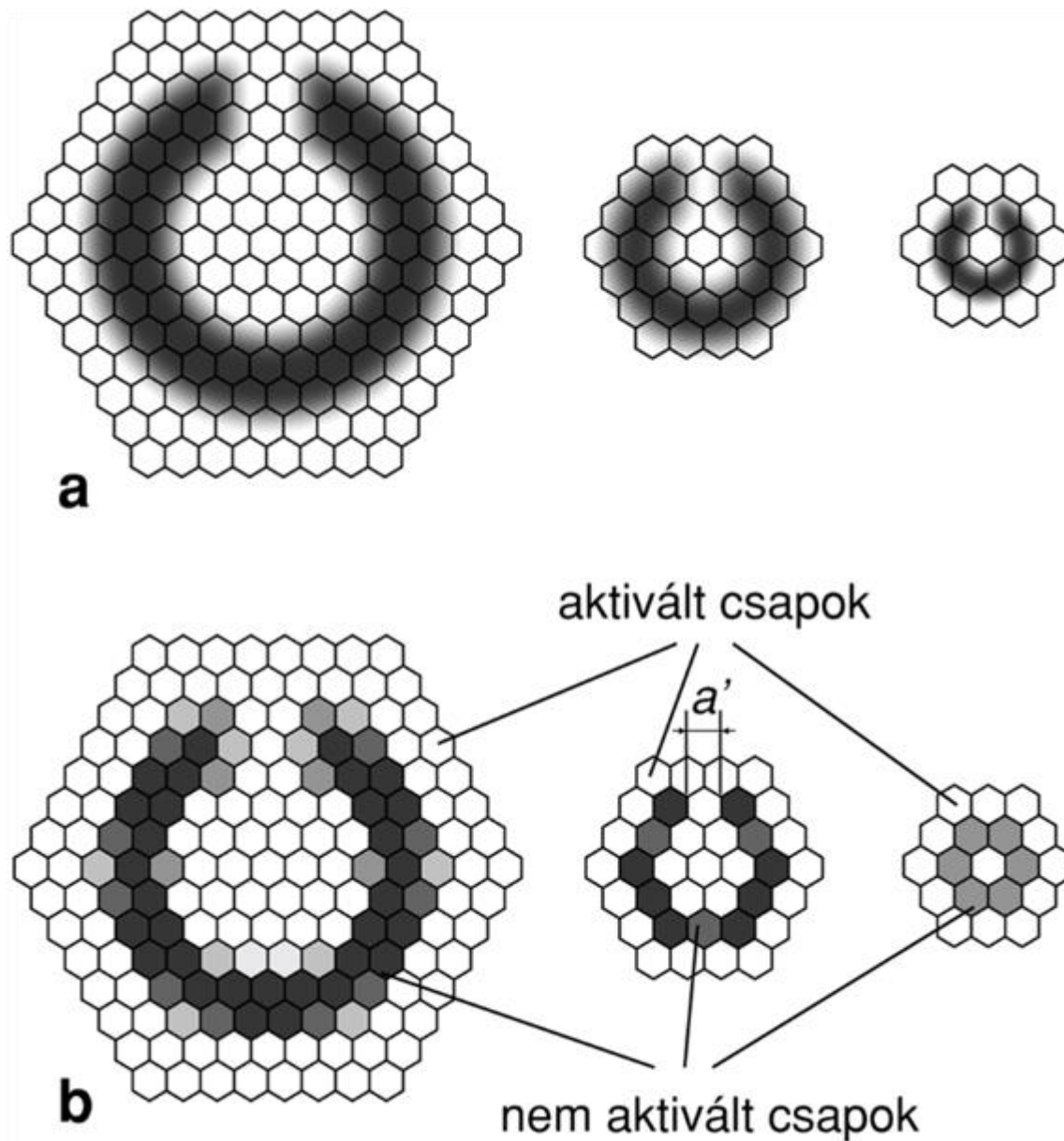
Különböző távolságban lévő Landolt-ábrák (1. ábra) retinán keletkező képe, figyelembe véve a (3,5 mm átmérőjű) pupillán történő fényelhajlás hatását.

A retinára vetülő optikai kép által a csapsejtekben kiváltott ingerületi kép. A közel lévő ábra nagy szög alatt látszik. A képet részletdúsnak érzékeljük, mivel sok csapsejtre esik. Az ábrát távolítva a szemtől egy adott távolságban elérjük a látószöghatárt. Ezen a ponton a gyűrűn lévő szakadás sötét-fehér-sötét mintázata három

csapsejtre esik, és a szem számára még épp kivehető (2a ábra). Az ábrát továbbtávolítva a keletkező ingerületi kép egyetlen zárt gyűrű képét mutatja (2b ábra).



Landolt 1. ábra.



Landolt 2. ábra.

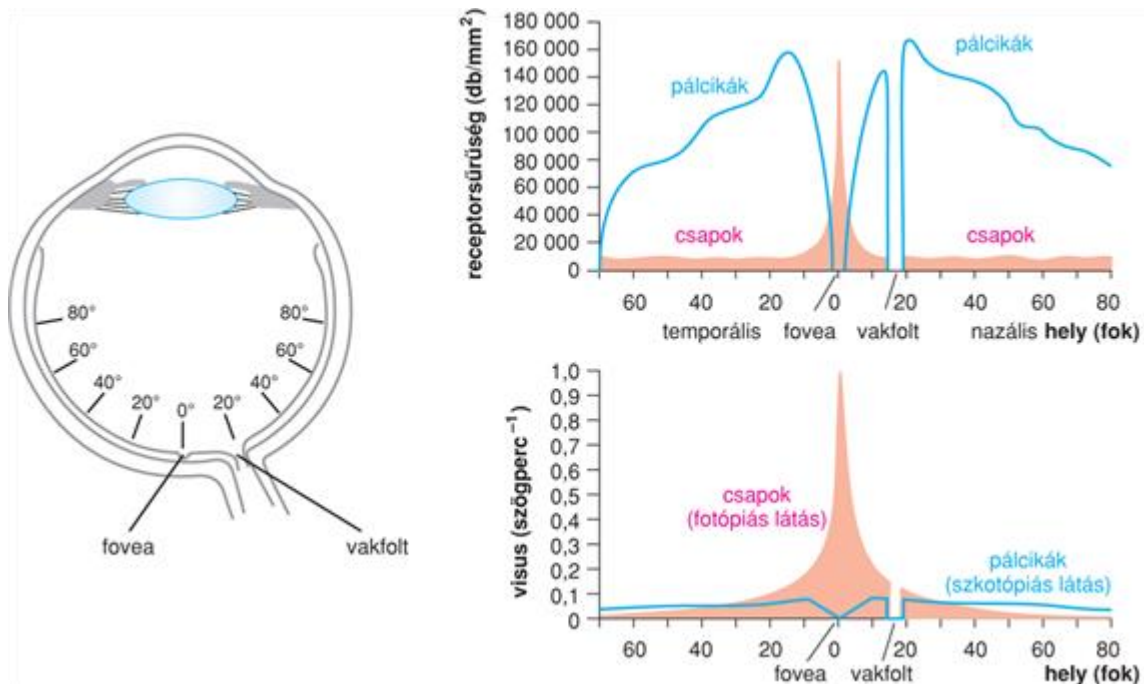
2.2.4. IV/2.2.4. A látási ingerület kialakulása a retinában

A látás a fotoreceptor sejtek, a retinában lévő idegsejtek, és az agy együttes működésének az eredménye. A retinára eső fény által elindított fotokémiai folyamatok a fényérzékeny sejtek állandó neurotranszmitter-

szekréciónak modulálják. Ennek eredményeképpen egy elektromos ingerületi hullám jön létre, amely a látóidegen keresztül az agykéreg megfelelő részébe jutva ott látásérzetet vált ki. A retina érzékelősejtjeinek ingerlése az agy megfelelő részében mindig fényérzetet eredményez. Így van ez akkor is, ha a kiváltó inger nem fény volt, hanem például a szemet ért ütés vagy nyomás. A képi információ kiértékelése (például fénykontrasztok vagy mozgás detektálása) már a retinában elkezdődik, az ideghártya bizonyos ingereket kiemel, másokat elnyom, mielőtt az agy felé továbbítaná.

A receptorsejtek eloszlása a retinában nem egyenletes. A fovea centralisban átlagosan $1,6 \cdot 10^5$ csap található 1 mm^2 felületen, míg 3 mm-re a középponttól ez a szám már csak $6 \cdot 10^3$. A fovea centralisban nincsenek pálcikák, így a csapoknak az emberi látásban betöltött szerepe a pálcikákénál nagyobb. A pálcikák sűrűsége a fovea centralis szélénél maximális, eléri a $1,8 \cdot 10^5$ -t mm^2 -enként, majd továbbhaladva kb. $3 \cdot 10^4$ -re csökken (IV.15. ábra).

Annak ellenére, hogy a pálcikasejtek sűrűsége a fovea centralis peremén meghaladja a csapsejtek maximális sűrűségét, a szürkületi látás élessége messze elmarad a nappali látásétól. Ennek oka a pálcikasejtek ingerületének konvergenciája az ingerület továbbítódása során.



IV.15. ábra. Csap- és pálcikasejtek eloszlása a retinában

2.2.5. IV/2.2.5. A fotoreceptorsejtek érzékenysége

Minden receptorsejt az alábbi öt feladat elvégzésében vesz részt: érzékelés, átalakítás, erősítés, továbbítás és szummáció.

Az emberi fotoreceptorok érzékenysége igen nagy. Ennek bemutatására vizsgáljuk meg a fény kvantumosságát. A kvantumelmélet szerint a szemünkbe jutó J intenzitású és f frekvenciájú fény A felületre t idő alatt beeső $E = JAt$ energia adagja $n = E/hf$ darab fotont tartalmaz másodpercenként egységnyi felületen, ahol h a Planck-állandó. A fényforrásból a fotonok kibocsátása véletlenszerűen történik, a fényforrás intenzitása ΔJ amplitúdóval fluktuál. Az n foton számában bekövetkező fluktuáció $n^{1/2}$ (a Poisson-eloszlás várható értéke és szórása közötti összefüggés alapján), vagyis $\Delta J/J = n^{-1/2} = (hf/E)^{1/2}$. Látszik, hogy a relatív fluktuáció annál nagyobb, minél alacsonyabb a fény intenzitása. A kísérletben többórás sötétalkalmazkodás után (amely arra szolgál, hogy a szem alacsony fényintenzitásra érzékeny pálcikasejtjeiben a rodopszin felhalmozódjék) a kísérleti alany egy lámpa fényét észleli. Fontos, hogy a lámpa képe a fovea peremére essen, ahol a pálcikasejtek sűrűsége maximális. Amennyiben a lámpa intenzitását kellő mértékben csökkentjük, az észlelő szerint a lámpa fel-felvillan a $\Delta J/J$ ingadozásának megfelelően. Ezt az észlelő nem látná, ha a fény nem lenne kvantumosságú, vagy ha a retina nem érzékelne már kisszámú fotont is.

A fentihez hasonló kísérleteken alapuló számításokkal kimutatták, hogy a pálcikák ingerületi állapotát már 1-2 elnyelt foton kiválthatja. Az ingerület konvergenciája a további idegsejteken egy térbeli szummációt eredményez, ami miatt látásérzetet csak több (kb. 25) pálcika együttes ingerlése okoz. A szummáció feltétele, hogy az ingerületbe kerülő pálcikák egyazon ganglionsejthez tartozzanak, azaz közel azonos helyén legyenek a retinának. A jelek szummációja egy bizonyos időintervallumon belül (tipikusan néhány század- másodperc) érkező jelekre történik, vagyis időbeli szummáció is lejátszódik. A pálcika sejtek jelének idő és térbeli szummációja fontos a nagy fényérzékenység elérésében. A csapsejtek ingerküszöbe magasabb mint a pálcikáké, rövidebb ideig integrálják a rájuk érkező fotonokat, valamint az ingerületi jelük kevésbé konvergál a továbbítás során a kapcsolódó idegsejteken. A pálcikasejteken a retinális képkiértékelés nagyobb érzékenységű fénydetektálást tesz lehetővé, de ennek az ára az, hogy a szürkületi látás idő és térbeli feloldása gyengébb, mint a nappali látásé és kevésbé képes a gyors mozgások detektálására is.

2.2.6. IV/2.2.6. Fotokémiai folyamatok a receptorsejteken

A fényérzékelés molekuláris mechanizmusát a pálcikák működésén keresztül mutatjuk be.

A fényinger elektrokémiai jellel történő átalakításának első lépése a rodopszinmolekulákban történik, ahol egy foton elnyelésének következtében a 11-cisz-retinál all-transz-retinállá izomerizál (IV.16. ábra). A megváltozott térszerkezetű retinál disszociál a fehérjéről, abban olyan konformációváltozást indukálva, amely felfedi az opszin citoplazmikus végén lévő enzimatikusan aktív helyeket. Ez a folyamat, amelynek végeredményeként a rodopszimból aktivált opszin lesz, több – spektroszkópiailag eszközökkel elkülöníthető – lépésben zajlik.

A továbbiakban egy kaszkád jellegű folyamat a sejt (pálcika, csap) speciális ligandkapuzott Na⁺-csatornáinak bezáródásához vezet. Ennek a folyamatnak a lépéseit a IV.17. ábra foglalja össze. Az aktivált opszin aktiválja a transzducin nevű fehérjét, amely a sejtek jelátviteli folyamataiban fontos szerepet játszó GTP-kötő fehérjék egyike. Az utóbbi fehérje egy foszfodiészteráz enzimet aktivál, amely a sejt cGMP-szintjét csökkenti, a ciklikus szerkezetű kis jelátvivő molekula gyűrűjét felhasítva. A cGMP intracelluláris koncentrációja szabályozza a sejt cGMP-szenzitív Na⁺-csatornáit nyitott és csukott állapotának valószínűségét. Magas cGMP-szint mellett a csatornák nyitva vannak. A foton elnyelődése után a cGMP-szint csökkenése miatt a Na⁺-csatornák záródnak, ami a sejt hiperpolarizációját idézi elő.

A fent leírt folyamatokban a receptorsejt erősítési funkciója könnyen tetten érhető: egyetlen foton elnyelődése kb. 300 Na⁺-csatorna bezáródásához vezet, ami 10³–10⁶ Na⁺ ion beáramlását gátolja, és hozzávetőleg 1 mV hiper-polarizációt okoz. A beérkező foton és így a jel energiája:

$$E_{\text{jel}} = h \cdot \frac{c}{\lambda} \rightarrow 1,5 - 3 \text{ eV}, \quad (\text{IV.18})$$

ahol h a Planck-állandó, c a vákuumbeli fénysebesség, és λ az érzékelt fény hullámhossza (400–800 nm). Az erősítés utáni, ionmozgásokból eredő energia:

$$E_{\text{ion}} = n \cdot e \cdot \Delta\varphi, \quad (\text{IV.19})$$

ahol n a beáramló Na⁺ ionok számában a csatornák záródása következtében beállt változás, e az elemi töltés, $\Delta\varphi$ a membrán két oldala közötti potenciálkülönbség. Membránpotenciálnak 60 mV-ot véve:

$$E_{\text{ion}} \rightarrow 6 \cdot 10^{-3} - 6 \cdot 10^4 \text{ eV}. \quad (\text{IV.20})$$

Az erősítés tehát:

$$A = \frac{E_{\text{jel}}}{E_{\text{ion}}} \rightarrow 2 \cdot 10^3 - 4 \cdot 10^4. \quad (\text{IV.21})$$

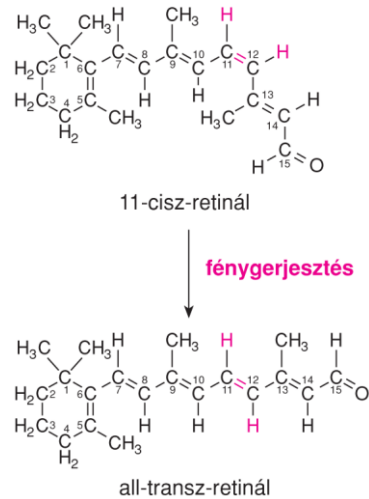
A jel erősítéséhez szükséges energiát a Na⁺ ionok (ATP-hidrolízissel járó) transzmembrán pumpálásakor befektetett energia szolgáltatja.

A fotoreceptorsejt úgy viselkedik, mint minden idegsejt: a depolarizáció növeli, a hiperpolarizáció csökkenti a transzmitterleadást. A nyugalmi helyzet enyhén depolarizált állapotának neurotranszmitter szekréciójához képest a fény hatására létrejövő hiperpolarizáció csökkenti a sejt bazális felszínén lejátszódó

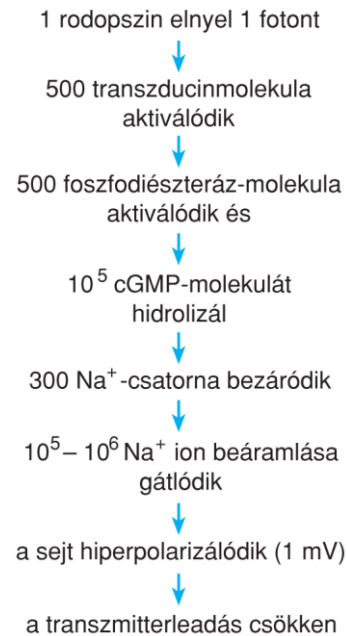
neurotranszmitterleadást (IV.18. ábra). Az inger egy alapaktivitás (szekréción vezikulák ürülése a szinaptikus részbe) modulálásaként jelenik meg. Első látásra a jelenség olyan, mintha a fotoreceptor a sötétet detektálná, mivel sötétben szekretál több neurotranszmittert, és ezt a sötét-„ingert” szünteti meg a fény, csökkentve a neurotranszmitterleadást. Mivel azonban a szekretált glutamát egy gátló neurotranszmitter, a fény egy gátlás gátlásával stimulációt eredményez.

Minden egyensúly fenntartásának alapfeltétele, hogy létezzenek negatív visszacsatolások, amelyek visszaállítják az eredeti állapotot. A negatív visszacsatolást biokémiai folyamatok valósítják meg.

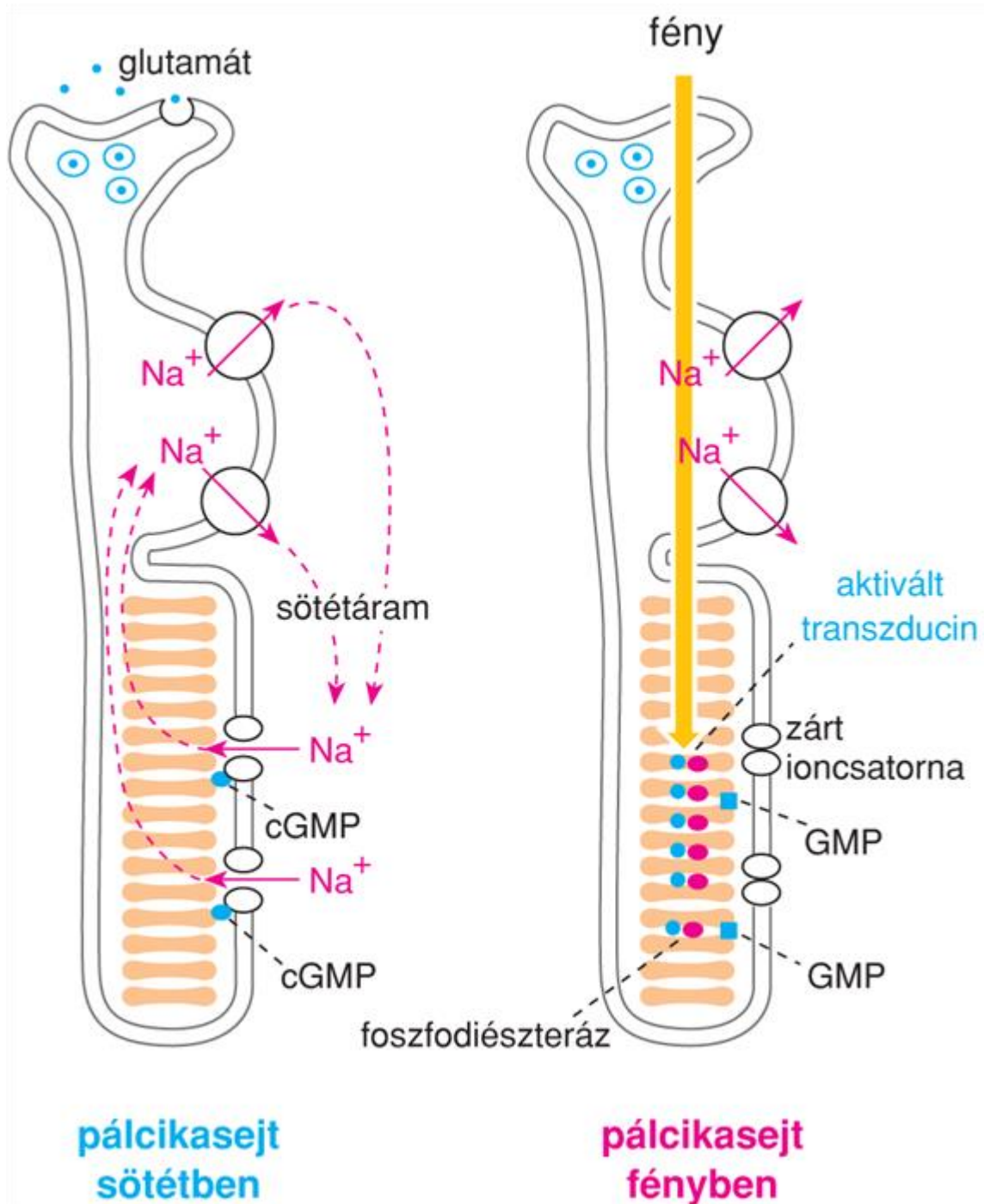
A retina fényindukált kaszkádfolyamatait egy általános érvényű jelátviteli mechanizmus prototípusának lehet tekinteni, ami más jelzőrendszerek esetén is hasonlóan működik. A cGMP szerepét más érzékszervek, illetve mechanizmusok esetén a cAMP tölti be.



IV.16. ábra. A retinál 11-cisz → transz izomerizációja



IV.17. ábra. A pálcikasejtekben a fényelnyelődés által kiváltott kaszkádfolyamat fő lépései



IV.18. ábra. Ioncsatorna-aktivitások, cGMP-szint és membránpotenciál összefüggései a pálcikasejtekben

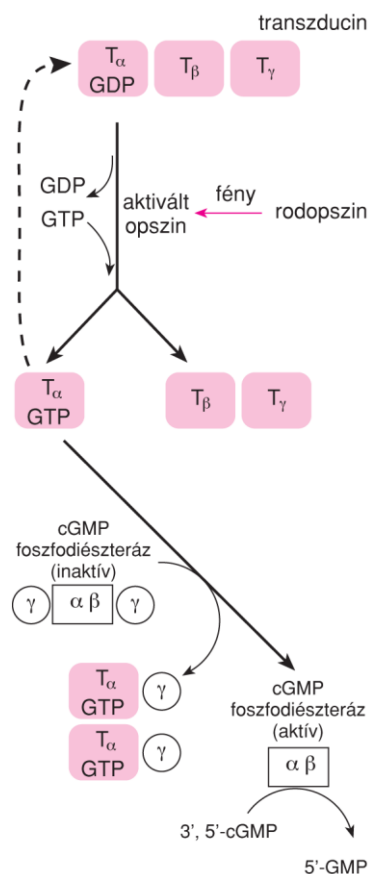
Példák az ingerületi állapotot megszüntető mechanizmusokra

Az elsődleges receptor szintű történések közül kétféle adaptációs mechanizmus bemutatásán szemléltetjük a negatív visszacsatolások szerepét a sejtek egyensúlyának fentartásában, illetve helyreállításában.

Az első folyamat a cGMP-szintet állítja helyre. A sejt nyugalmi állapotában a citoplazmában a külső térenél több nagyságrenddel kisebb a Ca^{2+} -koncentráció. Ezt az egyensúlyi értéket a Ca^{2+} -csatornák nyitási valószínűségének és a Ca^{2+} -pumpák hatékonyságának viszonya határozza meg. A fényerjesztést követő cGMP-koncentráció-csökkenés a sejtben nemcsak a Na^+ -, hanem a Ca^{2+} -csatornák záródását is előidézi, ami a citoszolban lévő szabad Ca^{2+} -koncentráció csökkenéséhez vezet. A Ca^{2+} -koncentráció a cGMP szintézisében fontos guanilátcikláz enzim működését szabályozza. A Ca^{2+} -koncentráció növekedése gátolja, annak csökkenése fokozza az enzim

működését. A folyamatok eredőjeként a cGMP-szint csökkenése gyorsítja, növekedése lassítja a cGMP szintézisét (ábra). Ez a késleltetett negatív visszacsatolás állítja helyre a sejtben a cGMP koncentrációját.

A másik szabályozási mechanizmus a változó fényviszonyokhoz történő alkalmazkodást segíti. Főszereplője az aktivált opszin, amelyet egy kináz enzim képes foszforilálni, és ezáltal részlegesen inaktiválni. Intenzív megvilágítás hatására az opszin foszforilációja fokozódik és ezáltal képes lesz az arresztin nevű szabályozófehérjét megkötni. Az opszin-arresztin komplex már egyáltalán nem képes transzducint aktiválni, vagyis a szem érzékenysége erős megvilágítás hatására csökken.



A cGMP koncentrációját helyreállító visszacsatolás mechanizmusa és kapcsolata a sejt ingerületi potenciálját kialakító ionszatórnák működésével

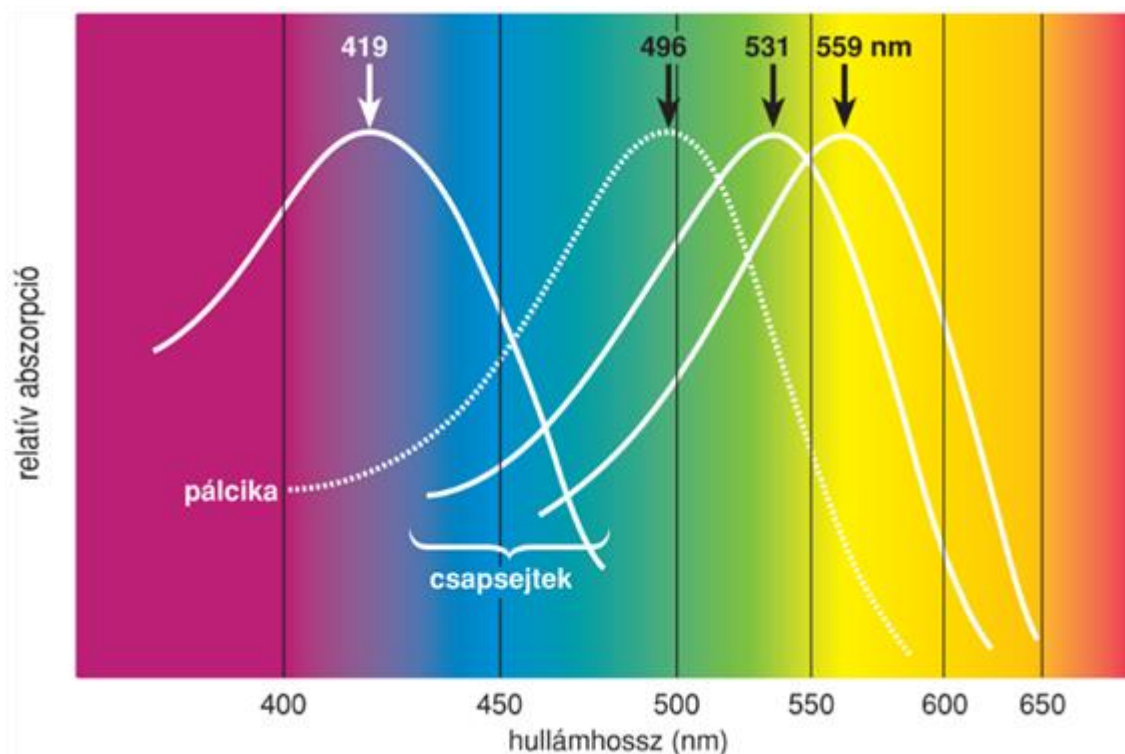
2.2.7. IV/2.2.7. Színlátás

Az ember különbséget tud tenni a látható fénysugarak között azok színe, azaz hullámhossza alapján. A szín érzet, és nem fizikai tulajdonsága a fénynek: a fény frekvenciája és színe közötti kapcsolat nem kölcsönösen egyértelmű. Adott körülmények között a spektrum minden egyes hullámhosszához hozzárendelhetünk egy színt, de nem minden színhez rendelhető egyértelműen hullámhossz. Ugyanakkor a körülményektől és korábbi tapasztalatainktól függően azonos frekvenciájú fénysugarak is képesek különböző színérzetet kelteni aszerint, hogy milyen a fényintenzitás és a környezet megvilágítása.

A Young–Helmholtz-elmélet szerint a színek érzékelését három eltérő spektrális tulajdonságú csapfajta teszi lehetővé (IV.4. megjegyzés). A retina egyedi csapsejtjeinek mikro-spektrofotometriás vizsgálata valóban háromféle: kék, zöld és vörös fényre érzékeny csapot mutatott ki (IV.19. ábra). Az emberi szemben a csapok nagy része (64%) vörös, mintegy harmada (32%) zöld és csak 2%-a kék. A pálcika és a három csaptípus eltérő spektrális érzékenysége a rodopszinmolekuláik különböző abszorpciós spektrumából ered (IV.19. ábra). A spektrumok átfedéséből látszik, hogy a receptorok gyakran egyszerre kerülnek ingerületi állapotba (IV.5. megjegyzés). A színérzet bonyolult kvantitatív kiértékelés után az agyban alakul ki, felhasználva a hiperpolarizációt mutató csapok számának arányát, és korábbi tapasztalatainkat is. Szürkületben, amikor látásunk a pálcikasejtekre hagyatkozik, nem látunk színeket.

IV.4. megjegyzés. Az állatok színérzékelése ettől jelentősen eltérhet. A madarak szemében például nemcsak pálcikák és csapok vannak, hanem dupla-csap-receptorok is. Ennek következtében a színlátásuk valószínűleg sokkal kifinomultabb, mint az emberi trikromatikus látás.

IV.5. megjegyzés. A hajók műszerfalának kijelzői pirosan vannak megvilágítva. A szürkületi látásért felelős pálcikasejtek érzéketlenek ebben a hullámhossz- tartományban. Éjjel a kapitány szeme sötétadaptált marad akkor is, ha a műszerekre pillant, és figyelni tudja jéghegyek vagy más akadályok felbukkanását. Ha a műszereket fehér fényvel világítanak meg, már egy rövid rápillantás is a szem sötétadaptációjának elvesztését eredményezné, és az újbóli adaptáció fél óránál hosszabb ideig tartana.

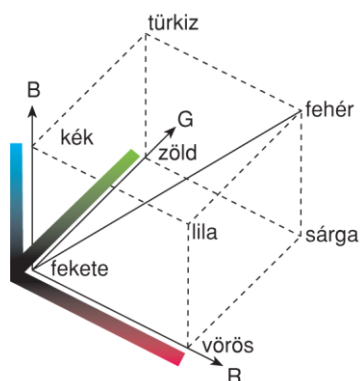


IV.19. ábra. Humán csap- és pálcikasejtek abszorpciós spektrumai

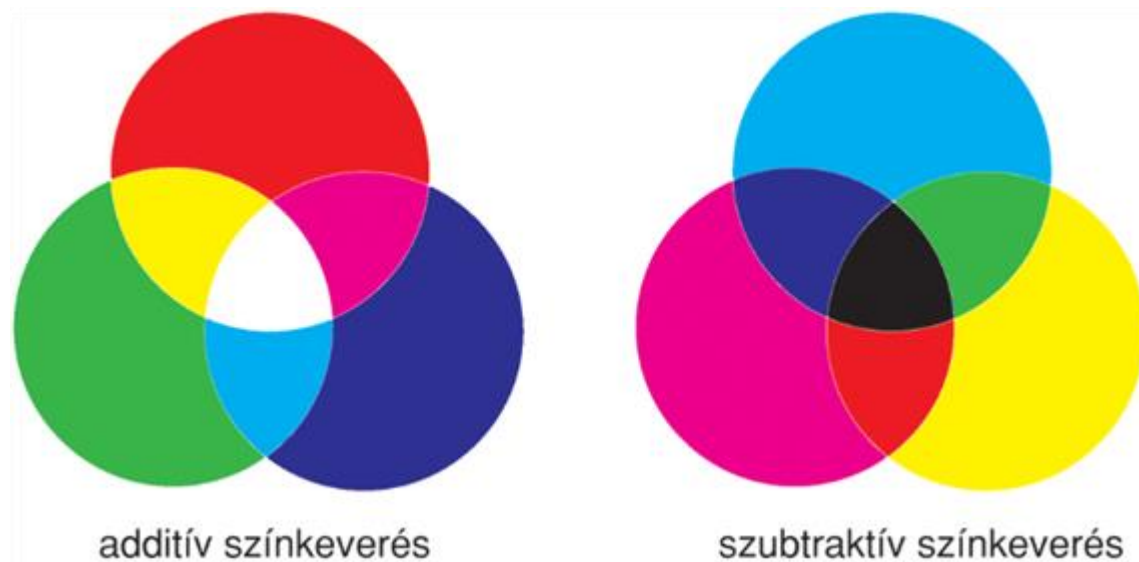
Megkülönböztethetünk tiszta, keverék és komplementer színeket. Tiszta színű a monokromatikus fény. Bármely szín előállítható additív kombinációval három olyan választott szín keverékéből, amelyek egyikét sem lehet a másik kettőből kikeverni. Ha a tetszőlegesen kiválasztható, önálló fényforrásból származó három alapszín R (red, vörös), G (green, zöld), illetve B-vel (blue, kék), a keveréshez használt intenzitásukat pedig az ábécé megfelelő kisbetűivel (r, g, b) jelöljük, a tetszőleges X színt az $X = rR + gG + bB$ összefüggés alapján kaphatjuk meg. A színeket leíró (r, g, b) számhármast tulajdonképpen az X vektor vetületeinek tekinthetjük az R, G, B egységvektorokra. Az egységvektorok irányát megadó színeknek bármely három szín választható, amelyikre igaz, hogy kettőből közülük nem keverhető ki a harmadik. A színes nyomtatásban, vetítőkben és képernyőkben a leggyakrabban a vörös, zöld és kék színeket használják alapszíneknek. A színek a vektorösszeadás szabályai szerint adódnak össze (IV.20. ábra). A színek kikeverését bemutató „RGB-kocka” sarkaiban a fekete, a fehér, a három alapszín (piros, zöld, kék) és az alapszínekből páronként kikeverhető keverékszínek (sárga, lila, türkiz) vannak. A színek telítettsége a kocka „fekete” és „fehér” sarkait összekötő térátlóhoz közeledve csökken. Az átló mentén a szürke különböző árnyalatai vannak. Komplementer színek azok a színek, amelyek megfelelő arányú keveréke fehér fény érzetét kelti.

Az additív mellett szubtraktív színekombinációt is ismerünk: például egy színes üvegen áteső fehér fényből az üvegen lévő festékanyag bizonyos komponenseket elnyel, s a többi komponens halad csak tovább. Szubtraktív keveréssel (IV.21. ábra) is valamennyi szín előállítható, például kék és sárga keverésével zöld, vörös és zöld színekből szürke (fekete). Az olyan tárgyak színe, amelyek nem önálló fényforrások, szubtraktív keveréssel alakul ki, s így nemcsak attól függ, hogy a tárgy milyen frekvenciájú fotonokat abszorbeál, illetve ver vissza, hanem a megvilágító fény spektrális összetételétől is. A legtöbb mesterséges fényforrás által kibocsátott fény nem fehér. Emiatt egy fehér tárgyról a szemünkbe érkező fény színe változó. Az, hogy a tárgyak színét mégis legtöbbször helyesen érzékeljük annak köszönhető, hogy az agyunk az ismert tárgyak emlékeinkben

elraktározott színét és a látszólagos színét összevetve automatikusan korrigál a megvilágításból adódó eltérésekre. Ennek sokszor csak akkor ébredünk tudatára, amikor mesterséges megvilágítás mellett fényképezve a fényképünkön minden narancssárgás (izzó használata esetén), vagy kékes (fénycső esetén) árnyalatúvá színeződik.



IV.20. ábra. A színek additív keverésének illusztrációja a vörös (red, R), zöld (green, G) és kék (blue, B) színeket választva alapszíneknek



IV.21. ábra. Additív és szubtraktív színkeverés

3. IV/3. A hallás

3.1. IV/3.1. A hallható hangok néhány közös tulajdonsága

3.1.1. IV/3.1.1. A hang magassága

„A hangmagasság a rezgés frekvenciájától függ úgy, hogy a magasabb hangnak nagyobb frekvencia felel meg” (Galilei, 1564–1642). Két különböző frekvenciájú (f_1 , f_2) hang viszonylagos magasságának szubjektív megítélésénél a frekvenciák viszonya (az f_2/f_1 hányados) a mérvadó, amelyet hangköznek hívunk. A 2:1 arányú hangköz a zenéből jól ismert **oktáv**. Az egymástól oktáv „távolságban” álló hangok között nagyfokú hasonlóságot (konszonanciát) érzékelünk. A hang magasságát a frekvenciák viszonyának logaritmusával érezzük arányosnak (lásd a IV.22. ábrát és a IV.6. megjegyzést). Két adott frekvenciájú hang ($f_1 < f_2$) között az ún. **harmonikus oktávok száma** ($n_{\text{oktáv}}$):

$$n_{\text{oktáv}} = \log_2 \frac{f_2}{f_1},$$

(IV.22)

ahol „log₂” a 2-es alapú logaritmás jele.

Az átlagos hallástartomány kb. 10 harmonikus oktávnak felel meg. A beszédhang átlagos terjedelme az alaphangjait tekintve csak kb. 1 oktáv, férfiaknál 100 és 200 Hz, nőknél 150 és 300 Hz között van. A zenében használt hangok magasságának terjedelme kb. 7 oktáv, 30–5000 Hz.

IV.6. megjegyzés. 1000 Hz felett, a konszonancia (ti. két hang kellemes együtthangzása) oktáv esetén már 2-nél nagyobb frekvenciaarányt jelent. Az ennek alapján mért rezgésszámok eltérnek a harmonikus oktávoktól, ez az ún. **melodikus oktáv**.

Harmonikus oktávok (Hz-ben): 80 160 320 640 1280 2560 5120

Melodikus oktávok (Hz-ben): 80 160 320 640 1280 3540 7800

3.1.2. IV/3.1.2. A hang színezete

A legegyszerűbb, és egyben legtisztább hangzású hang az ún. **szinuszos hang** (II. fejezet II.46. ábra), melynek időfüggvénye:

$$p(t) = p_{\max} \cdot \sin(2\pi t/T + \varphi) = p_{\max} \cdot \sin(\omega t + \varphi),$$

(IV.23)

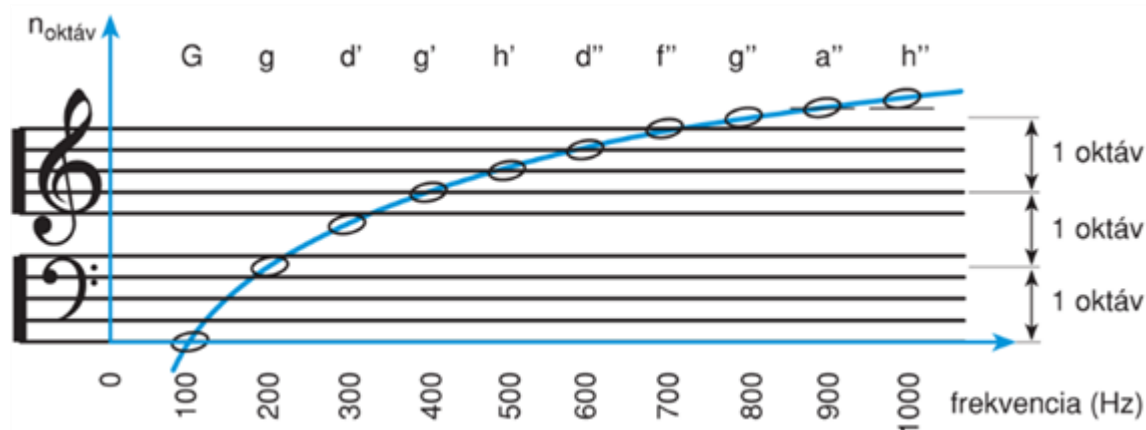
ahol p_{\max} a **nyomásamplitúdó**, ω a **körfrekvencia**, t az idő és φ a **fázis** [vö. a (II.61) összefüggéssel].

Csaknem tökéletes szinuszos hang például a fütty. Különböző hangforrások egyenlő magasságú (alapfrekvenciájú) hangjai között általában „színezetbeli” különbségeket veszünk észre, így például a hegedű és a fuvola ugyanolyan magasságú hangjait meg tudjuk különböztetni egymástól. „**A hangszínezet az alaphanghoz csatlakozó ún. felhangok (harmonikusok) frekvenciája és viszonylagos erőssége, azaz a hang rezgési spektruma szabja meg**” (Helmholtz, 1873). A **zenei hangok** esetében a felhangok az alapfrekvenciának egész számú többszörösei. Ilyenkor az alábbi matematikai leírás lehetséges:

$$p(t) = p_1 \sin(\omega t) + p_2 \sin(2\omega t) + p_3 \sin(3\omega t) + \dots$$

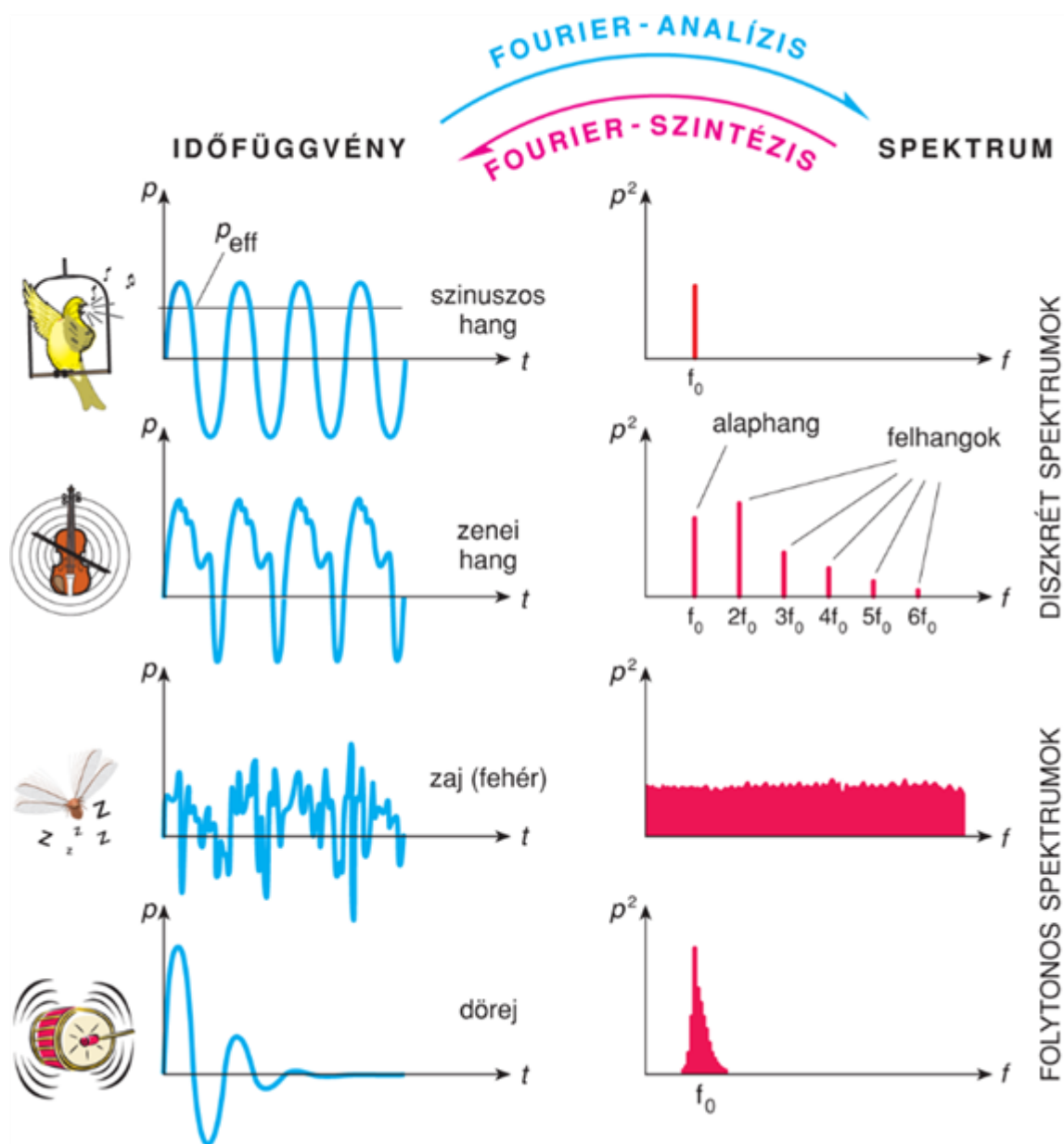
(IV.24)

A fenti kifejezés nem más, mint az összetett zenei hang különböző nyomásamplitúdójú harmonikusokra felbontott **Fourier** sora (lásd még VII/1.1.3.). A rezgésösszetevők fázisait azért hagytuk el, mert „**a fül nem érzékeli a felharmonikusok egyedi fázisait**” (Ohm, 1843). A **teljesítményspektrum** az amplitúdók helyett, azok négyzeteivel arányos mennyiségeket tartalmaz (lásd a IV.23. ábrát és a IV.7. megjegyzést).



IV.22. ábra. A hangmagasság érzete logaritmikusan függ a frekvenciától

IV.7. megjegyzés. A Fourier-analízis gyakran használt matematikai módszer: a jel időfüggvényét analizálja, azaz frekvencia-összetevőkre bontja. Az ún. inverz Fourier-transzformáció lehetőséget ad tetszőleges alakú időfüggvény különböző frekvenciájú és amplitúdójú szinuszos összetevőkből történő szintézisére.



IV.23. ábra. Különböző hangok és jellemző spektrumaik

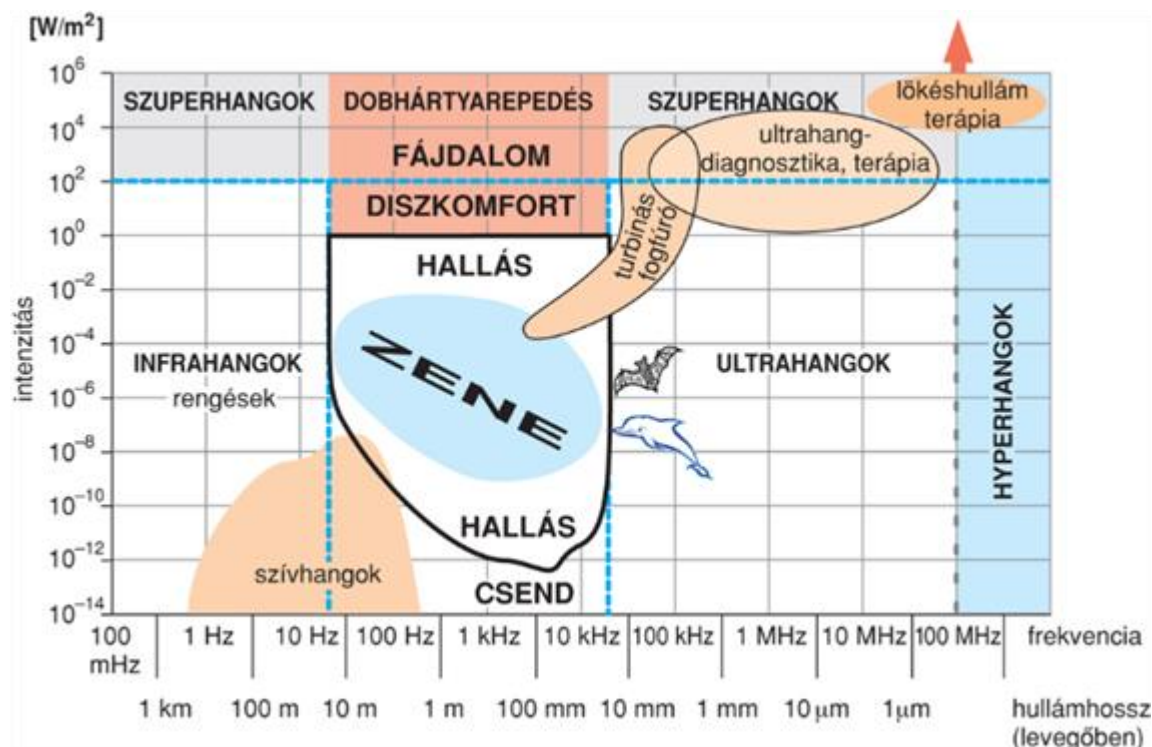
3.1.3. IV/3.1.3. Az irányhallás

A két fül által érzékelt hang általában nem azonos. Egy nem pontosan előttünk levő hangforrásból kiinduló hanghullámok eltérő fázisban, nem azonos időben és különböző amplitúdóval érkezik a bal, ill. a jobb fülünkhöz. Ez a jelenség vezet a hangforrások térbeli helyzetének megítéléséhez, más néven a **sztereohallás** kialakulásához.

3.1.4. IV/3.1.4. Hangok és hallás

A IV.24. ábra eligazodást jelenthet a hallható hangok elhelyezkedésére a frekvencia és az intenzitás tágas tartományaiban. A diagramon egy szinuszos hangnak egyetlen pont, egy zenei hangnak pedig – a felharmonikusok miatt – egy pontsorozat felel meg (lásd VII/1.1.3.).

A legkisebb intenzitású hangot, amit az emberi fül érzékelni képes **hallásküszöbnek** nevezzük. A fiatal, egészséges népesség átlagában ez az érték $J_0=10^{-12}$ W/m²-nek adódik (1000 Hz-en mérve). A maximális intenzitás, amit rövid ideig még károsodás nélkül elviselünk, kb. 10W/m². Ez a tartomány, mintegy 13 nagyságrendet fog át, ezért csak az intenzitás és a frekvencia logaritmusát ábrázolva kapunk jól áttekinthető ábrát.



IV.24. ábra. A hangok frekvencia és intenzitás tartományai

3.1.5. IV/3.1.5. Intenzitásszint

Ha egy fizikai mennyiség mérőszámai több mint két nagyságrendet fognak át, a lineáris ábrázolás pontatlanná, kényelmetlenné válik. Egy átlagos ábra néhány cm nagyságú, míg az ábrázolt függvény vonalvastagsága csupán néhány tized mm. Ilyenkor célszerű a mennyiséget, vagy annak arányait a logaritmusával helyettesíteni. A logaritmálás során a mennyiség egy bizonyos aránya, viszonya a logaritmált mennyiség azonos különbségévé, távolságává alakul. Az intenzitások kényelmesebb összehasonlítása, ábrázolása érdekében bevezették az ún. decibelskálát. Az **intenzitásszint(n)** a relatív intenzitások (J_1/J_2) tízes alapú logaritmusának 10-szerese:

$$n = 10 \cdot \lg \left(\frac{J_1}{J_2} \right). \quad (\text{IV.25})$$

Ez valójában egy szám, de a neve, „mértékegysége” a **decibel (dB)**, ami a bel tizede (IV.25. ábra).

Megfigyelhetjük, hogy pl. kétszeres intenzitásarány (2:1, 4:2, vagy 10:5) egyaránt 3 dB szintkülönbségnek felel meg.

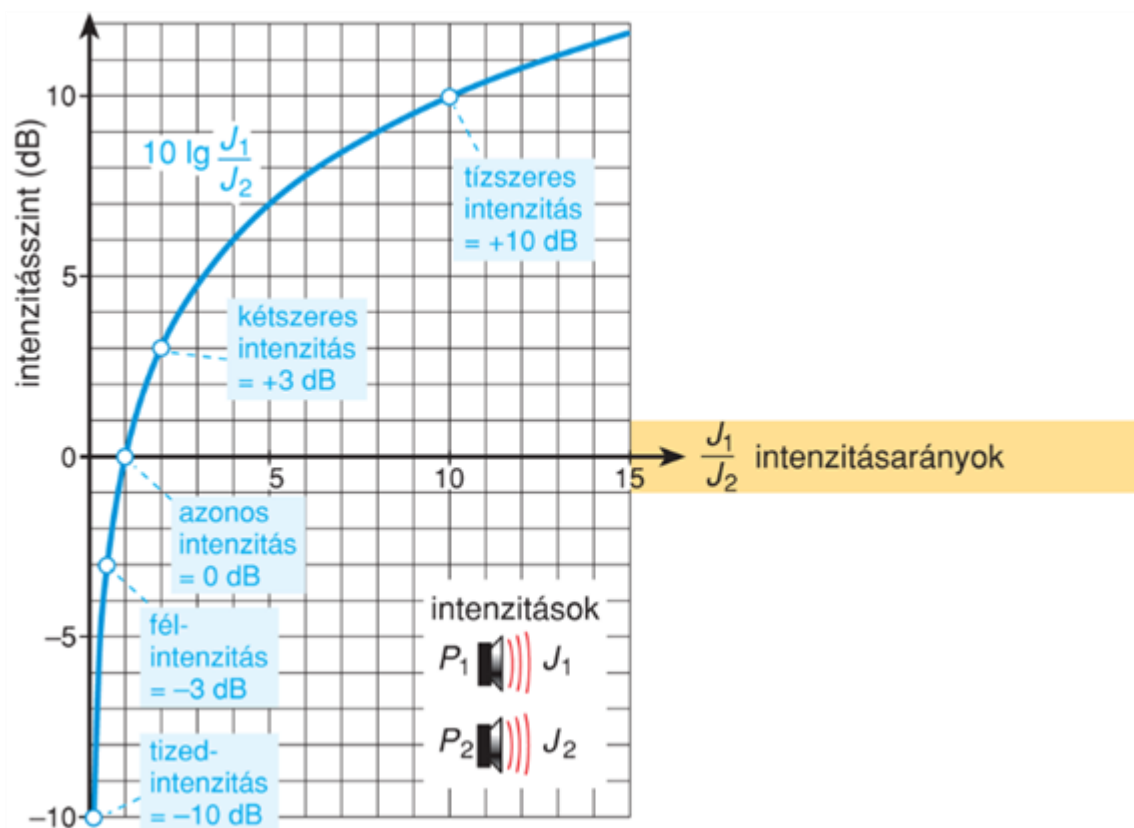
Széles körben használják a decibelskálát **erősítők** (hangerősítők) teljesítményerősítésének (P_{dB}) kifejezésére, valamint a **csillapítás** (pl. hangszigetelés) jellemzésére:

$$n = 10 \cdot \lg \left(\frac{P_{ki}}{P_{be}} \right) = 10 \cdot \lg \left(\frac{J_{ki}}{J_{be}} \right), \quad (\text{IV.26})$$

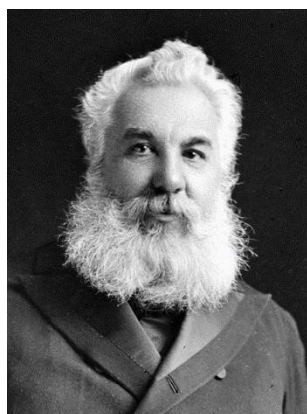
ahol P_{ki} a kimenő, P_{be} a bemenő teljesítményt, illetve J_{ki} a kimenő, J_{be} a bemenő intenzitást, jelenti. Ha a kimenő intenzitás kisebb, mint a bemenő, n negatív lesz, ilyenkor csillapításról beszélünk. A hallásvesztés egyfajta csillapításként ($n_{csill.}$) értelmezhető, ami bizonyos esetekben a hallókészülék erősítésével ($n_{erős.}$) kompenzálható.

Az erősítő és a csillapítás ilyenkor sorba kapcsolódnak, az eredő intenzitásszint az egyes erősítés- és csillapításszintek algebrai összegzésével számítható ki.

$$n = n_{\text{erős.}} + n_{\text{csill.}} \quad (\text{IV.27})$$



IV.25. ábra. A decibel mint a relatív intenzitás logaritmikus mértéke. A vízszintes tengelyen az intenzitásarányokat tüntettük fel (J_1/J_2)



Alexander Graham Bell (1874– 1922) a telefon szabadalmaztatója, tiszteletére nevezték el az intenzitásszint logaritmikus egységét. Praktikus okból használják a bel tizedét, a decibelt, ui. kb. 1 dB intenzitásszint változást képes az emberi fül megkülönböztetni. Ez 26%-os intenzitás növekménynek felel meg.

4.5. táblázat - IV.5. táblázat. Relatív intenzitások és intenzitásszintek

Relatív intenzitások	Intenzitásszint [dB]
1 000 000 000 000 :1	120 dB

1 000 000 :1	60 dB
10 000 :1	40 dB
100 :1	20 dB
10 :1	10 dB
4 :1	6 dB
2 :1	3 dB
1 :1	0 dB
1 :2	-3 dB
1 :4	-6 dB
1 :10	-10 dB
1 :100	-20 dB

3.2. IV/3.2. Az emberi fül felépítése és működése

A fül a levegő „gyenge” mechanikus rezgéseit elektromos jelekké alakítja, amik a hallóidegeken keresztül jutnak az agykéreg megfelelő részébe, további feldolgozásra. Az agy értelmezi ezeket a bonyolult jeleket, megállapítja a hang magasságát, színezetét, hangosságát és a hangforrás helyzetét.

Példák az intenzitásszint és a decibelfogalom használatára

A normális hangerejű beszéd kb. 1 m távolságból $J_1 = 10^{-6}$ W/m² intenzitású. A hangok intenzitását az 1000 Hz-es hallásküszöb intenzitásához $J_2 = J_0 = 10^{-12}$ W/m²-hez hasonlítjuk (lásd később). Az intenzitásszint: $J_{dB} = 10 \lg(10^{-6}/10^{-12})$ dB = 10 lg (10⁶) = 60 dB.

Megduplázva a hang fizikai intenzitását: $J_{dB} = 10 \lg(2 \cdot 10^{-6}/10^{-12}) = 10 \lg(2 \cdot 10^6) = 10 \lg(2) + 10 \lg(10^6) = 3 + 60 = 63$ dB

adódik, tehát az intenzitásszint csak 3 dB-el nő meg.

Összegezzünk két eltérő intenzitású hangot! Egy ébresztőóra, mely 1 m távolságban 80 dB intenzitásszintű és pl. a beszélgetés 60 dB-es szintjét dB-ben természetesen nem szabad közvetlenül összeadni! Ehelyett az összeadást az intenzitásokkal kell elvégezni, így:

Beszélgetés: 60 dB = 10 lg (J_{besz}/J_0)-ból az J_{besz}/J_0 -t kifejezve: $J_{besz} = 10^{-6}$ W/m², vagy $10^6 \cdot J_0$.

Ébresztőóra: 80 dB = 10 lg ($J_{óra}/J_0$)-ból az $J_{óra}/J_0$ -t kifejezve: $J_{óra} = 10^8 \cdot J_0$ -nak adódik. Az összegzett intenzitás $J = J_{besz} + J_{óra} = (10^6 + 10^8) \cdot J_0 = 1,01 \cdot 10^8 J_0$.

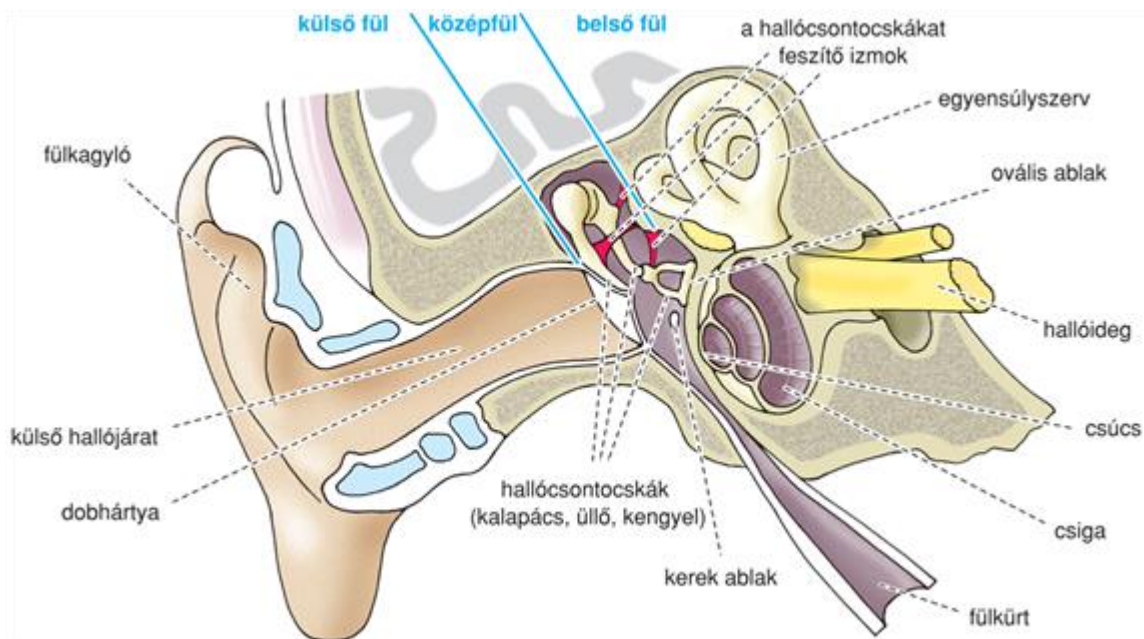
Az intenzitásszint $J_{dB} = 10 \lg(1,01 + 10^8) = 0,043 + 80 = 80,043$ dB ami alig több mint 80 dB. Tapasztalatainknak megfelelően az ébresztőóra teljesen elnyomja a beszélgetést.

3.2.1. IV/3.2.1. A külső fül

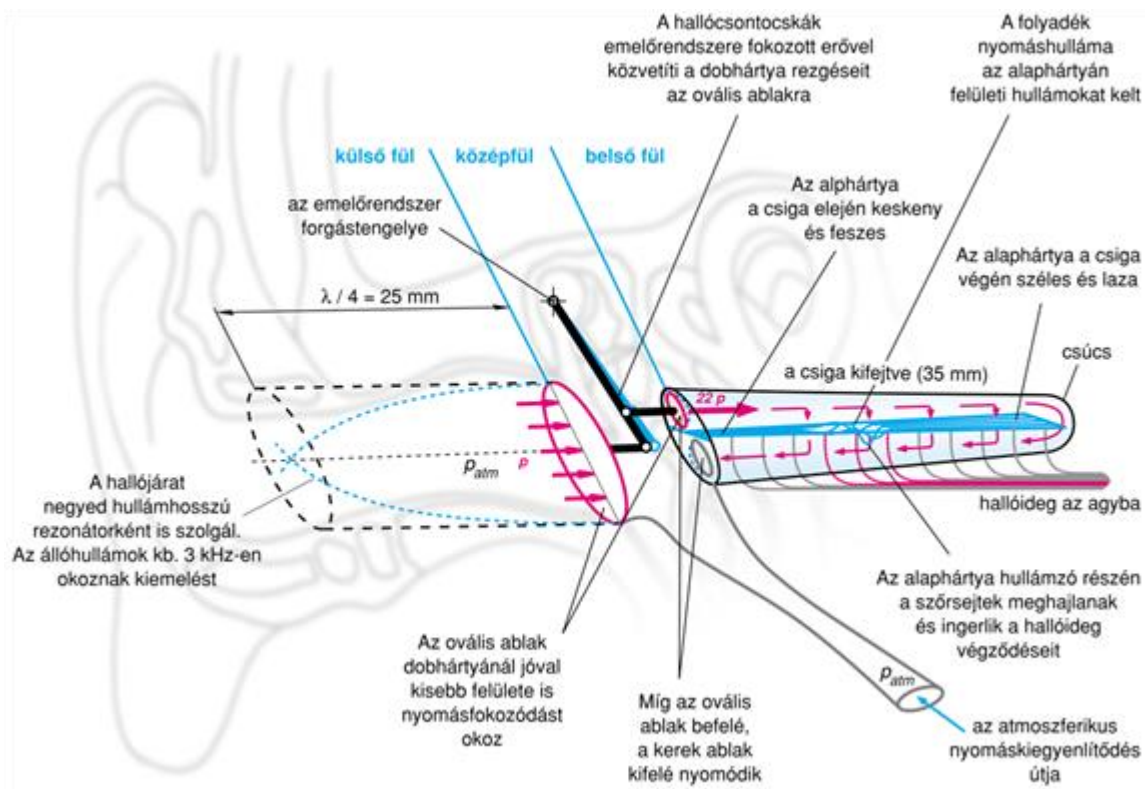
A fül kívülről is látható része a **fülkagyló**. A fülkagyló redői az alulról, felülről, ill. az előlről, hátulról jövő hangokat eltérő módon verik vissza, ezért a hang irányától függően más-más intenzitású és spektrális összetételű hang kerül a hallójáratba. A fülkagylónak tehát a térbeli hanginformáció (ami alapjában véve a kétfüles hallás révén jön létre) kiegészítésében van szerepe (IV.26 ábra).

A **külső hallójárat**, mely kb. 25 mm hosszú és kb. 7 mm átmérőjű, a dobhártyához vezet. Benne ugyanúgy állóhullámok keletkeznek, mint az egyik végén zárt orgonasípban (IV.27. ábra). A viasszal bevont hallójáratí bőr erős csillapítása miatt a rezonancia kevésbé éles, mint az orgonáé, de a kiemelés így is jelentős, 3000 Hz körül kb. háromszoros nyomás-, azaz kb. tízszeres intenzitásnövekedést okoz ($J = p^2/Z$) (IV.28. ábra).

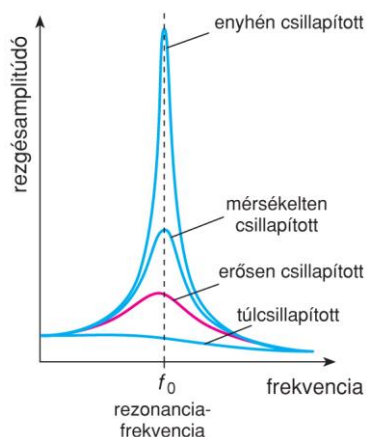
A hang keltette finom nyomásváltozások „dob”-ként rezegtetik meg az ernyőalakban kifeszülő **dobhártyát**, melynek területe kb. 55 mm². A levegő rezgési amplitúdója az éppen meghallott hangok esetében rendkívül kicsi: kb. 10-szer kisebb, mint a hidrogénatom átmérője, 10⁻¹¹ m. Kiszámították, hogy ez az elmozdulás kb. 30%-kal nagyobb, mint az a zajamplitúdó, melyet a levegő rendezetlen hőmozgása idéz elő! Az evolúció tehát nem hozott létre értelmetlenül nagy érzékenységu hallószervet, hiszen érzékenyebb füllel csak a levegő termikus zaját hallhatnánk!



IV.26. ábra. A fül anatómiai felépítése



IV.27. ábra. A fül fizikai működésének egyszerűsített vázlata



IV.28. ábra. Különböző mértékben csillapított rezonanciák

3.2.2. IV/3.2.2. A középfül

Az emberi test legkisebb csontocskái a dobhártya belső feloldalára tapadó **kalapács**, az ehhez csatlakozó **üllő**, ill. a **kengyel**. Ezek közvetítik a dobhártya rezgéseit a vízszertű folyadékkal töltött belső fül egy kisebb membránjára, az ún. **ovális ablakra**.

A levegő-víz határfelületén a közegek nagy akusztikai impedancia (lásd II/2.3.1.) különbözősége miatt csaknem teljes a hang visszaverődése. A külső és a középfület levegő, míg a belső fület folyadék tölti ki.

A csontocskák tömege, a felfüggesztőizomcskák rugalmassága és belső sűrűlódása mechanikai rezgőrendszert alkotnak (tömeg, rugó, csillapítás). Ez a „rezgőrendszer” kb. 20 000 Hz-nél határolja a legmagasabb belső fülbe jutó hang frekvenciáját, ugyanakkor 1 kHz körül jelentős kiemelés is okoz. Lényegében a csontocskák és a külső hallójárat rezonanciái felelősek a fül érzékenységi görbéinek jellegzetes „U” alakjáért (lásd később).

A saját hang, az izmok keltette és a vér áramlása okozta zaj közvetlenül csak minimális mértékben kerül a belső fülbe. A külső fülből eredő hangok a csontocskákon keresztül csak az ovális ablakot mozgatják, miközben a kerek ablak ellenkező irányban domborodik (ún. differenciálmódus). A fej rezgései azonban mindkét ablakon egyszerre fejtenek ki erőt (ún. közös módus), így a csigát kitöltő folyadék csak kismértékben jön mozgásba.

A dobhártyára normális esetben mindkét oldalról azonos atmoszférikus nyomás hat. Az esetleges nyomáskülönbséget (pl. liftben vagy repülőn gyors magasságváltozáskor) a garatba vezető fülkürt időszakos megnyitásával, nyeléssel egyenlítjük ki.

IV.8. megjegyzés. A papírvékony (0,1 mm), szálas szerkezetű dobhártya rendkívül szívós és rugalmas. Ezt a tulajdonságát a természetes kiválasztású viasz (fűlszír) tartja karban. Azonban hirtelen nyomásváltozás, pl. egy robbanás erős hangja könnyen megrepedeztetheti.

A középfül erősítő szerepe

Vizsgáljuk meg, hogy ha a hang közvetlenül (a dobhártya és a hallócsontocskák nélkül) érne az ovális ablakot, a hang levegőbeli intenzitásának (J_{lev}) hányad része jutna a belső fülbe (J_{viz}). Az R reflexiós tényező a levegő és a víz akusztikus impedanciáiból (Z_{lev} , Z_{viz}) számítható ki:

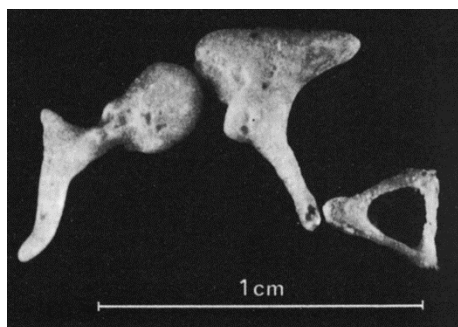
$$R = \frac{J_{refl}}{J_{lev}} = \left(\frac{Z_{viz} - Z_{lev}}{Z_{viz} + Z_{lev}} \right)^2 = 0,9989.$$

A visszavert intenzitás (J_{refl}) értéke csaknem azonos a levegőbeli rezgés intenzitásával és annak csupán $J_{viz}/J_{lev} = 1 - R = 0,0011$ része, azaz kb. egy ezreléke jutna a belső fülbe.

A külső fül alacsony és a belső fül jóval magasabb „akusztikai impedanciáját” a középfül „szerkezetei” illesztik, a jobb energiaátadás érdekében (1. ábra).

Az alábbiakban p_{lev} , p_{viz} a hangnyomás effektív értékeit jelöli a külső fül levegőjében, ill. a csiga folyadékában. A dobhártya felületén (A_{dob}) keletkező erő (F_{dob}):

$$F_{dob} = p_{lev} \cdot A_{dob}.$$



1. ábra. A hallócsontocskák az emberi test legkisebb csontjai (körülbelül 3-szoros nagyítás)

A csontocskák egykarú emelőrendszer alkotnak 1,3 : 1 áttétellel (2. ábra. 1,3 x -el, ill. x -el jelölt emelőkarok). A jóval kisebb felületű ovális ablakon (A_{oval}) keletkező erő (F_{oval}):

$$F_{oval} = F_{dob} \frac{1,3x}{x} = 1,3 \cdot p_{lev} \cdot A_{dob}.$$

A belső fül folyadékában keletkező nyomás:

$$p_{\text{víz}} = F_{\text{oval}}/A_{\text{oval}} = 1,3 p_{\text{lev}} A_{\text{dob}}/A_{\text{oval}} = 1,3 p_{\text{lev}}(55/3,2).$$

A két rendszer együttes hatásának végeredménye:

$$p_{\text{víz}}/p_{\text{lev}} = 22,3$$

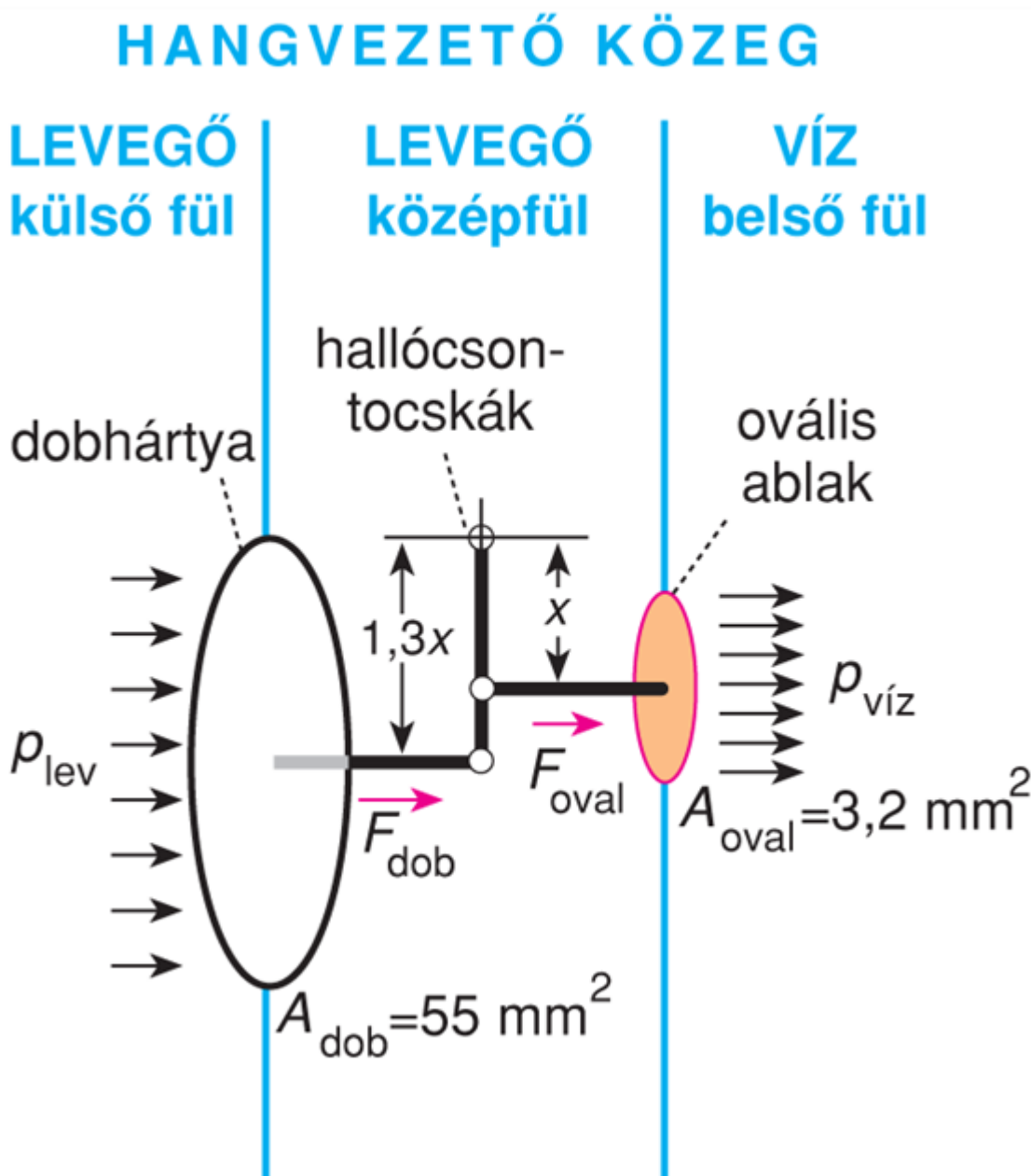
Tehát **kb. 22-szer** nagyobb **hangnyomás lép fel a belső fülben, mint ami a dobhártyán hat**. Ez az intenzitások arányát az alábbiak szerint javítja:

$$\frac{J_{\text{víz}}}{J_{\text{lev}}} = \frac{\frac{p_{\text{víz}}^2}{Z_{\text{víz}}}}{\frac{p_{\text{lev}}^2}{Z_{\text{lev}}}} = \left(\frac{p_{\text{víz}}}{p_{\text{lev}}}\right)^2 \frac{Z_{\text{lev}}}{Z_{\text{víz}}} = (22,3)^2 \frac{414}{1,5 \cdot 10^6} = 0,137 < 1.$$

Ez az érték még mindig sokkal kisebb, mint az optimálisnak számító 1, de a középfül intenzitásfokozó hatása így is:

$$0,137 / 0,0011 = \mathbf{125\text{-szörös}}.$$

A középfülbe „automatikus hangerő-szabályozó” van beépítve! Túlságosan erős hang esetén a hallócsontocskákra tapadó izmocskák megfeszülnek és különösen a mélyebb hangoknál jelentősen csökkentik a hangátvitelt. Ez a mechanizmus a belső fül védelmét szolgálja, a reflex kialakulása azonban lassú, ezért közeli puskalövés vagy robbanás hangjától nem véd meg.



2. ábra. A dobhártya, a hallócsontocskák és az ovális ablak nyomásfokozó hatása

IV.9. megjegyzés. A „**saját hang**” kiküszöbölése fontos tulajdonság, enélkül elviselhetetlenül hangos lenne saját beszédünk. A túl erős saját hang a középfülben a hangmagasságtól függő módon legyengül. Ez az oka annak a jelenségnek, amikor magnóra felvett hangunkat visszajátszva, azt idegenszerűnek találjuk.

3.2.3. IV/3.2.3. A belső fül

Az **egyensúlyszerv** félkörös ívjáratok és a **csiga** mélyen a koponya csontjába ágyazódnak. A csiga egy kis körömvívi, csigavonalban tekeredő (2,5 fordulat) vízszertű folyadékkal telt cső, mely hosszában lényegileg két részre van osztva az ún. **alaphártyával (membrana basilaris)**, melynek vastagsága kb. $10 \mu\text{m}$. A csiga működése jobban megérthető, ha képzeletben kiegyenesítjük, így kb. 35 mm hosszú lesz (IV.27. ábra). A cső elején az ovális ablak a felső folyadékrésszel érintkezik. A távoli csúcsonál a felső és az alsó folyadékrész közlekedhet. Az alsó folyadékrész a **kerek ablakkal** (ami szintén egy membrán) ismét a középfülre nyílik. Annak ellenére, hogy a csiga az alapjától a csúcsa felé keskenyedik, a membrana basilaris rezgésre képes része éppen fordítva, az ovális ablaknál keskeny, és a csúcs felé szélesedik (0,04 mm-től 0,5 mm-ig). A membrana basilaris nem egy rugalmasan megfeszített membránhoz, hanem inkább egy mechanikai feszültségtől mentes,

laza, gélszerű felépítésű réteghez hasonlítható. Közvetlenül a membrana basilaris felett helyezkedik el az ún. **Corti-szerv** a több tízezer **szőrsejttel** és a **hallóideg** végződéseivel.

A **Békésy György** által felállított elmélet az alaphártyán terjedő **felületihaladóhullámokra** épít (IV.29. ábra).

Az ovális ablakból kiinduló hidraulikus nyomáshullám a kerek ablakon egyenlítődik ki, miközben nyíró mechanikai hatást gyakorol a felső, és az alsó folyadék részt elválasztó alaphártyára, és azon **felületi haladóhullámokat** kelt (IV.29. ábra).

A felületi hullámok, pl. a tenger felszínén a szél vagy földrengés hatására alakulnak ki, és hullámhosszukat nem a gerjesztő rengés frekvenciája, hanem a gravitáció, ill. a víz felületi feszültsége határozza meg. Tapasztalatból tudjuk, hogy a víz hullámai sokkal lassabban (általában szélesebbséggel) terjednek, mint maga a hang (1440 m/s).

Békésy bebizonyította, hogy bárhol is érkeznek a **hanginger** (az ovális ablakon át vagy csontvezetéssel), az ovális ablaktól a csiga csúcsa felé **haladó felületi hullámot** hoz létre. Ez a felületi hullám, ami kb. cm-es hullámhosszú, alapvetően különbözik az adott folyadék közegében egyébként kialakuló longitudinális hullámoktól (annak hullámhossza pl. 1000 Hz-en 144 cm). A felületi hullám **terjedési sebessége** a membrana basilaris növekvő szélességétől és lazaságától függ, és emiatt az ovális ablaktól távolodva egyre csökken (45 m/s–2 m/s). A csökkenő terjedési sebesség következménye, hogy az időben későbbi hullámfázisok utolérnek az előbbieket, amplitúdójuk fokozatosan nő, majd hirtelen lecsökken (IV.29. ábra). Figyeljük meg a t_1 - t_2 idővel jelölt hullámok közötti távolság fokozatos csökkenését.

A szaggatott vonallal jelölt **burkológörbe maximumának helyzete a hanginger frekvenciájától, amplitúdója pedig az erősségétől függ** (IV.30. ábra). A magas hangok keltette felületi haladóhullámok az ablakokhoz közeli keskeny, feszes részen, míg a mélyebb hangok okozta kilengések a távolabbi, kiszélesedett, laza végen keletkeznek. Mély hangoknál a hullámzás az egész membrana basilaris hosszát, míg magas hangoknál csak az elejét tölti ki. Az ábra nyilai a burkológörbe ingerfrekvenciától függő helyzetű maximumaira mutatnak.

A membrana basilaris rezgései a Corti-szerv haladóhullámok által érintett szőrsejtjeit meghajlítják (lásd később), így bennük elektromos potenciálkülönbség keletkezik. Az ingerelt szőrsejtkekhez kapcsolódó hallóideg végződése összegezik a fenti potenciálokat és az inger erősségétől függő ütemben akciós potenciálok sorozatát továbbítják az agyba.

A membrana basilaris kitérésamplitúdói tompák, elkentek, mégis egyfajta **előzetes frekvenciaszétválasztást** nyújtanak. Csupán ezzel nem magyarázható fülünk elemzőképességének élessége (1000 Hz-en néhány Hz). A pontos frekvenciaanalízist a cochlea, ill. a hallóidegek később ismertetendő folyamatai végzik.

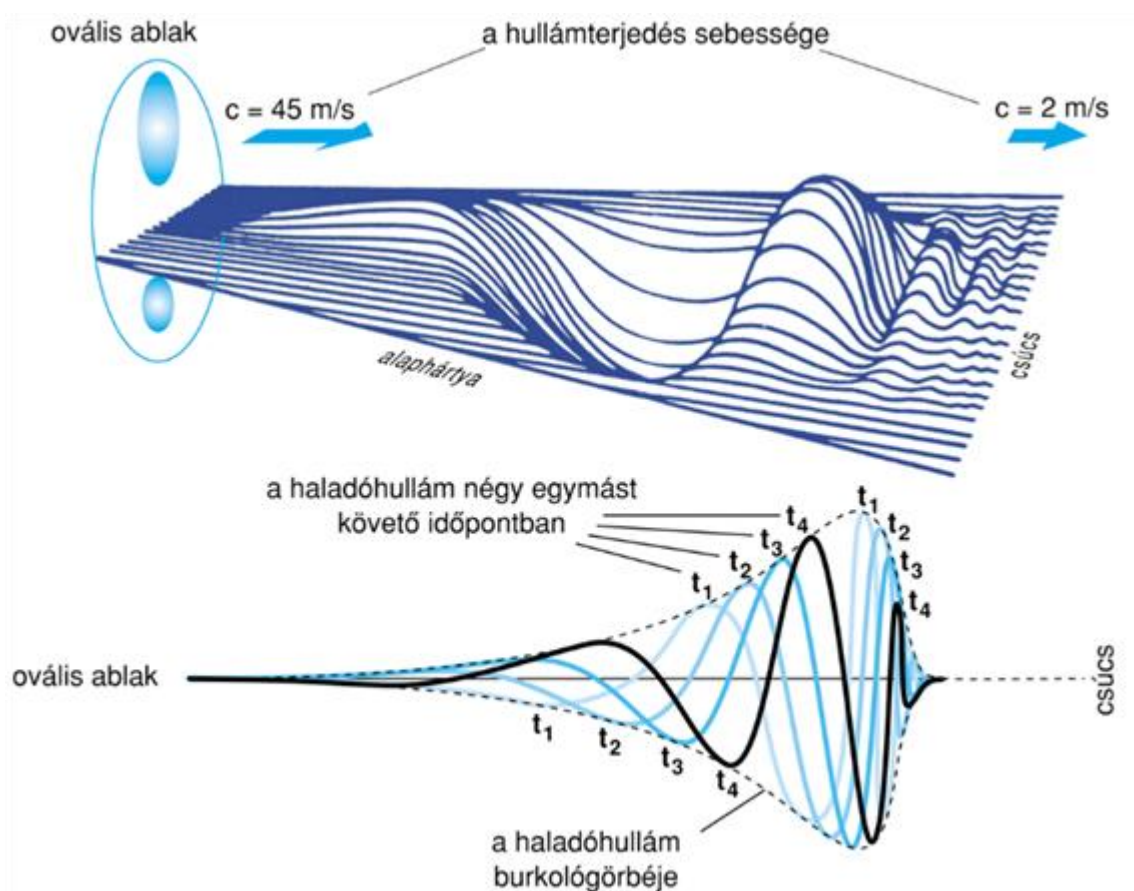


Hermann von **Helmholtz** (1821– 1894) elmélete szerint az alaphártya keresztirányú, különböző hosszúságú húrok ezreiből áll, melyek a megfelelő magasságú hangra **„rezonálva”** állóhullámként rezegnek, mintegy analizálva a beérkező hang frekvenciáit. Ez az elmélet talán könnyen érthető lenne, de sajnos téves.

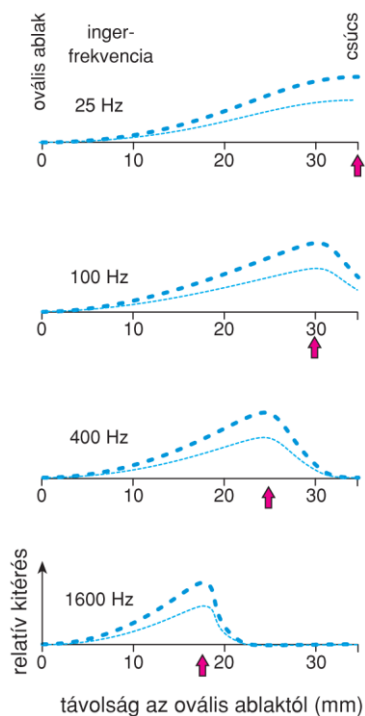


Békésy György (1899–1972), 1961-ben orvosi Nobel-díjat kapott. Mindenre elszánt tudós lehetett, hiszen a kísérleteihez szükséges emberfejeket az aktatáskájában cipelte a bonctani intézetből a laboratóriumig... a 6-os villamoson.

Az alaphártya rezgésamplitúdói mintegy 30-szor nagyobbak, mint a kengyelé. Mégis a kilengések a hallásküszöb hangerejénél még atomi méretűek, és a fájdalomküszöbnél is csak kb. 100 nm méretűek.



IV.29. ábra. Felületi haladóhullámok mozgása az alaphártyán. Figyeljük meg a fokozatos emelkedést és a gyors csillapodást (a méretek eltúlzottak!)



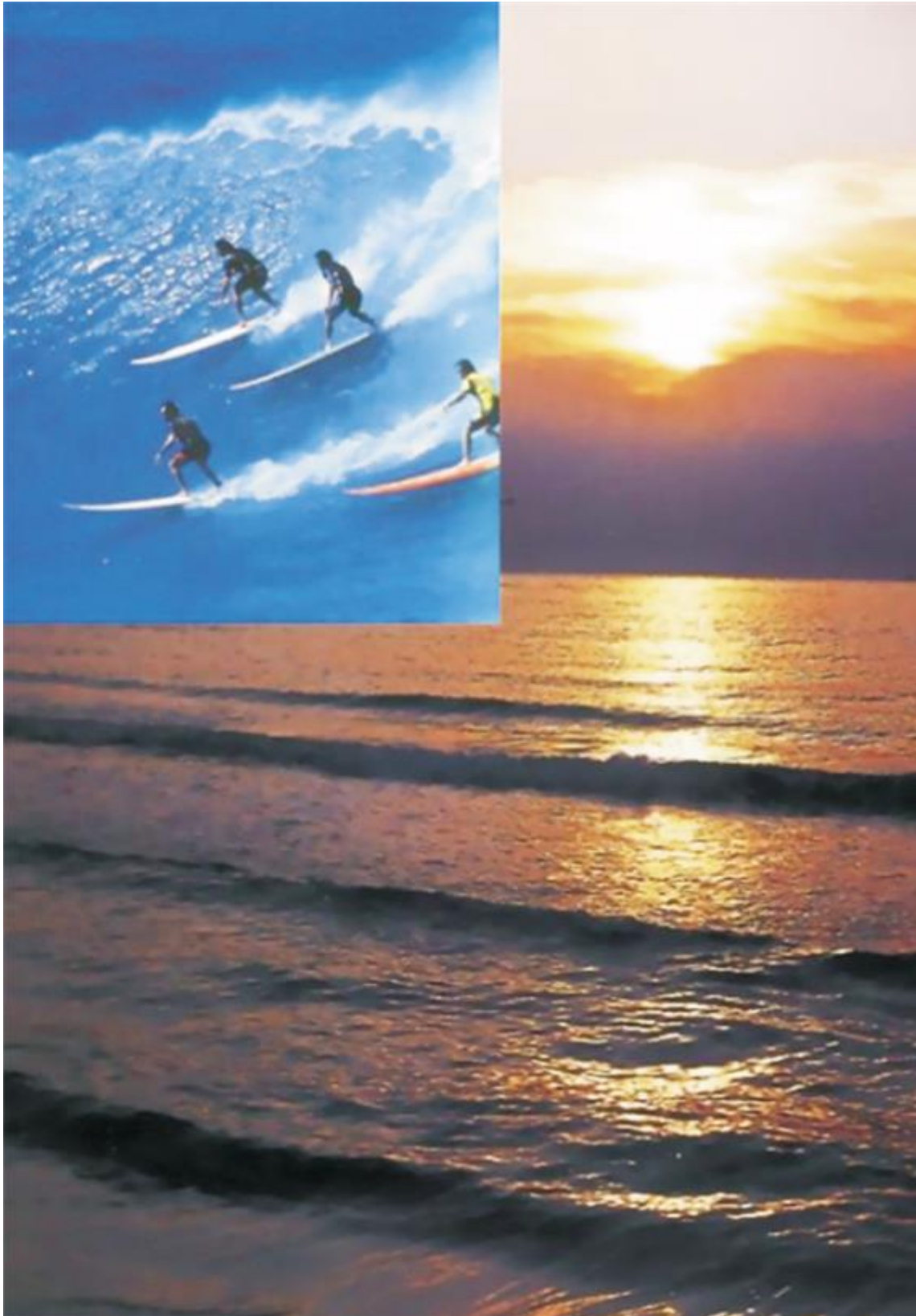
IV.30. ábra. A membrana basilaris kitérésamplitúdói különböző frekvenciájú és amplitúdójú (vastag, ill. vékony vonal) szinuszos ingerhangok esetén

Felületi hullám

A felület és a közeg tulajdonságai által meghatározott terjedési sebességgel és hullámhosszal rendelkező hullám. A felületi hullámok nem rugalmas hullámok, transzverzális és longitudinális részekből állnak. A részecskék mozgása örvénylő, ellipszis- vagy körpályát írnak le.

Haladóhullámok. A membrana basilaris „Békésy” hullámait hiba lenne állóhullámoknak nevezni, hiszen azok ugyanúgy haladnak, mint az óceán „szörfhullámjai” (ábra). Ugyanakkor a fenti hullámok burkológörbéi egy adott hanginger-frekvenciára és -amplitúdóra jellemzőek.

Hasonló jelenség észlelhető az óceán fokozatosan sekélyedő partja közelében, ahol a „szörfhullámok” magassága lassan növekszik a part felé, feltorlódik, majd hirtelen lecsökken. A jelenség oka a hullámterjedési sebesség vízmélységtől függő változása (ui. minél kisebb a víz mélysége, annál kisebb a hullám sebessége).

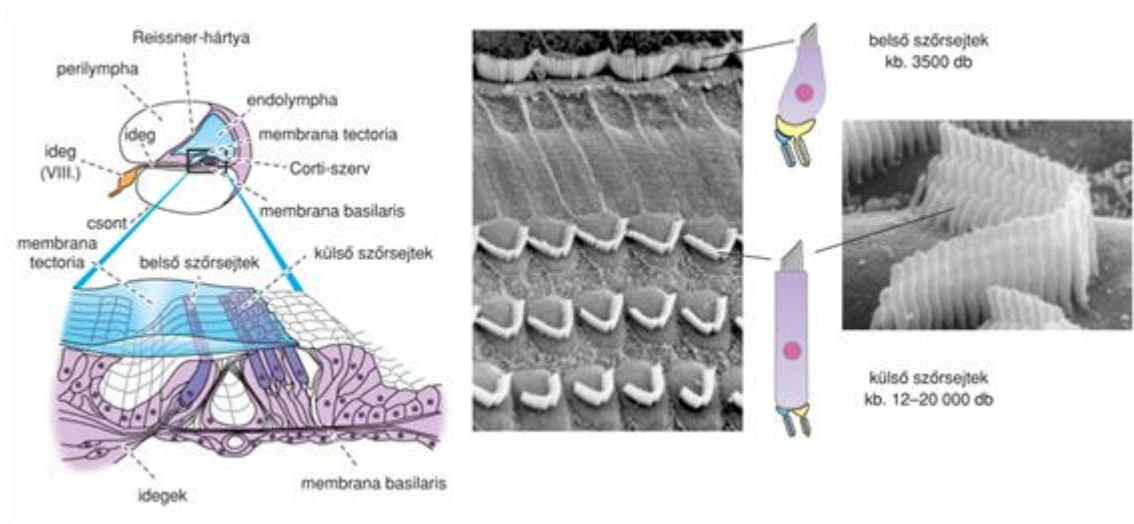


Különböző erősségű szélíngerek hatására létrejött felületi haladóhullámok (Csendes-óceán)

3.2.4. IV.3.2.4. A Corti-szerv anatómiája

A hallás jelátalakítói (**transzducerei**) a **szőrsejtek**, amelyek a **membrana basilarisra** épülő ún. **Corti-szervben** találhatóak (IV.31. ábra). A szőrsejteket elhelyezkedésük szerint **külső és belső szőrsejtekre** osztjuk.

Az emberben kb. 3500 belső és 12–20000 külső szőrsejt található. Nevüket a szőrsejtek felső feléből az **endolymphába** nyúló szörkötegszerű kitüremkedésükről (**stereocilium**) kapták. A V alakú szörkötegek 20–100 fogú, többsoros fésűhöz hasonló elrendezésük és a membrana basilaris egész hosszában periodikus csoportokban ismétlődnek. A stereociliumok vékony, rugalmas rostokkal (**tip link**) egymáshoz kapcsolt pálcikákként képzelhetők el, melyek a tövüknél elvékonyodnak. Erő hatására a szörköteg rugalmasan megdől, miközben a tip linkek megfeszülnek. A külső szőrsejtek stereociliumai a Corti szerv felső részét fedőlemezként takaró ún. **membrana tectoria**val érintkeznek, míg a belső szőrsejtek érintkezés nélkül, az endolympha folyadékában végződnek. Az endolympha K^+ -ban gazdag ionos környezetet biztosít a stereociliumoknak. Az eltérő iontartalmú **perilymphától** való elválasztást a **Reissner-hártya** biztosítja, amely a rezgések tovaterjedését nem befolyásolja. Az **afferens hallóidegek** 95%-a a belső, míg az **efferens idegek** többségének végződése a külső szőrsejtek basalis felszínéhez csatlakoznak (lásd IV.10. megjegyzés).



IV.31. ábra. A Corti-szerv anatómiája. Középen és jobb oldalon pásztázó elektronmikroszkópos (SEM) felvétel

IV.10. megjegyzés

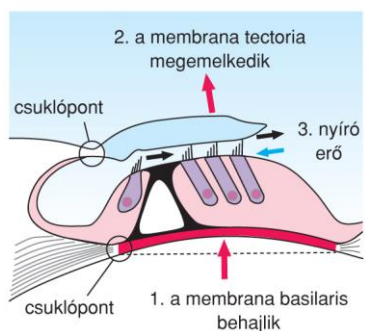
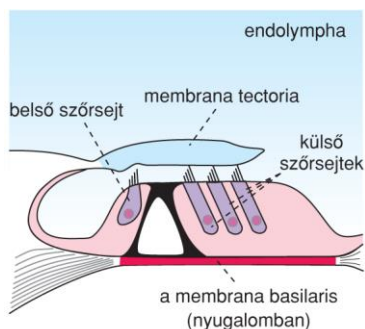
Afferens idegrost: az akciós potenciál a transzducer sejtől az agy felé halad. Az információ terjedése is ilyen irányú.

Efferens idegrost: az akciós potenciál az agyból a célsejt felé terjed (pl. izomsejt, a hallás esetén a transzducer sejt felé).

3.3. IV/3.3. A szőrsejtek szerepe a hallás folyamatában

Amikor a Békésy-féle haladóhullámok meghajlítgatják a membrana basilarist, az arra épülő Corti-szerv szőrsejtjei is elmozdulnak (IV.32. ábra). A membrana tectoria, amely a szőrsejtekre fedőszerűen illeszkedik, a hozzá tartozó csuklópont körül szintén elmozdul. A membrana tectoria a szőrsejtekhez képest elcsúszik, mechanikai **nyíróerőt keltve a szörkötegekben**. A nyíróerő hatására a külső szörkötegek, melyek csúcsai a membrana tectoriához kötöttek, megdőlnek. A belső szőrsejtek stereociliumai csupán az endolympha folyadékában keletkező áramlás hatására hajlanak el.

A hallás folyamatában a **belső szőrsejtek** töltik be a hagyományos értelemben vett **mechanoelektromostranszducer** funkciót. Hanginger hatására a szörkötegek megdőlnek, a szőrsejtek membránjaiban potenciálváltozás generálódik. Depolarizáló jellegű változás esetén a szinapszison keresztül kapcsolódó idegsejt akciós potenciáljának frekvencianövekedése következik be, ami az ingerületi állapotot jelenti.



IV.32. ábra. A szőrkegtek a membrana basilaris behajlása miatt megdőlnek. A szőrsejtek depolarizálódnak

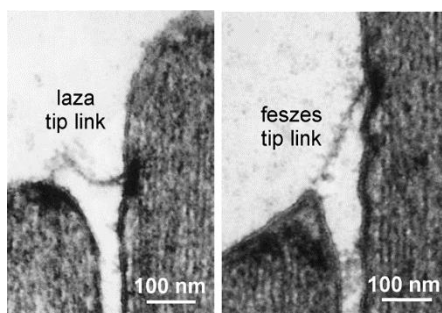
A szőrsejtek membránpotenciál-változása és az ingerületi állapot kiváltása

A szőrsejtek stereociliumait K^+ ionokban gazdag endolympha veszi körül, míg az intracelluláris tér K^+ -koncentrációja alacsony. Hanginger nélkül a membrán nyugalmi potenciálja kb. -60 mV. A membrana basilaris kitérésekor a stereociliumok elhajlanak, ami az összekötő rostok (**tip link**) megfeszüléséhez vezet.

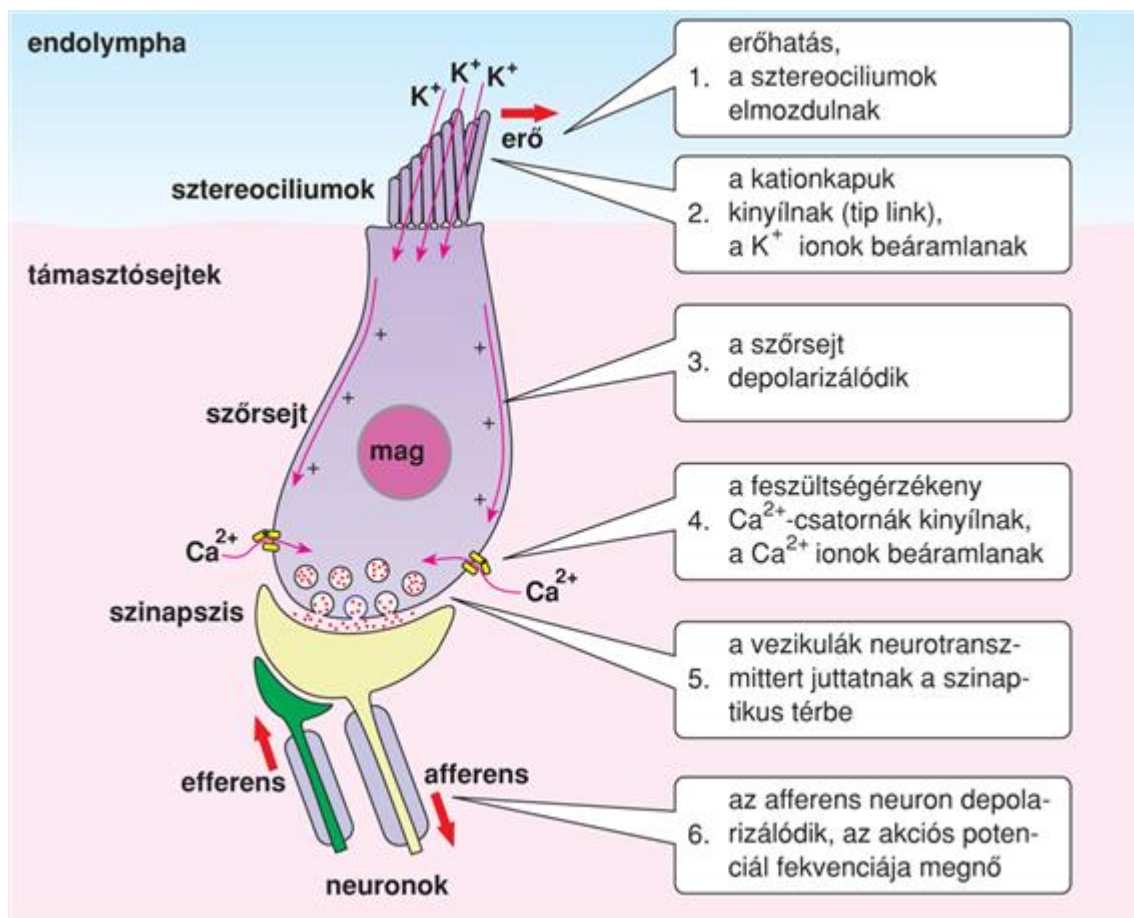
Ekkor a sztereociliumok felső részén található kationcsatornák a megfeszülő rostok húzóerejének hatására konformációváltozást szenvednek el és „kinyílnak”. Az extracelluláris térben lévő K^+ ionok a sejt belsejébe áramlanak és ez depolarizálja a szőrsejt membránpotenciálját. A leghosszabb stereociliumok felé történő dőlés esetén **depolarizáció**, ellenkező irányban pedig **hiperpolarizáció** történik. A depolarizáció esetén alakul ki ingerületi állapot, ugyanis a szőrsejt depolarizációja a szőrsejt alsó felén található feszültségérzékeny Ca^{2+} -csatornák kinyílásához vezet (2. ábra). Az extracelluláris térben a Ca^{2+} ionok nagy koncentrációban vannak jelen. A beáramló Ca^{2+} ionok hatására a neurotranszmittert tartalmazó vezikulák fuzionálnak a preszinaptikus membránnal, a neurotranszmitter az afferens hallóideg szinaptikus részébe ürül, majd depolarizálja a neuront. Ez a nem terjedő depolarizációs potenciál tekinthető a hallás szenzoros **receptorpotenciáljának**. Ez, a hang ütemében váltakozó potenciál tüelektród segítségével elvezethető, és erősítőn keresztül hangszóróra vihető, ezért **mikrofonpotenciálnak** is nevezik.

A receptorpotenciál tüske formájú, gyorsan terjedő **akciós potenciálok** sorozatát generálja az afferens idegvégződésen. Ez a kódolt akusztikus információ többszörös áttételeződés után az agykéreg hallóközpontjába jut.

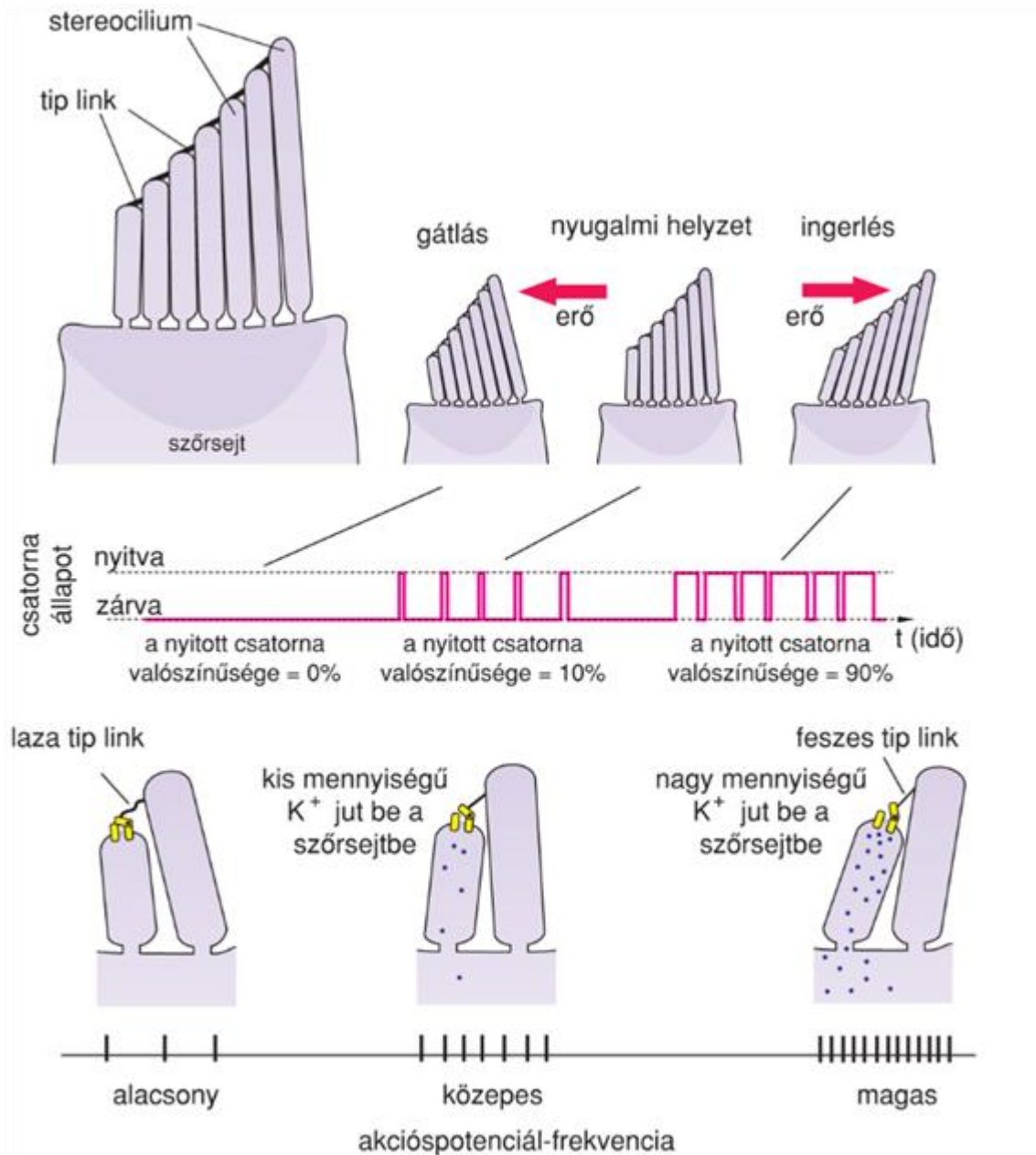
Az akcióspotenciál-frekvencia nyugalmi állapotban sem zérus. A basilaris membrán ellenkező irányú kitérése a rostok ellazulását vonja maga után. Ez természetesen membránpotenciál-növekedést, azaz hiperpolarizációt okoz, így az akciós potenciál frekvenciája csökken (3. ábra).



1. ábra. Szőrsejtek elektronmikroszkópos felvételen



2. ábra. A belső szőrsejt transzducerműködése



3.ábra. A szőrsejtek stereociliumai erő hatására megdőlnek és K⁺ ionokat juttatnak a szőrsejtbe

3.3.1. IV/3.3.1. A külső szőrsejtek mint molekuláris motorok

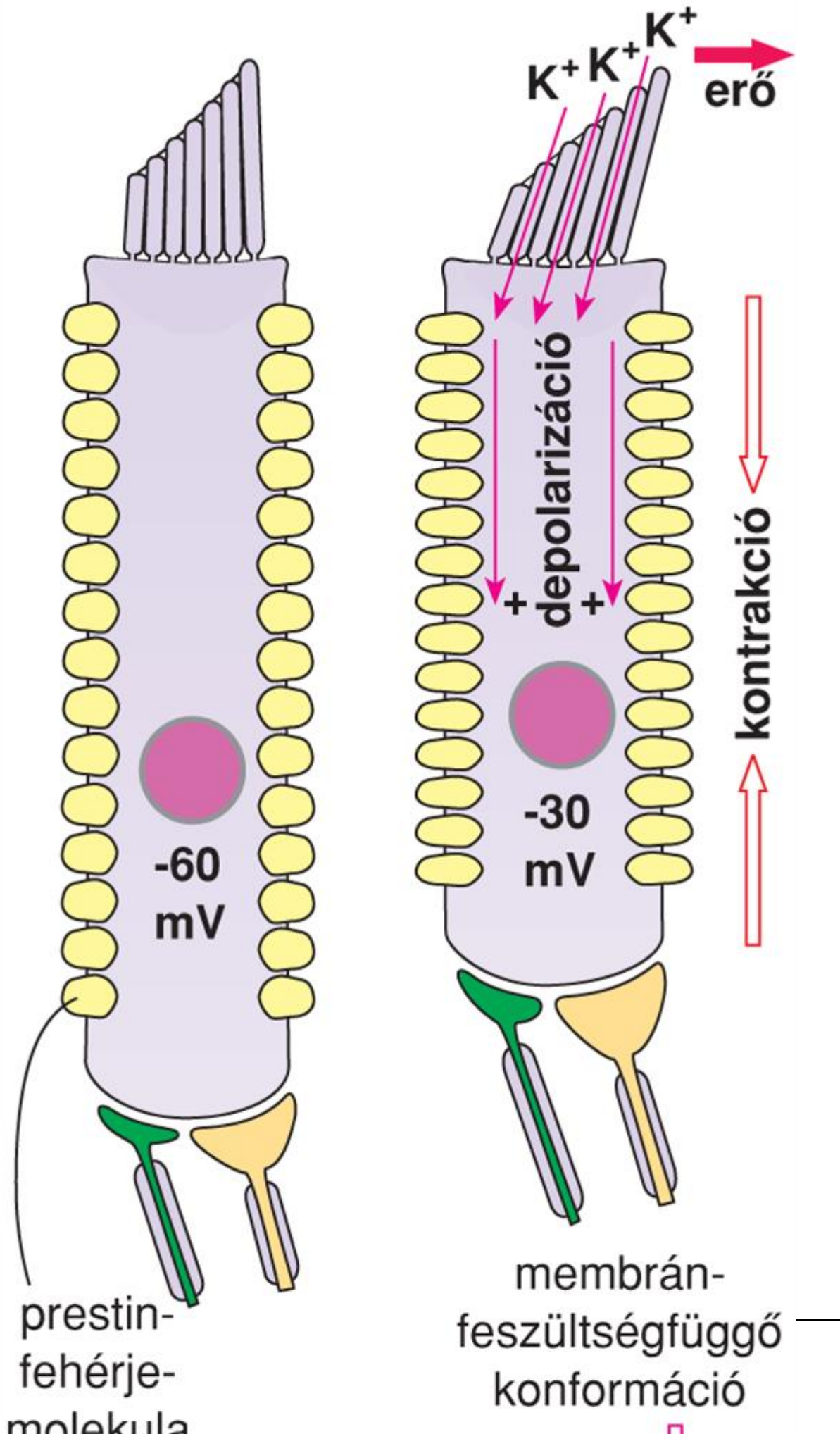
A külső szőrsejtek szerepe a hallás folyamatában a gyenge és közepes intenzitású hangok aktív, biológiai energiát felhasználó **mechanikai felerősítése**.

A külső szőrsejtek érzékelik a membrana basilaris rezgéseit, melynek eredményeként **a szőrsejtek hossza a hang ütemében megváltozik**. Az így előidézett vibráció rendszerint nagyobb amplitúdójú méretváltozást okoz a Corti-szervben, mint a membrana basilaris eredeti kitérése. A külső szőrsejtek „biomotorjai” által keltett rezgés **azonos fázisban adódik hozzá** a membrana basilaris eredeti elmozdulásához, és annak rezgéseit akár több ezerszeresen felerősítheti.

A külső szőrsejtek tehát pozitívan visszacsatolt erősítőként működnek (a fülünk nemcsak „mikrofon”, hanem „hangszóró” is!). **A külső szőrsejtek mechanoelektromos és egyben elektromechanikus jelátalakítók is.**

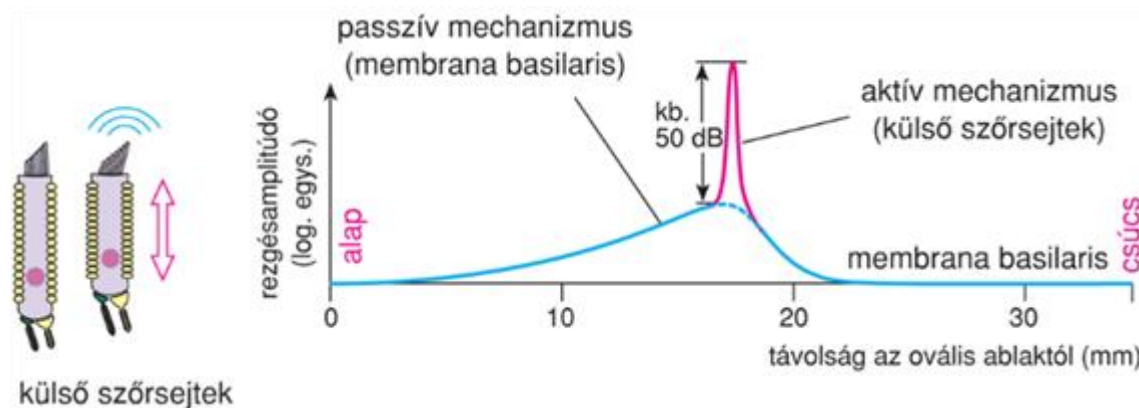
A külső szőrsejtek által felerősített rezgéseket az endolympa közvetítésével a belső szőrsejtek érzékelik, és az afferens idegek továbbítják az információt az agy felé.

A külső szőrsejtek membránjában nagyszámú integrális fehérje, **prestín** található. A prestínmolekula a membránfeszültség megváltozásának hatására igen gyorsan (néhány μs) képes **konformáció-**, és ennek következtében **keresztmetszet-változásra** (IV.33. ábra). A nagyszámú prestínmolekula összkesztmetszetének csökkenése ill. növekedése a szőrsejt palástfelszínét csökkenti, ill. növeli. Az eredmény, a hosszúság **külső szőrsejthangrezgésütemében történő hosszanti méretváltozása**. Az így keletkezett megnyúlás, ill. rövidülés olyan értelmű, hogy az a membrana basilaris eredeti rezgéseit erősíti (**pozitív visszacsatolás**).



IV.33. ábra. A külső szőrsejt depolarizációs feszültségtől függő kontrakciója (az arányok eltúlzottak!)

A **membrana basilaris Békésy-féle haladóhullámai passzív módon** (külső energia felhasználása nélkül) járulnak hozzá a hangfrekvenciák előszelektálásához. A rezgések a **cochlea folyadékaiban** azonban csillapodnak, az energiájuk **disszipálódik**, azaz hővé alakul. Az elméleti számítások szerint emiatt csak a hallásküszöbnél sokkal intenzívebb hangok lennének érzékelhetők. **Az aktív erősítés jelenléte azonban kompenzálja a csillapodás miatti energiavesztéséget** (ui. a pozitív visszacsatolás éppen annyi energiát juttat vissza, mint a disszipáció okozta veszteség). A membrana basilaris rezgése a burkológörbe maximumánál rezonáns módon felerősödik, élessé válik (IV.34. ábra). Összetett hangok esetén kifinomult szabályozórendszer állítja be pillanatról pillanatra a „szőrsejt-biomotorok” ezereinél **az erősítését olyan kritikus nagyságúra, hogy a nemkívánatos oszcilláció még éppen ne következzen be** (regeneratív erősítő, tí. a veszteségeket éppen pótoló). Ha a szőrsejtek valóban oszcillálnának, az fülcsegsében nyilvánulna meg.



IV.34. ábra. A külső szőrsejt aktív hangerősítő mechanizmusának frekvenciaszelektív erősítő szerepe van

Egy bizonyos frekvenciájú ingerhang a membrana basilaris igen szűk területére képeződik le, így a frekvencia hely szerinti kódolása az aktív erősítés következtében igen pontosá válik.

A külső szőrsejtek aktív, biomechanikus motorként, pozitív visszacsatolású erősítőként

- igen **éles frekvenciaszelektálást** (nagy frekvenciamegkülönböztető képesség), és
- nagy érzékenységet**, valamint
- kompresszív dinamikai viselkedést** (lásd később) tesznek lehetővé.

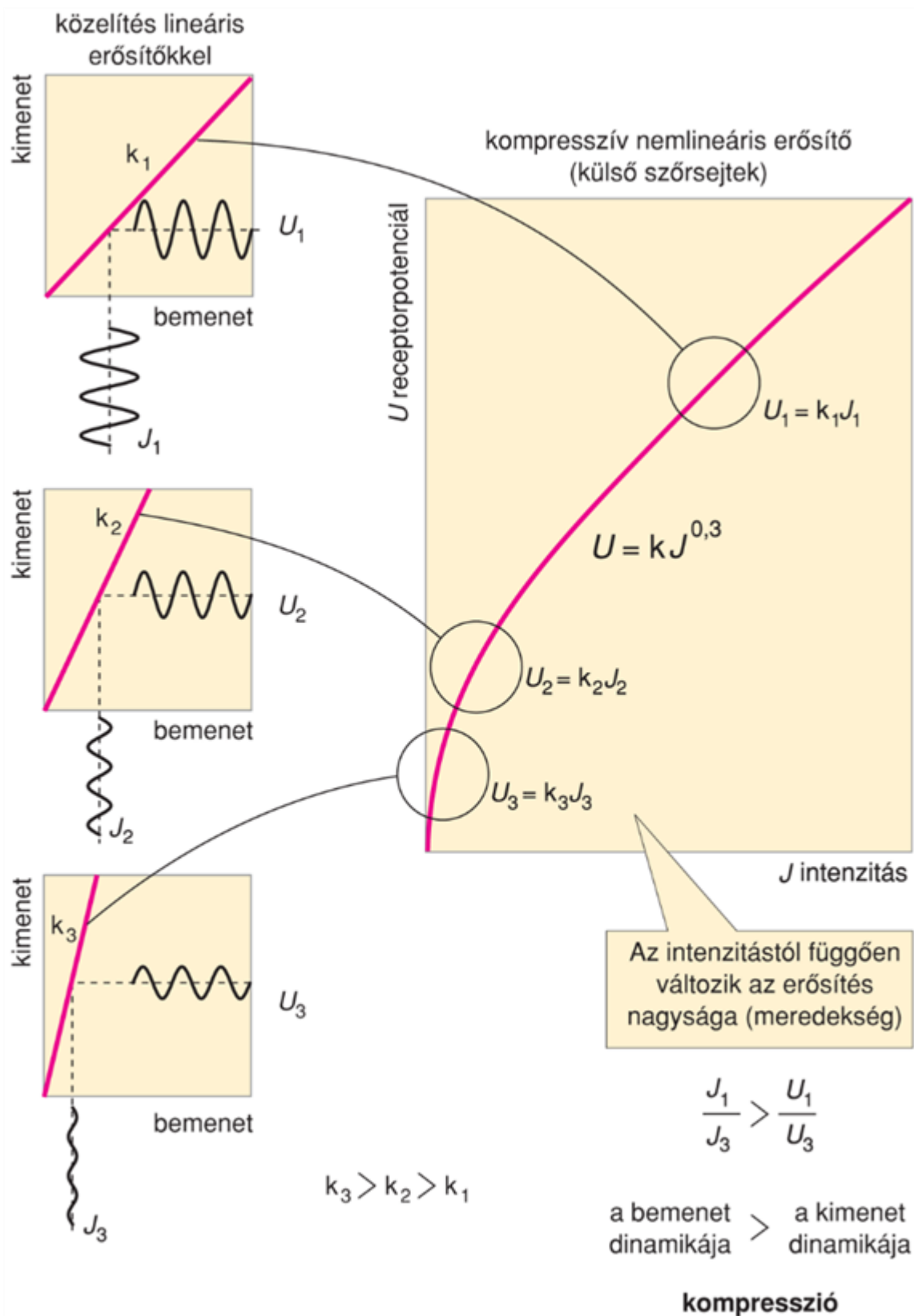
Az **elektromechanikus erősítés** nagymértékben **nemlineáris**, a gyengébb hangoknál az erősítés nagyobb, közepes erősségűeknél kisebb, erős hangoknál pedig csaknem megszűnik. Az erősítés átviteli függvénye a fentiek következtében erősen **kompresszív** hatású, a hanginger nagy intenzitásváltozásait (130 dB) a receptorpotenciál kis változásáivá (kb. -20 mV-tól -60 mV-ig) konvertálja.

A biomotoros rezgetés nem közvetlenül használ biológiai energiát (ATP), hanem a mindenkori membránpotenciál mint elektromos tápellátás fedezi a mozgató energiáját.

Mint már említettük, a szőrsejtek aktív erősítése nagymértékben nemlineáris tulajdonságokat mutat. Lineáris erősítőnél az erősítési tényező (k) a jel nagyságától függetlenül állandó. Ezt egy adott meredekségű egyenes képviseli a IV.35. ábra kimenet-bemenet függvényeiben.

A nemlineáris, kompresszív erősítést kis jelnél nagy, növekvő jelnél egyre csökkenő erősítés jellemzi. Az aktív erősítés függvénye hallás esetén hatványfüggvény jellegű.

Az észlelhető hangingerek dinamikatarományja igen nagy, mintegy 130 dB nagyságrendű. A hallóidegen végigfutó akciós potenciál természetesen nem tud ilyen nagy frekvenciaarányt produkálni. Az aktív erősítés mintegy 50 dB-lel csökkenti az akcióspotenciál-frekvencia dinamikatarományát (lásd IV.35. ábra). A további kompressziót a különféle adaptációs mechanizmusok és kódolási folyamatok biztosítják.



IV.35. ábra. A dinamikakompreszió nemlineárisá teszi a receptorpotenciál intenzitásfüggését

IV.11. megjegyzés. A mérések szerint a szőrsejtek összehúzódásakor keletkező erő kb. 100 pN (pikonewton) millivoltonként.

IV.12. megjegyzés. Békésy már nem élő állatok és emberek belső fülét vizsgálta, ekkor azonban az aktív erősítő természetesen „ki volt kapcsolva”, ezért nem észlelhetett megfelelő frekvenciaszelektivitást.

A rádiózás történetének hajnalán egy rendkívül egyszerű, mindössze egy elektroncsövet és egy pozitívan visszacsatolt rezgőkört alkalmazva a távoli rádióadók vételénél meglepően nagy érzékenységet és frekvenciaszelektivitást értek el (AUDION mint **regeneratív** vevőerősítő). A készüléknél a pozitív visszacsatolást addig kellett egy ún. „kritikus értékig” növelni, amíg az majdnem elkezdett oscillálni. Ekkor az erősítés (érzékenység) igen nagyra nőtt egy igen keskeny frekvenciasávban.

A belső fül szőrsejtjei ilyen „regeneratív erősítők” ezreinek tekinthetők, ahol a pozitív visszacsatolás mértékét maga a beérkező hang intenzitása állítja be a „kritikus értékre”. A szabályozómechanizmus pontos biokémiai, biofizikai működése még nem pontosan ismert.

Definíció:

Dinamikatartománynak nevezzük valamilyen jel legnagyobb és legkisebb amplitúdójának hányadosát. Hallás esetén ez a fájdalomküszöb és a hallásküszöb hányadosa:

$$\frac{J_{\max}}{J_{\min}} = 10^{13} \Rightarrow 130 \text{ dB}$$

Kompresszív erősítésnek nevezzük, amikor a kimenőjel dinamikatartománya kisebb, mint a bemenőjelé. Hallás esetén az akciós potenciál maximális és minimális frekvenciáinak aránya jelentősen kisebb a hanginger maximális és minimális intenzitásainak arányánál.

Definíció:

Passzív erősítés: pl. az emelő megnövelheti az erőt, de az energia a kisebb elmozdulás miatt nem növekszik. A középfül hallócsontocskái passzív erősítőt alkotnak. A passzív erősítés nem használ fel külső energiát.

Aktív erősítés: nemcsak a rezgésamplitúdó, hanem a rezgés intenzitása (teljesítmény/felület) is növekszik. A többletenergiát rendszerint valamilyen energiaforrás biztosítja. (pl. elektromos erősítő esetén a hálózati tápegység vagy akkumulátor; a külső szőrsejtek esetén pl. a biológiai energia (ATP) felhasználásával keletkezett membránpotenciál.)

3.3.2. IV/3.3.2. Adaptációs mechanizmusok

Azonos időben képtelenek vagyunk a hallásküszöbtől a fájdalomküszöbig terjedő hangintenzitásokat egyszerre észlelni. **A fül különböző adaptációs folyamatokkal alkalmazkodik az ún. háttér-, vagy átlagos intenzitáshoz.** A középfül hallócsontocskáinak reflexszerű elmozdulása az egyik ilyen mechanizmus. Azonban a szőrsejtek szintjén is megfigyelhető az adaptáció jelensége:

- Az afferens idegrostokon keresztül az agyba juttatott akciós potenciálok révén a hallóközpont tudomást szerez az észlelt hang intenzitásáról. A hang háttérintenzitásától függően az efferens idegrostokon keresztül gátló jellegű információ érkezik a szőrsejthez, ami az eredetileg kialakult receptorpotenciál nagyságát bizonyos időkéstelletés (néhány ms) után gyengíti.

- A legújabb kutatások szerint a szőrsejtek stereociliumai is rendelkeznek adaptációs mechanizmussal. A stereociliumok belsejében található actin- és myosinrostok olyan értelemben módosítják egyes kationcsatornák membránban elfoglalt helyzetét, hogy az a tip linkek újbóli ellazulásához vezet.

Az adaptáció teszi lehetővé, hogy a fül a hangingerek csupán egy szűk dinamikatartományát konvertálja akcióspotenciál-változásokká.

3.4. IV/3.4. Az akusztikus információ kódolása

3.4.1. IV/3.4.1. Hely teória

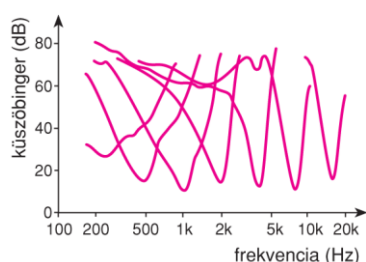
A **hely teória** Békésy-féle változata önmagában nem magyarázza meg a fül frekvenciamegkülönböztető képességét (pl. 1000 Hz-nél 3 Hz). Az aktív erősítés jelenléte azonban tovább élesíti a cochlea frekvenciaanalízáló képességét. A fenti mechanizmusokhoz kiegészítésként a belső szőrsejtek afferens

idegrostjainak különböző frekvenciaérzékenysége járul (IV.36. ábra). Az éles rezonanciagörbék az egyes szőrsejtekhez kapcsolódó idegek eltérő küszöbérzékenységeiből következnek. A legalacsonyabb küszöbingerhez tartozó frekvenciát az ideg **karakterisztikus frekvenciájának** nevezzük.

Az ingerfrekvenciák **hely szerinti leképezését** tehát az alábbi mechanizmusok hozzák létre a cochleában:

- A membrana basilarisban gerjesztett **haladóhullámok amplitúdómaximumainak helye** a membrana basilaris mentén gyenge frekvenciafüggést mutat.
- A külső szőrsejtekben létrejövő **aktív erősítés** mechanizmusa felerősíti és **kiélesíti a membrana basilaris rezonanciáit**.
- A belső szőrsejtekhez kapcsolódó afferens idegek specifikus frekvencia-érzékenysége (**idegi élesítés**) tovább növeli a frekvenciamegkülönböztető képességet.

Mivel mindegyik belső szőrsejt rendelkezik afferens idegvégződéssel, az agyi hallóközpont adott részeire az idegi összeköttetések révén a különböző frekvenciájú hangingerek eltérő helyeken képeződnek le. A frekvencia érzékelése tehát **„hely szerint” (lokálisan) kódolt**.



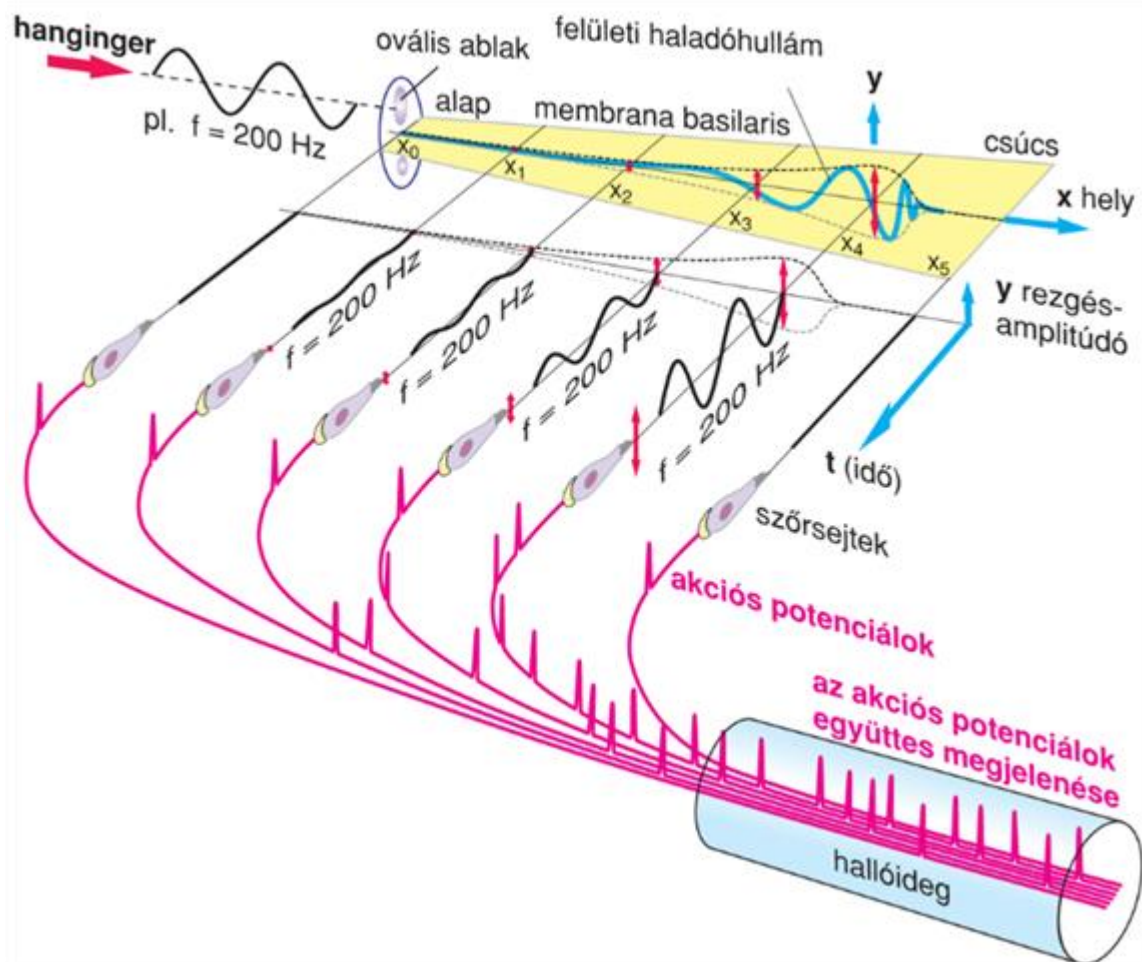
IV.36. ábra. Az idegi élesítés folyamata. Az egyes idegcsoportok az ún. karakterisztikus frekvenciákon különösen érzékenyek

3.4.2. IV/3.4.2. A röplabdaelmélet

A hang intenzitása, a receptorpotenciálon keresztül, az idegsejtek akcióspotenciál-frekvenciáját befolyásolja, de az idegrost refrakter periódusa megakadályozza az 1 ms-nál sűrűbb tüskék kialakulását. A membrana basilaris haladóhullámjai azonban több, szomszédos idegrostban hoznak létre eltérő sűrűségű akciós potenciálokat. Ezek összességében sokkal nagyobb „együttes” akciós- potenciál-frekvenciát kódolhatnak, mint az egyes idegrostok (IV.37. ábra).

Az észlelendő hangok intenzitása, frekvenciája, azaz a hangkép pillanatról pillanatra változhat. Az akciós potenciálok együttes frekvenciájának változása tudja csak követni (persze egy bizonyos időkésleltetéssel) a fizikai hang rezgésállapotát.

IV.13. megjegyzés. A röplabdajátékosok felváltva érintkeznek a labdával, mielőtt az leütésre kerül. A **röplabdaelmélet** elnevezésben az egyes játékosok érintése felel meg egyetlen akciós potenciálnak, de az együttes érintések nagyobb (több akciós potenciál) száma teszi lehetővé a labda leütését.



IV.37. ábra. Az akciós potenciálok együttes megjelenése az idegrostokban az egyedinél nagyobb akcióspotenciál-frekvenciát kódolhat

3.5. IV/3.5. Pszichoakusztika, hangosság

Az általános tapasztalat szerint a nagyobb intenzitású hangok hangosabban szólnak. Az előzőekben ismertetett **intenzitástól** (objektív, fizikai intenzitás) megkülönböztetendő a **hangosság** (szubjektív, pszichofizikai intenzitás). Az előbbi az **inger**, az utóbbi az **érzet** erősségét jellemzi.

A hangosság egyrészt a fizikai intenzitástól, másrészt a hang frekvenciájától függ, mint ahogy azt a IV.24. ábrából sejteni lehet. Azonos intenzitásváltozásokhoz azonban nem azonos hangérzetváltozások járulnak, hiszen a fül csak így képes az említett 13 nagyságrendet átfogó fizikai ingerek felfogására. Sokáig azt gondolták, a fül logaritmikus választ ad az intenzitás változására (Weber–Fechner-törvény). A szubjektív hangérzet erősségének (**hangosság**) intenzitásfüggése azonban pontos mérések alapján **hatványfüggvény** jellegűnek adódott (1933, **sonskála**).

3.5.1. IV/3.5.1. A phonskála

A külső és a középfül rezonanciái még a mechanikus rezgések szintjén megmagyarázzák hallásunk erős frekvenciafüggését. Hogy milyen összefüggés van az érzékelt hangosság, a fizikai intenzitás és a frekvencia között, erre adnak választ az **egyenlő hangosság szintek görbéi** (IV.38. ábra). A görbék azonos hangosságpontokat kötnek össze (izophon görbék). A görbesereget Fletcher és Munson (1927) mérték ki először, nagyszámú, fiatal, normális hallású személynél (kétfüles mérés), ideális szabadtéri körülményeket modellező „süketszobában”.

A mérésben két hanggenerátort felváltva alkalmaztak. Az elsővel először egy adott intenzitásszintű (dB) 1000 Hz-es hangot sugároztak. Ennek az ún. etalon hangnak a hangosságával kellett összevetni a másik generátor eltérő frekvenciájú hangosságát. A kísérleti személy addig változtatta a második generátor intenzitását, amíg azt

azonos hangosságúnak ítélte az etalon hanggal. Minél mélyebb volt a hang, annál nagyobb intenzitás adódott. Az így kapott pontokat összekötve kapták az egyenlő hangosságú szintek görbáját.

Az etalon hang még éppen észlelhető hangosságánál (ez az 1000 Hz-es hallásküszöb) az intenzitás $J_0=10^{-12}$ W/m²-nek adódott. Ezt praktikusán **referenciaintenzitásnak** nevezték. Így a J intenzitású hang **intenzitásszintje** (n):

$$n = 10 \cdot \lg \left(\frac{J}{J_0} \right). \quad (\text{IV.28})$$

A különböző frekvenciákhoz tartozó hallásküszöbpontokat összekötő görbét definíciószerűen **0 phon hangosságú szintűnek** nevezzük. Ez a görbesereg legalsó görbéje. Az etalon hang intenzitásszintjét 10, 20, 30 stb. dB-re emelve rendre kimérték a 10, 20, 30, stb. phonos egyenlő hangosságú szintű görbéket. **A hangosságú szint (H_{phon}) mértékét tehát az etalon hang intenzitásszintjével fejezzük ki.**

$$H_{\text{phon}} = n_{1000 \text{ Hz}} \quad (\text{IV.29})$$

Tehát egy adott hang ún. **hangosságú szintje** (H_{phon}) azonos az etalon hang dB-ben kifejezett intenzitásszintjével ($n_{1000 \text{ Hz}}$). **Egy hang annyi „phonos”, ahány „decibeles” az az 1000 Hz-es hang, amit vele azonos hangosságúnak hallunk.**

Az egyenlő hangosságú szintek alsó határát a **hallásküszöb (0 phon)**, felső határát pedig a **fájdalomküszöb (130 phon)** alkotja. A hangosságú szint mértékegysége a **phon**.

Megállapították, hogy kb. **10 phon hangosságú szint-növekedés felel meg kétszer olyan hangos hangérzetnek**, 20 phon négyszeresnek, 30 phon pedig nyolcszorosnak és így tovább. A „weber–fechneri phonskála” mérőszámai nem lineárisan fejezik ki hangosságérzetünk változásait. Kétszer, háromszor olyan hangosnak érzékelt hang hangosságú szintjének is kétszeresnek, ill. háromszorosnak kellene lennie.

IV.14. megjegyzés. A legújabb mérések szerint az átlagos hallásküszöb az utóbbi 60 év alatt mintegy 4 dB-t romlott! Így a jelenleg érvényes hallásküszöb-görbe nem 0, hanem **4 phonnál** helyezkedik el.

IV.15. megjegyzés. A hangosságú szint **phon** értékei az alábbi képlet segítségével **son** értékekké transzformálhatók:

$$H_{\text{son}} = 2^{(0,1 \cdot H_{\text{phon}} - 4)}.$$

Az átalakítás csak 40 phon = 1 son felett érvényes!

3.5.2. IV/3.5.2. A sonskála

Az egyenlő hangosságú szintű görbék változatlanul hagyásával a különböző görbékhez új, a pszichofizikai, lineáris hangérzetváltozást kifejező ún. **son** értékeket rendeltek Fletcher és Munson (1933). A hangosságú alappontja az új skálánál definíciószerűen az **etalon hang 40 dB-es intenzitásszintje**, azaz **1 son**.

$$1 \text{ son} = 40 \text{ phon.}$$

(IV.30)

A kétszer ilyen hangos hang (50 phon) hangossága 2 son, a négyszer hangosabbé (60 phon), 4 son, a nyolcszor hangosabbé (70 phon) pedig 8 son és így tovább (IV.38. ábra). A további értékek az alábbi **hatványfüggvényből** (Stevens-törvény, 1936) számíthatók:

$$H_{\text{son}} = 1/16 (J/J_0)^{0,3}. \quad (\text{IV.31})$$

A mért adatok 1 son alatt már eltérnek a Stevens-törvénytől, ami azt jelenti, hogy fülünk az egészen halk hangok azonos intenzitású változásait erősebb hangosságú változásoknak hallja.

A hangosság szint és a hangosság különböző értékeit a IV.6. táblázat érzékeltetheti.

Az intenzitás és a hangosság közötti összefüggés jól illeszkedik a **Stevens- féle hatványkitevős általános pszichofizikai törvényhez**.

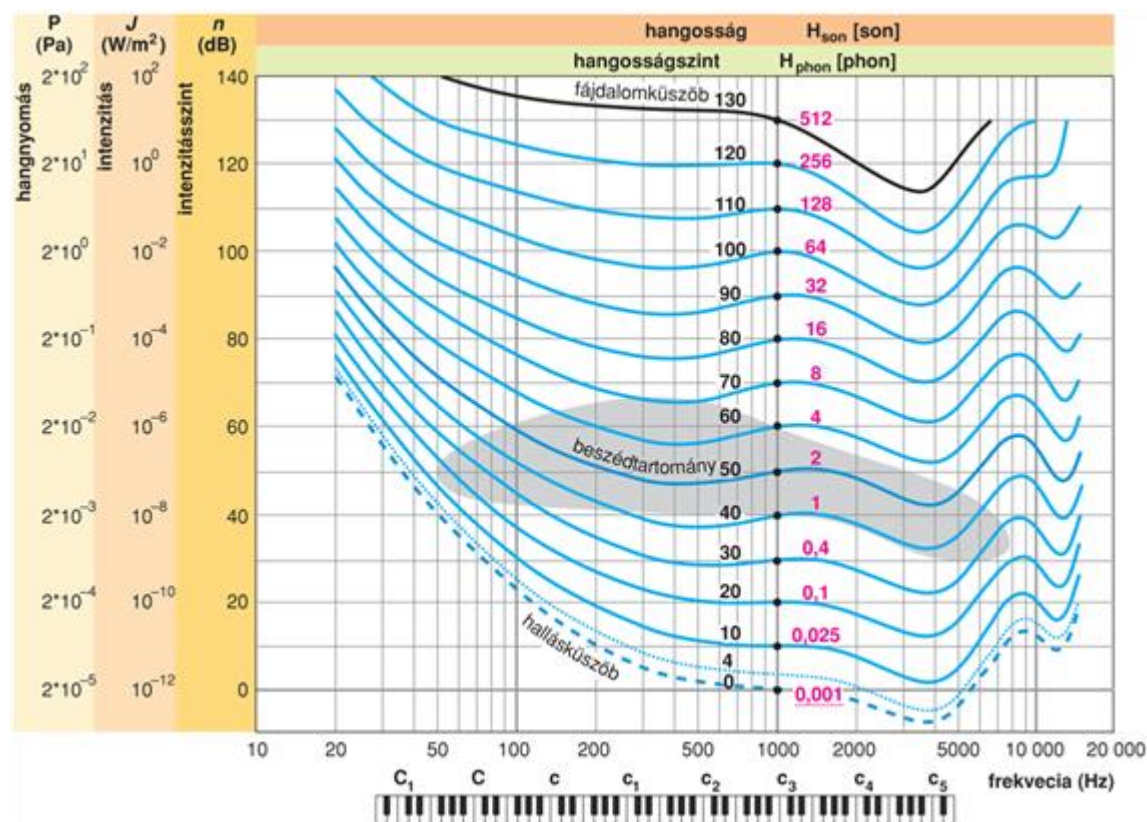
A IV.39. ábra. mérési pontjait nagyszámú kísérleti alany hangosságbecslései alapján ábrázolták a hangosság-intenzitás összefüggését. A pontokra 9 nagyságrenden keresztül pontosan illeszkedik a Stevens-törvény (log-log koordinátarendszerben ui. a hatványfüggvény egyenest ad). Idegfiziológiai (hallóideg-akcióspotenciál) mérésekkel is igazolták a fenti becslült értékek érvényességét. A logaritmikus Weber–Fechner-törvénynek megfelelő „phonskála” azonban láthatóan nem illeszkedik a mérési pontokra! Mindazonáltal a „phonskála” mint mesterségesen konstruált hangosság szint a dB-skálához hasonlóan jól használható, de nem mint a hangosság érzetének kifejezője.

A hangosság felismeréséhez a hallószervnek **időre** van szüksége. A hangosság szint teljes felismerése kb. 0,2 s-nál következik be. A hallássérülteknek ennél több időre van szükségük, ezért a hallásvizsgálatokban legalább 1 s időtartamú hangingereteket alkalmaznak.

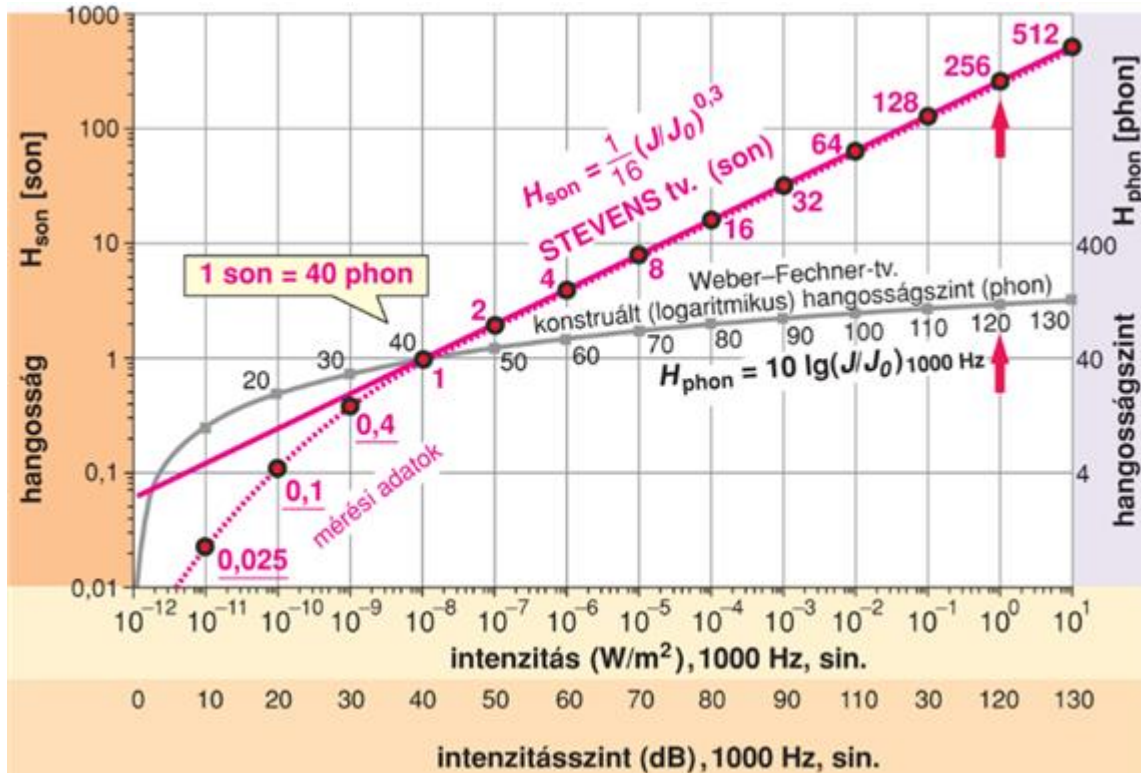
Az intenzitás és a hangosság közötti összefüggés jól illeszkedik a **Stevens- féle hatványkitevős általános pszichofizikai törvényhez**, amely az inger-érzet közötti összefüggést minden érzékszervre kiterjedően írja le (lásd: IV.8):

$$S = \text{konst} (J/J_0)^n, \quad (\text{IV.32})$$

ahol S az érzeterősség, míg n az egyes érzékszerveknek megfelelő hatványkitevő.



IV.38. ábra. Szinuszos hangokkal felvett egyenlő hangosság szintű görbék (nemzetközi szabvány). A jelenleg érvényes hallásküszöb 4 phonnal van. Minden görbe kétszer hangosabb az alatta lévőnél (1 sontól felfelé)

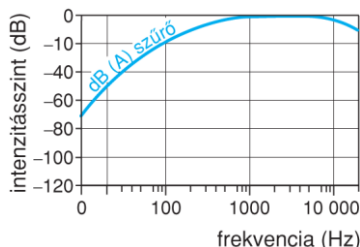


IV.39. ábra. A Stevens-törvény a halk hangok kivételével jól illeszkedik a hangosság mért adataira (piros pontok), míg a Weber–Fechner-törvény phonértékei az intenzitásszint mérőszámaival egyeznek meg (1000 Hz-en). A piros nyílak pl. 1 W/m² intenzitásnál ábrázolják a 120 phon hangosságszintet és az ennek megfelelő 256 son hangosságot

3.5.3. IV/3.5.3. A zajszint és mérése

A zaj, amely szinte minden emberi tevékenység velejárója, kellemetlen hallási, pszichológiai vagy szervezeti megterhelést okoz. A zajszint mérése napjainkban fontos munka-egészségügyi követelmény.

A **hangszintmérő** munkahelyek, lakóhelyek hangszennyezését mérő kéziműszer, amely mikrofont, korrekciós erősítőt és intenzitásszint-kijelzőt tartalmaz. A hangszintmérő beépített mikrofonjával közvetlenül a hangnyomást érzékeli. A beépített elektronika az effektív hangnyomással arányos jelet a fizikai intenzitásszinttel arányos jellé konvertálja (p_{eff}^2). A phonhangosságnak megfelelő jelet (végül is ezt akarjuk megmérni) a IV.40. ábrán látható „fülszűrő” közbeiktatásával kapjuk meg. Ez a mély és a magas hangokat oly módon gyengíti, hogy végül a fülünkhöz hasonlóvá teszi a műszer spektrális érzékenységét. Az eredmény ún. **dB(A)-skálán** jelenik meg. A szűrő karakterisztikája hozzávetőlegesen a 40 phonos egyenlő hangosságú görbe inverze, így az ettől eltérő hangosságszintű zajok mérése kissé pontatlan eredményt ad (a görbék ui. nem azonos görbületűek, lásd IV.38. ábra.). Ezért használják a dB(A) zaj-hangosságszintegységet a phon helyett. Korszerűbb zajszintmérők a mért zaj spektrumát is kijelzik.



IV.40. ábra. A hangszintmérőbe épített fülszűrő karakterisztikája a 40 phonos hangosságszint-görbe inverze

4.6. táblázat - IV.6. táblázat. Különböző forrásból származó hangok hangosságszintje és hangossága

HANGFORRÁS	Hétköznapi, zenei hangosságfogalmak, ill. a halláskárosodás határai	HANGOSSÁGSZINT [phon]	HANGOSSÁG [son]
rakéta, puskalövés (a fül mellett)	dobhártyarepedés	180	
sugárhajtású repülőgép (közelről)	fájdalomküszöb	130	512
diszkó (a hangfalnál), ordítás a fülbe (20 cm)	éppen elviselhető	120	256
légkalapács	nagyon hangos	110	128
nagyon zajos üzem	nagyon hangos	100	64
kiabálás (1,5 m), áthaladó metrószerelvény	<i>fff</i> (<i>fortississimo</i>), 2 órán túl halláskárosodás	90	32
erős városi forgalom, hangos zene	<i>ff</i> (<i>fortissimo</i>), 8 órán túli halláskárosodás	80	16
autó belső terének zaja (120 km/óránál)	hangos, <i>f</i> (<i>forte</i>)	70	8
hangos beszélgetés, WC-lehúzás, porszívó	<i>mf</i> (<i>mezzoforte</i>)	60	4
iroda, számítógép, nyomtató zaja	<i>mp</i> (<i>mezzopiano</i>)	50	2
normális beszélgetés	beszédhangerő, <i>p</i> (<i>piano</i>)	40	1
suttogás, könyvtár, óraketyegés	nagyon halk <i>pp</i> (<i>pianissimo</i>)	30	0,4
szívhangok, rádióstúdió alapzaja	nagyon halk, <i>ppp</i> (<i>pianississimo</i>)	20	0,1
avar zizegése, macska dorombolása	éppen hallható	10	0,025
süketszoba	hallásküszöb (ember, fiatal)	0	0,001

5. fejezet - V. rész – Biomechanika

A biomechanika az élő szervezetek mozgásainak mérnöki szemmel való tanulmányozása. Ennek során a fizika törvényei alapján jellemezzük az élő rendszer statikai és dinamikai tulajdonságait, tehát azt, hogy a biológiai objektum miként felel meg a stabil szerkezet felépítésére és annak dinamikus mozgására vonatkozó kettős követelménynek. Az aktív, irányított mozgás alapvető életjelenség, a biológiai rendszerektől elválaszthatatlan tulajdonság, mely egyszerre igényli a statikailag stabil, mozgatható szerkezeteket, és az azok mozgását végrehajtó „motorokat”. A biológiai mozgás általános meghatározása nehéz, mert a biológiai szerveződés minden szintjén – a molekuláktól a szervezeten át a populációkig – sajátos megnyilvánulása és mechanizmusú mozgásformák fordulnak elő. Irányított mozgásra már a biológiai makromolekulák is képesek; az organellek működése során sajátos mozgások figyelhetők meg (pl. csillók és ostorok mozgása, mitotikus orsó működése); sejtes szinten hely- és alakváltoztató mozgások történnek; a szövetek gyakran mozgásra és erő kifejtésre specializálódtak (lásd izom); a szervezet bonyolult helyváltoztató és egyéb mozgásokat végez, és biológiai sokaságok is jellegzetes, irányított és koordinált mozgásformákat produkálhatnak (pl. halrajok vagy madárseregek mozgása, vándorlása). Az alábbiakban a biológiai mozgások és a mozgató szerkezetek közül két fő területet tekintünk át: a szubcelluláris és sejtes struktúrákat, valamint az emberi mozgásszerveket.

1. V/1. A szubcelluláris és sejtes struktúrák biomechanikája

A biológiai mozgás – ezen belül elsősorban az izomműködés – vizsgálata a biofizika egyik hagyományos fejezete, melynek célja a különböző mozgásformák háttérben működő fizikai mechanizmusok megismerése. A molekuláris mechanizmusok háttérben a citoskeletális rendszer és asszociált fehérjéi állnak, melyek szerveződése és kölcsönhatásai az izomban különleges módon nyilvánulnak meg, de valamennyi eukarióta sejtben megtalálhatóak.

1.1. V/1.1. A citoskeletális rendszer biofizikája

A citoskeletális rendszer az eukarióta sejtek dinamikus fehérjévrétegrendszere, amely specifikus fehérjepolimer filamentumokból épül fel.

1.1.1. V/1.1.1. A citoskeletális filamentumok rugalmassága

A citoskeletális filamentumok rugalmas objektumok, és ezen fizikai tulajdonságuk fontos szerepet játszik különböző mozgásformákban. Rugalmasságuk különböző módon írható le.

Citoskeletális filamentumok mint szilárd testek

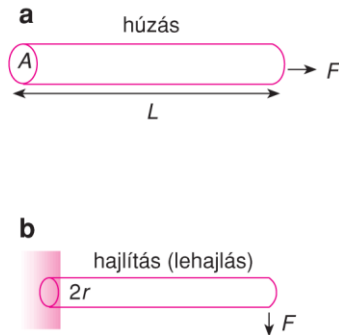
Első megközelítésben a citoskeletális filamentumok leírhatók szilárd testként, amire jellemző, hogy erő hatására az erő irányában bekövetkező deformációt, alakváltozást szenved. A szilárd testek rugalmasságát a Hooke-törvény írja le:

$$\frac{F}{A} = E \frac{\Delta L}{L}, \quad (\text{V.1})$$

ahol F az erő, A a test keresztmetszete, L a nyugalmi hossz, és ΔL a megnyúlás. Az F/A hányados a húzófeszültség (σ), és a $\Delta L/L$ a fajlagos megnyúlás (ϵ). A két hányados közötti nyomás dimenziójú (Pa) arányossági tényező (E) a Young-féle, vagy rugalmassági modulus. Homogén szerkezetű testek esetében a Young-modulus csak az anyagi minőségre jellemző, és nem függ a test alakjától, méretétől. A legmerevebb fehérjék rugalmassági modulusa igen nagy, a plexiéhez hasonló. A rugalmassági modulusal szemben az úgynevezett rugóállandó ($\kappa = F/\Delta L$) nemcsak az anyagi minőségtől, hanem a test alakjától is függ. Különböző rugóállandókról beszélhetünk attól függően, hogy az erő a testhez képest milyen irányban hat (V.1. ábra). A rugóállandó megadja, hogy egységnyi alakváltozást (megnyúlás, lehajlás) mekkora erő képes előidézni.

A húzási (vagy longitudinális) rugóállandó a test hossz tengelyével párhuzamosan ható erő esetén jellemzi a test rugalmasságát. A hajlítási rugalmasság (más néven hajlítómerevség) a test hossz tengelyére merőleges irányban ható, úgynevezett hajlítóerőnek kitett test rugalmasságát jellemzi. Kör keresztmetszetű testekre – mint amilyenek a citoskeletális filamentumok is – a hajlítómerevség:

$$\kappa = \frac{4\pi}{3} \frac{Er^4}{L^3} \quad (\text{V.2})$$



V.1. ábra. Különböző rugóállandók sémás ábrázolásai rúd a) és egyik végén befogott (konzolos) rugó b) esetén

A különböző biológiai folyamatokban mind a húzási, mind a hajlítási rugalmasság fontos szerepet játszik. Az izomszarkomer vékony, illetve vastag filamentumaira például húzóerők, a flagellum mikrotubulusaira pedig hajlítóerők hatnak.

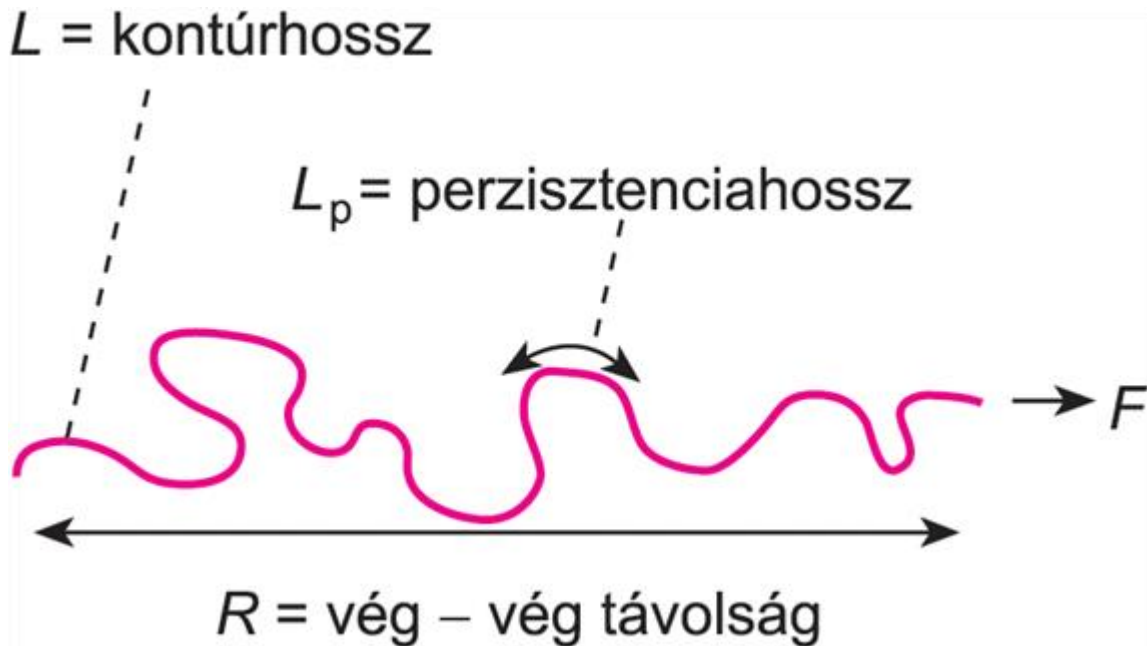
Termikus rugalmasság

A hosszú, láncszerű polimernek tekinthető citoszkeletális filamentumokra molekuláris szinten termikus erők hatnak. A termikus erő onnan ered, hogy a filamentum környezetében levő, hőmozgást végző molekulák véletlenszerűen ütköznek a filamentummal, és emiatt alakja véletlenszerűen változik, fluktuál. Ennek következtében a filamentum két végpontja közötti átlagos távolság kisebb, mint a kiegyenesített filamentum teljes, ún. kontúrhossza. Egy polimerlánc sémája látható a V.2. ábrán.

A polimerlánc átlagos alakja leírható egyszerű paraméterek segítségével:

$$\langle R^2 \rangle_{\text{átlag}} = 2L_p L \quad (\text{V.3})$$

ahol R a polimer két végpontja közötti távolság, L_p a perzisztenciahossz, és L a kontúrhossz. A perzisztenciahossz egy statisztikus távolság, amelyen belül a lánc merevnek tekinthető, azaz a lánc iránya ezen a szakaszon állandó. A perzisztenciahossz egy elméleti paraméter, nagysága meghaladhatja a polimer fizikai méreteit (kontúrhosszát) is. Vegyük figyelembe ugyanis, hogy egy polimerláncból kivághatunk akármilyen parányi részletet, amelynek mérete a polimerlánc perzisztenciahosszánál kisebb lehet. A polimerlánc alakja a véletlenszerű (random), bolyongó, diffúziós mozgásra (Brown-mozgás) emlékeztet, ezért az ilyen polimert gyakran random láncnak („random coil”) vagy statisztikus polimerláncnak is nevezik. A perzisztenciahossz tehát a lánc hajlítómerevségével áll összefüggésben: minél rövidebb L_p , annál hajlékonyabb a lánc, és fordítva. Attól függően, hogy a perzisztenciahossz (L_p) hogyan viszonyul a kontúrhosszhoz (L), definiálhatunk merev ($L_p \gg L$), szemiflexibilis ($L_p \sim L$) és flexibilis ($L_p < L$) láncokat. Különböző citoszkeletális filamentumok perzisztenciahosszait az egyes filamentumok tárgyalásánál tüntetjük fel. Egy statisztikus polimerlánc egyensúlyi alakjára az entrópiamaximum jellemző, feltéve hogy a lánc mentén nem lépnek fel kémiai kölcsönhatások. A lánc külső erővel történő megnyújtásakor az entrópia csökken, a megnyújtott lánc elengedésekor pedig az entrópiamaximumra való törekvés rövidíti a láncot. A jelenség az entropikus rugalmasság, és az ilyen láncot entropikus polimerláncnak, entropikus rugónak is nevezik.



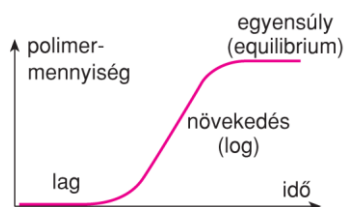
V.2. ábra. Polimerlánc sémája

1.1.2. V/1.1.2. A citoszkeletális filamentumok polimerizációja

A citoszkeletális filamentumok fehérjepolimerek, azaz fehérje természetű alegységekből épülnek fel. A felépülés folyamata a polimerizáció, az ezzel ellentétes irányú folyamat a depolimerizáció.

A polimerizáció szakaszai

A polimerizáció folyamata szakaszokra bontható (V.3. ábra): a) lag fázis, amely során a polimerizációs centrumok, magok kialakulása zajlik, b) log fázis, amely során a filamentumok hosszanti növekedése dominál, és c) egyensúly vagy equilibrium fázisa, amelyet az jellemez, hogy a filamentumok nettó hossznövekedést nem mutatnak, átlagos hosszuk állandó.



V.3. ábra. A polimerizáció szakaszai

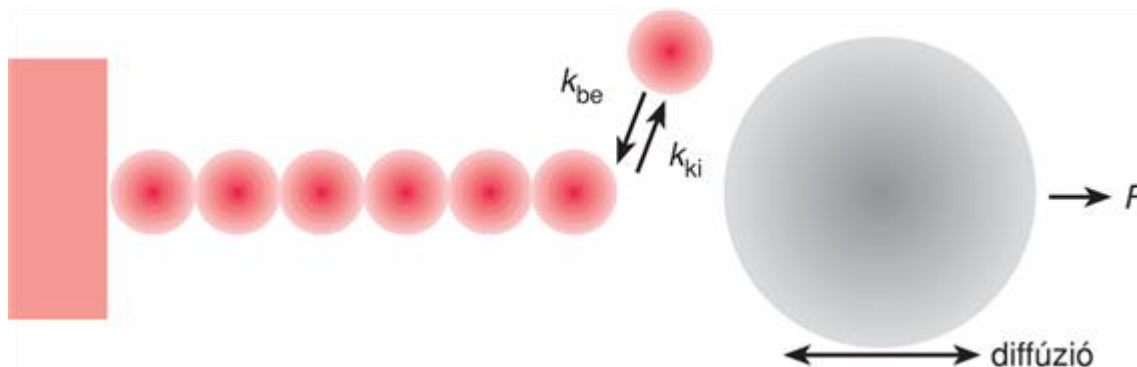
Polimerizációs egyensúlyok

A valódi polimerizációs egyensúlyt az jellemzi, hogy a filamentum mindkét végéhez időegység alatt hozzáadódó és onnan disszociálódó alegységek száma egyenlő. Citoszkeletális filamentumok esetében ettől eltérő, érdekes egyensúlyi folyamatok figyelhetők meg. A treadmilling (taposómalom) esetében a filamentum két végén ellentétes irányú folyamat zajlik: az egyik végen dominál a polimerizáció, a másikon a depolimerizáció. A filamentum átlagos hossza azonban konstans. Ez a folyamat elsősorban az aktinfilamentumokra jellemző. Mikrotubulusokra jellemző a dinamikus instabilitás, amit a lassú növekedést követő gyors depolimerizáció jellemez.

Erőkifejtés polimerizációval

Egy polimerizálódó filamentum alkalmas arra, hogy egy sejtorganellumra erőt fejtson ki és azt térben elmozdítsa. A jelenségnek fontos szerepe van számos biológiai folyamatban (pl. sejtmozgás). A lehetséges mechanizmusok egyike az úgynevezett termikus vagy Brown-féle kilincskerék. A polimerizációval történő erőkifejtés során az egyik végén rögzített filamentum egy objektummal (részecské) érintkezik (V.4. ábra). A

részecske diffúziós mozgást végez, azaz helyzete véletlenszerűen ingadozik egy átlagos pozíció körül. Előfordulhat, hogy akkora rés támad a részecske és a polimer vége között, hogy ott elfér egy újabb alegység, amely a már meglévő filamentumvéghez kapcsolódhat. Ekkor a filamentum meghosszabbodhat, és a részecske átlagos helyzete – a filamentummal való ütközés miatt – eltolódhat. A folyamatot a részecske diffúziós sebessége és a polimerizáció/depolimerizáció sebessége (k_{be}/k_{ki}) közötti különbség vezérli.



V.4. ábra. Erőkifejtés citoskeletális filamentum polimerizációjával

A polimerizáció vizsgálata

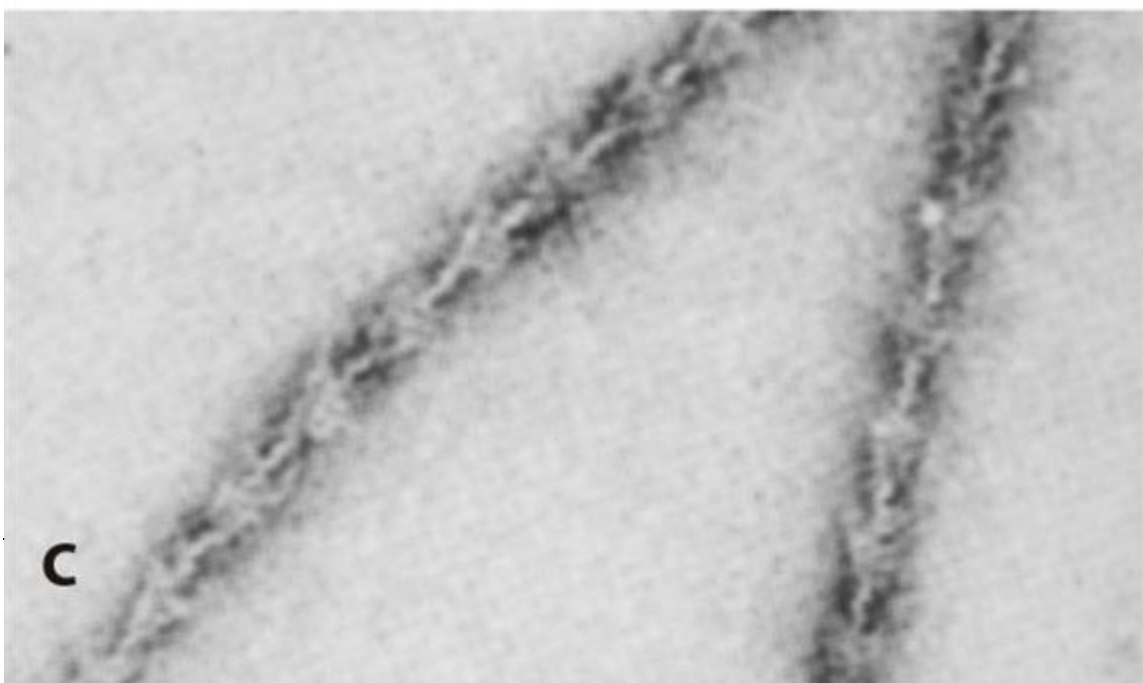
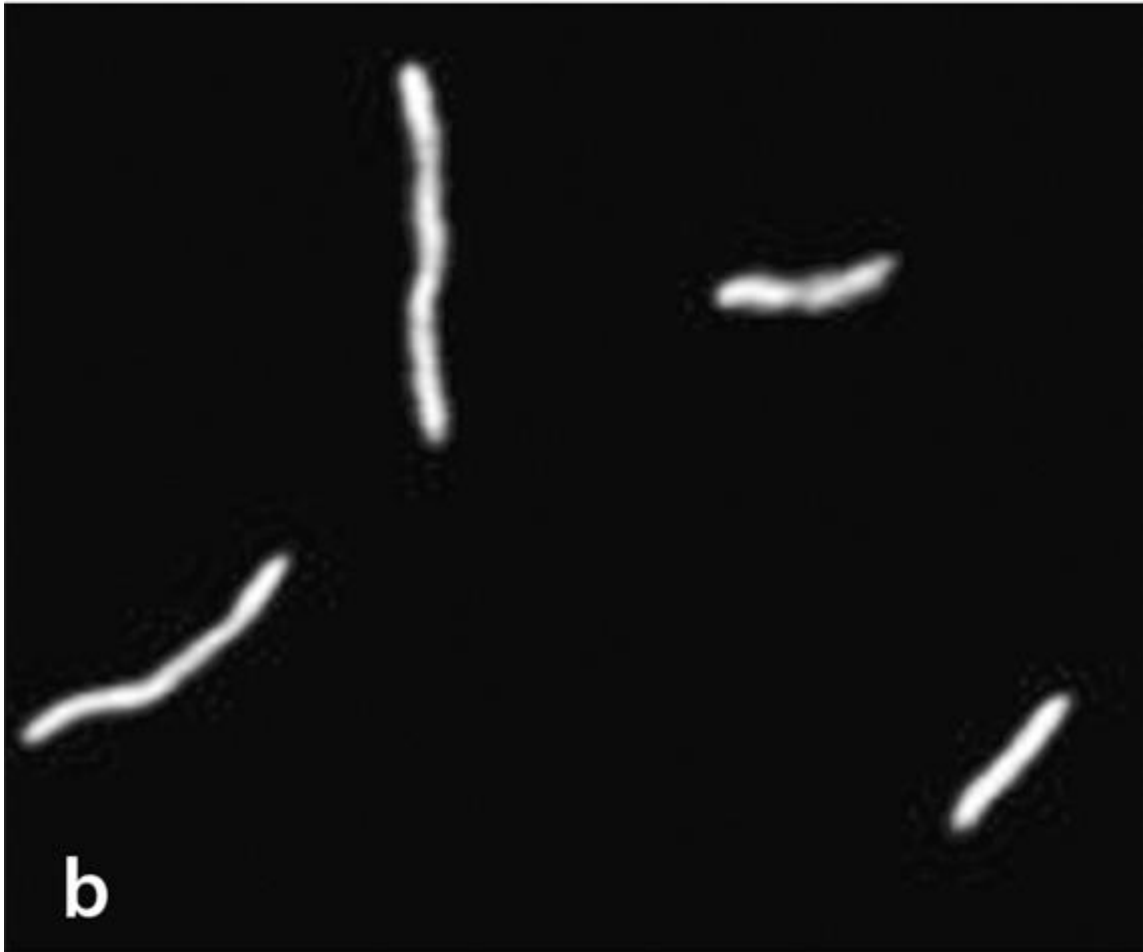
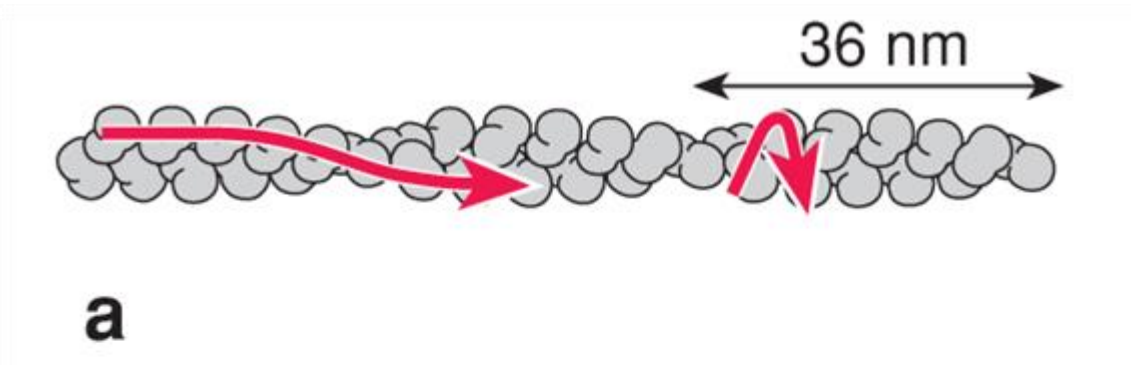
Citoskeletális filamentumok polimerizációjának vizsgálatára több módszer kínálkozik. Filamentumsokaság vizsgálatára alkalmasak a **spektroszkópiai** technikák. Ilyenkor a kialakuló filamentumok megnövekedett fényszórását vagy fluoreszcens festékkel jelölt monomerek polimerizáció során megváltozó fluoreszcenciáját követjük. Egyedi filamentumok hosszváltozásának vizsgálatára alkalmas módszer a **teljes belső visszaverődés fluoreszcencia (evaneszcensmező-fluoreszcencia) mikroszkópia**. Ilyenkor fluoreszcens festékkel jelölt monomerekből polimerizáció során felépülő filamentumok alaki paramétereit követjük. Ezt az teszi lehetővé, hogy a filamentum sokaságnak csak az evaneszcens mezőbe eső keskeny rétegét gerjesztjük, ami lehetővé teszi egy-egy filamentum azonosítását.

1.1.3. V/1.1.3. A citoskeletális rendszer komponensei

A citoskeletális rendszer három fő filamentális rendszerből, illetve a hozzájuk kötődő asszociált fehérjékből áll: aktinfilamentumok (mikrofilamentumok), mikrotubulusok és intermedier filamentumok.

Az aktin filamentális rendszer

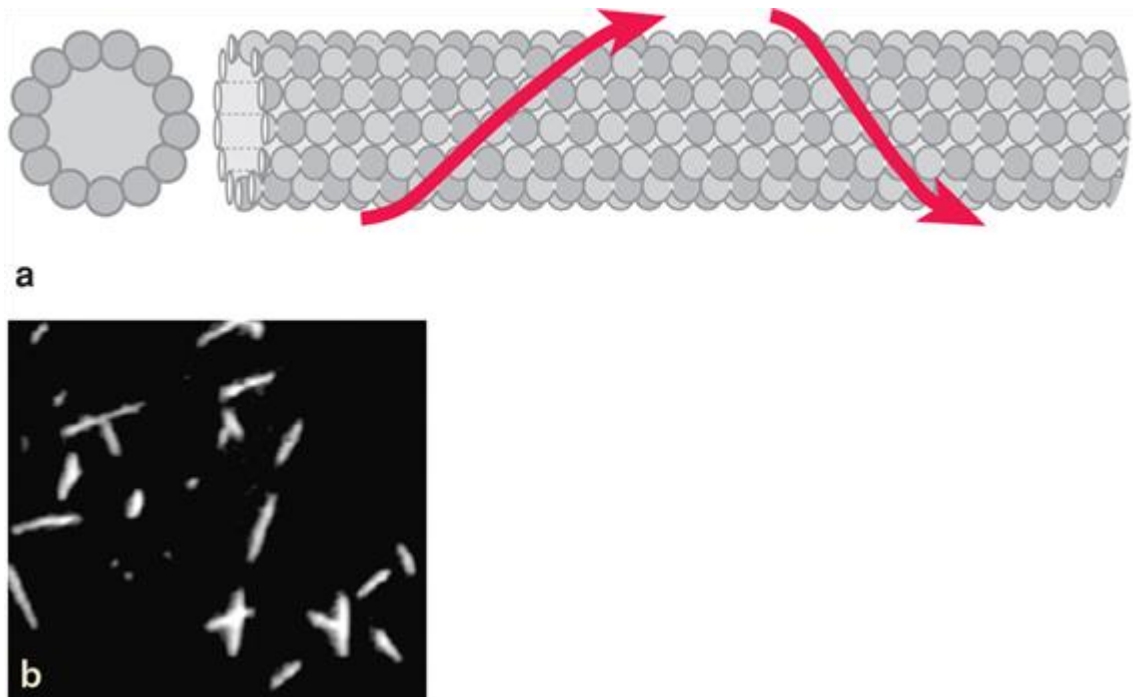
Az aktin az eukarióta sejtekben legnagyobb mennyiségben előforduló fehérje (az összes fehérje 5%-a). Az aktin monomer (globuláris vagy G-aktin) 375 aminosavból épül fel, molekulatömege 43 kDa. Az aktinfilamentum (filamentális vagy F-aktin) átmérője kb. 7 nm. Hossza in vitro több tíz μm lehet, azonban in vivo csupán 1-2 μm és bonyolult mechanizmusok szerint szabályozott. A filamentumban megkülönböztethetünk egy jobb menetes, 72 nm menetemelkedésű dupla, illetve egy bal menetes, alacsony emelkedésű hélixet (V.5a. ábra). Az F-aktin szemiflexibilis polimerlánc, perzisztenciahossza kb. 10 μm (V.5b. ábra). A filamentumra jellemző a szerkezeti polarizáció: miozinnal alkotott komplexe „szögesdrót” alakja alapján (5c. ábra) az egyik vég „szöges” (barbed end), a másik „hegyes” (pointed end). A szöges véget „plusz” végnek is nevezik, mert itt a polimerizáció gyors, illetve a hegyes véget „mínusz” végnek, mert itt a polimerizáció lassú.



V.5. ábra. a) Az aktin filamentum sémája. A nyilak a jobb, illetve bal menetes hélixeket jelölik. b) Fluoreszcens festékkel festett egyedi aktinfilamentumok képe. A filamentumok átlagos alakja arra utal, hogy az F-aktin szemiflexibilis polimerlánc. c) Miozinfjekkel dekorált aktinfilamentumok negatív festéssel készített elektronmikroszkópos képe

A mikrotubuláris rendszer

A mikrotubuláris rendszer az eukarióta sejtek tubulinból és kapcsolódó fehérjékből álló rendszere. A tubulinmonomer minden eukarióta sejtben megtalálható, idegszövetben különösen nagy mennyiségben (itt az összfehérje 10-20%-a). Molekulatömege kb. 50 kD. α - és β -tubulin alkot heterodimért, melyből a mikrotubulus formálódik. A mikrotubulus átmérője kb. 25 nm, szerkezete üreges cső, mely 13 protofilamentumból áll (V.6a. ábra). Az alegységek mikrotubuluson belüli elhelyezkedése alapján megkülönböztethetünk egy jobb menetes rövid menetű hélixet és egy bal menetes hosszúmenetű hélixet (V.6a. ábra). A mikrotubulus merev polimerlánc, melynek átlagos kontúrhossza kb. 10 μ m, perzisztencia hossza azonban néhány mm (V.6b. ábra)! Ez a nagyfokú hajlítómerevség alkalmas támasztóelemekké teszi a mikrotubulusokat. A mikrotubulusra is jellemző a szerkezeti polaritás, amely a végek közötti eltérő polimerizációs dinamikában is megnyilvánul: a „plusz” végen a polimerizáció gyors, a „mínusz” végen lassú.



V.6. ábra. a) A mikrotubulus szerkezeti sémája keresztmetszetben és oldalirányból. A nyilak a bal, illetve jobb menetes hélixeket rajzolják ki. b) Fluoreszcens festékkel festett, detektált egyedi mikrotubulusok képe. A mikrotubulusok átlagos alakja arra utal, hogy azok merev polimerláncok

Az intermedier filamentális rendszer

Az intermedier filamentális rendszer 8-10 nm átmérőjű filamentumokból felépülő, szövetspecifikus fehérjerendszer, amely a legtöbb (de nem minden) állati sejtben megtalálható. Ezek a filamentumok kémiaiilag rendkívül ellenállóak, csak denaturálószerekkel (pl. urea) extrahálhatók a szövetekből. A monomer szerkezetére jellemző az N-terminális fej, centrális rúd (α -hélix, ezen belül hidrofób aminosavak heptád ismétlődése) és a C-terminális farkok. A szövetspecifikus monomerek egymástól a végeik szerkezetében különböznek. Az intermedier filamentumok fontos jellemzője, hogy – az aktinnal és tubulinnal ellentétben – a sejtben teljesen polimerizált állapotban található, és nem mutatnak polimerizációs-depolimerizációs dinamikust (foszforiláció hatására azonban depolimerizáció léphet fel). Az intermedier filamentumok szemiflexibilis polimerláncnak tekinthetők, perzisztenciahosszuk kb. 1 μ m, átlagos kontúrhosszuk néhány μ m. Mechanikailag igen ellenállóak, és feltehető, hogy fontos szerepet játszanak a szöveti mechanikai integritás fenntartásában.

A citoskeletonhoz asszociált fehérjék

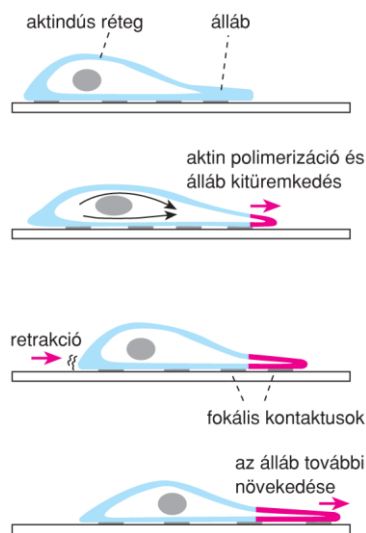
A citoskeletonhoz asszociált fehérjék a különböző filamentális rendszerekhez kapcsolódó fehérjék, amelyek szerteágazó funkcionalitással ruházzák fel a citoskeletonális rendszert. Az asszociált fehérjék különböző csoportokba sorolhatók, különböző szempontok szerint. Aszerint, hogy melyik filamentális rendszerhez asszociálódnak, lehetnek aktin-asszociált (pl. miozin), mikrotubulus-asszociált (pl. tau) vagy intermedierfilamentum-asszociált fehérjék. A filamentumhoz való kapcsolódás geometriája szerint beszélhetünk véghez kapcsolódó („capping”, pl. gelsolin), oldalról kapcsolódó (pl. tropomiozin), vagy véghez és oldalhoz egyaránt kapcsolódó (pl. Arp2/3) asszociált fehérjékről. Funkcióik szerint az asszociált fehérjék lehetnek keresztükötő (gélformáló (pl. filamin, spektrin) vagy kötegformáló (pl. α -aktinin, fimbrin, villin)), vagy polimerizációt befolyásoló (depolymerizáló („severing”, pl. gelsolin), vagy stabilizáló (pl. profilin, tropomiozin)). Az asszociált fehérjék egy speciális csoportjába tartoznak a motorfehérjék.

1.1.4. V/1.1.4. Sejtmozgás, motilitás

Sejtmozgáson azon folyamatokat értjük, amelyek a sejt alakjának, illetve helyzetének megváltozását eredményezik.

Eukarióta sejtekben két fő sejtmozgási formát különböztethetünk meg, a ciliáris (flagelláris) mozgást és az állábképződéses sejtmozgásokat. A ciliáris mozgást egy erre szakosodott organellum idézi elő, (cilium vagy flagellum), míg az állábképződés az aktinfilamentális rendszertől függő általános jellegű alapfolyamat, amely bonyolultabb celluláris folyamatok alapjául szolgál.

A cilium kb. 0,25 μm átmérőjű, hajszerű epiteliális sejtfüggelék. A flagellum a ciliumhoz hasonló, de annál hosszabb. Felépítésükre a 9 + 2 mikrotubuláris elrendeződés, az úgynevezett axonemális szerkezet jellemző. Fő szerepük a folyadék mozgatása a sejt mentén (pl. légzőhám) vagy a sejt továbbítása folyadékban (pl. spermacita motilitása). Az állábképződés vagy pseudopodium reakció a citoplazma átmeneti kitéremkedése, mely komplexebb celluláris folyamatok (pl. mozgás, kemotaxis, fagocitózis, axonnövekedés stb.) alapjául szolgál. Élő sejtekben az állábképződéssel járó folyamatok számos biológiai funkcióért felelősek, úgymint a fibroblasztok kitapadása és mozgása, hámsejtek kitapadása, hámlepel képződése, axonnövekedés, leukociták és amoeboid sejtek mozgása, trombocitakitapadás. A sejtmozgás folyamatát lépésekre bonthatjuk (V.7. ábra). Az első lépés a protrusio („kitéremkedés”): lamellipodiumképződés, ami aktinfilamentumok kialakulásával és rendezett beépülésével jár. Ezt követi a letapadás, amelynek során fokális kontaktusok képződnek. A letapadás után a sejt tovahúzódik, ami a tractio (húzás) lépése. A lépés során a lamellipodiummal ellentétes pólus retrahálódik (visszahúzódik).



V.7. ábra. A sejtmozgás lépései

1.2. V/1.2. A motorfehérjék biofizikája

A motorfehérjék vagy mechanoenzimek olyan különleges fehérjemolekulák, amelyek kémiai energiát alakítanak mechanikai munkává, elmozdulást és erőkifejtést létrehozva ezáltal.

A motorfehérjék változatos molekuláris mechanizmusok alkalmazásával képesek erőkifejtésre és térbeli elmozdulás létrehozására. Három alapvető tulajdonsággal rendelkeznek: a) specifikusan kapcsolódnak valamilyen citoszkeletális filamentumhoz, b) a filamentum mentén elmozdulnak, illetve erőt fejtenek ki, és c) eközben ATP-t használnak. Kivételek azonban akadnak, mert bizonyos motorfehérjék nem citoszkeletális filamentumokhoz, hanem egyéb biopolimer molekulákhoz (pl. DNS) kapcsolódnak, és azon fejtik ki hatásukat, más motorfehérjék pedig nem ATP-t, hanem GTP-t használnak (pl. dynamin).

1.2.1. V/1.2.1. Motorfehérjék csoportosítása

Aktin alapú motorfehérjék: a miozinok

Népes fehérje-szuperfamilia, melybe a konvencionális (miozin II.) és nem konvencionális (I. illetve III–XVIII.) miozin családok tartoznak. Lineáris mozgást hoznak létre. Többségük az aktin mentén a filamentum plusz vége felé mozog, de van olyan miozin is, amelyik a mínusz vég felé halad, mint a miozin VI.

Mikrotubulus alapú motorfehérjék

A mikrotubulusokhoz asszociált motorfehérjék csoportjába soroljuk a dineineket, kinezineket, dynaminokat. A dineineknek axonemális (ciliáris vagy flagelláris) és citoplazmális típusait különböztetjük meg celluláris lokalizációjuk alapján. Lineáris mozgást hoznak létre. A mikrotubulus mentén a mínusz vég irányába mozognak. A kinezinek között konvencionális és nem konvencionális izoformák különíthetők el. A mikrotubuluson általában a plusz vég irányába mozognak (kivétel az Ncd, „non-claret dysjunction” fehérje). A dynaminok különleges, manapság egyre intenzívebben tanulmányozott fehérjék. Mikrotubulus-aktivált GTPáz aktivitással rendelkeznek és feltehetően a vakuoláris fehérjeválogatásban, vezikulumok lefűződésében játszanak fontos szerepet. Emiatt „pinchase” (csipkedő) enzimnek is hívják őket.

DNS alapú motorok

A DNS alapú motorfehérjék a DNS kettős spirál mentén mozognak el és fejtenek ki erőt. Idetartoznak a DNS- és RNS-polimerázok, illetve a vírus kapszid csomagoló motor, mely a vírusba csomagolja, tömöríti a genomiális DNS-t.

Rotációs motorok

A rotációs motorok, ellentétben a fenti, lineáris elmozdulást előidéző motorokkal, forgómozgást hoznak létre. Idetartozik például az F1F0 ATP-szintáz, amely a mitokondriális belső membránban a sejtlégzés utolsó lépéseként az ATP-molekula szintézisét végzi, illetve a bakteriális flagellum motor, amely baktériumok tovafele mozgását idézi elő.

1.2.2. V/1.2.2. Motorfehérjék közös tulajdonságai

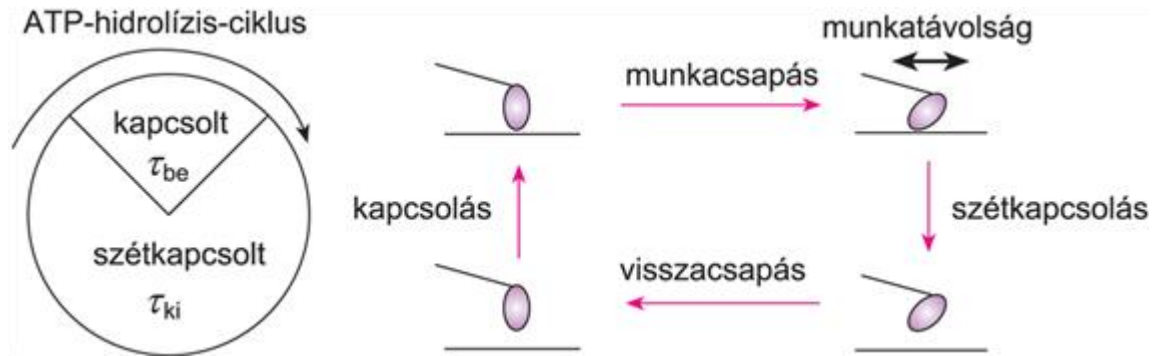
A motorfehérjék szerkezetében és működésében is fellelhetünk hasonlóságokat. Szerkezeti hasonlóság, hogy a motor fehérjékben az N-terminális részen globuláris fejet találunk. Ez a motor domén, amely nukleotidot köt és hasít, egyben specifikus kötőhely a megfelelő citoszkeletális polimer számára. A C-terminális részen működést biztosító kötőhelyet találunk. A kötőhely igen változatos lehet, és megszabja, hogy a motorfehérje a sejten belül milyen képletekhez kapcsolódik (pl. vezikulum, asszociált filamentum, GTPáz enzim, membrán stb.).

A funkció szempontjából a motorfehérjék közös tulajdonsága, hogy működésük ciklusos (V.8. ábra). A ciklus alaplépései: a) kötődés a polimerhez, b) húzás, c) disszociáció, d) relaxáció. Egy mechanikai ciklusban egyetlen molekula ATP hidrolizálódik, ezt szoros csatolásnak nevezik. A ciklus során különböző motorfehérje-nukleotid intermedierek keletkeznek. A mechanikai ciklusban szélsőséges esetekben terheletlen körülmények közötti elmozdulás vagy maximális külső terhelés mellett fellépő (nettó elmozdulás nélkül bekövetkező) erőkifejlődés történhet. A motorfehérje egyetlen munkaciklusában lezajlik egy mechanikai, illetve egy enzimikus ciklus (egy molekula ATP-kötése, hidrolízise és a reakciótermékek disszociációja). A ciklus egy részében a motorfehérje a citoszkeletális filamentumhoz kapcsolódik, míg a fennmaradó részben attól disszociál, szétválik állapotban van. A munkaciklus arány (r) a kapcsolódó idő (τ_{be}) és a teljes ciklusidő ($\tau_{teljes} = \tau_{be} + \tau_{ki}$) hányadosa:

$$r = \frac{\tau_{be}}{\tau_{be} + \tau_{ki}} = \frac{\tau_{be}}{\tau_{teljes}} .$$

(V.4)

A munkaciklus arány értéke a motorfehérje úgynevezett processzivitásával kapcsolatos. Egy processzív motorfehérje a munkaciklus nagy részében kapcsolt állapotban van, ezért r közel van 1-hez. A processzív molekulák képesek egymás után több lépést megtenni a filamentumtól való elszakadás nélkül. Ezzel szemben egy nem processzív motorfehérje a munkaciklus nagy részében szétkapcsolt állapotban található, azaz r közel van 0-hoz. Ennek megfelelően a molekula egyszeri kapcsolódás alkalmával nem képes egynél több lépést megtenni. Processzív motorok közé tartoznak például a kinezinok, a DNS- és RNS-polimerázok, illetve egyes miozinok (V., VI., IX. család). Nem-processzív motorfehérje a konvencionális miozin (miozin II.), mely az izomban található. Egy processzív motor egyedül is képes továbbítani terhet, ezzel szemben nem processzív motor esetében ehhez több molekula együttes munkája szükséges.



V.8. ábra. A motorfehérje munkaciklusának elvi sémája

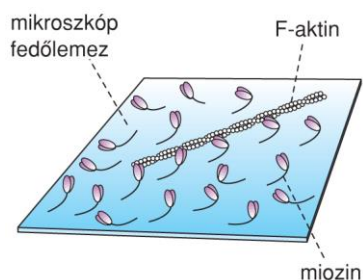
A motorfehérjék vizsgálati módszerei

A motorfehérjék vizsgálatára számos hagyományos módszer kínálkozik. Biofizikai szempontból kiemelkedően fontos a motorfehérjék mechanikai funkcióinak, szerkezeti, molekuláris, dinamikai és kinetikai tulajdonságainak vizsgálata, amelynek néhány módszerét említjük itt meg.

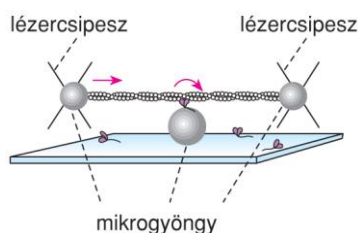
1. *In vitro motilitási próba.* A próbában fluoreszcensen jelölt egyedi filamentumok mozgását követhetjük, amint azok ATP jelenlétében elmozdulnak egy motorfehérjékkel borított felszínen (1. ábra). A módszer segítségével megmérhetjük a motilitási sebességet. Az így mért sebesség a terheletlen körülmények között fenntartott maximális sebesség.

2. *Egyedi motorfehérje által kifejtett erő mérése lézercsipesszel.* Egyedi motorfehérjék által kifejtett mechanikai erő megmérhető az úgynevezett három mikrogyöngyös elrendezésben (2. ábra), lézercsipesz segítségével. Két, egyenként lézercsipesszel megfogott mikrogyöngy segítségével egyetlen filamentumot ragadunk meg végénél, amelyet egy harmadik, rögzített mikrogyöngy felszínéhez adszorbeált motorfehérjével hozunk kölcsönhatásba. Amint a motorfehérje megrántja a filamentumot, a filamentum végén levő mikrogyöngy elmozdul az erő irányába, és ezt megfelelő detektorok segítségével mérni tudjuk. Az egyedi motorfehérjék által kifejtett erő nagysága a 1–10 pN tartományba esik.

3. *Spektroszkópiai módszerek.* A motorfehérjék szerkezetének és molekuláris dinamikájának vizsgálatára alkalmazhatunk spektroszkópiai módszereket is. Ilyenek a fluoreszcencia és EPR-spektroszkópiai eljárások. A vizsgálatok során a motorfehérje belső, ún. intrinsic fluorofórainak a tulajdonságait mérjük, vagy speciális biokémiai módszerekkel külső, extrinsic fluorofórokat vagy paramágneses szondákat kapcsolunk a molekula egy vagy több pontjára, és ezek tulajdonságait követjük.



1. ábra. Az *in vitro* motilitási próba aktinfilamentum és miozin motorfehérje esetére



2. ábra. Egyedi motorfehérje által kifejtett erő mérése lézercsipeszsel, három mikrogyöngy elrendezésben

1.3. V/1.3. Az izomműködés biofizikája

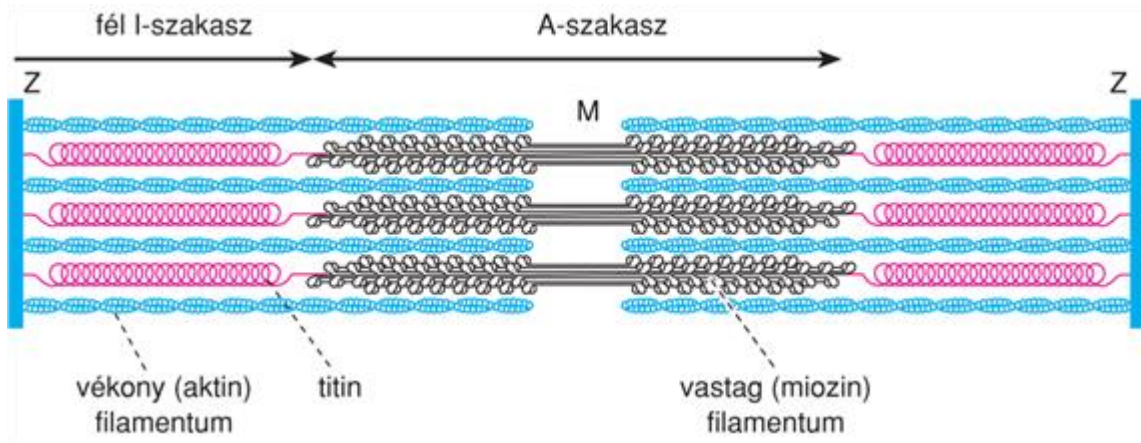
Az izom olyan – a makroszkopikus mozgás létrehozására specializálódott, citoszkéletális filamentumok és motorfehérjék rendezett összeszerveződéséből álló – szövet, amely kémiai energiát nagy hatásfokkal alakít mechanikai munkává.

1.3.1. V/1.3.1. Izomtípusok

Három alapvető izomtípust különböztethetünk meg. A **vázizom** több cm hosszú, ~100 μm vastag, multinukleáris sejtekből álló szövet. A több sejt fejlődéstani összeolvadásából keletkező sejtek, úgynevezett izomrostok, syncytiumot alkotnak. A **szívizom** mononukleáris, hartántcsíkolattal rendelkező sejtek, miociták hálózata. A szomszédos sejtek egy különleges szerkezetű felületen, az interkalált lemezen kapcsolódnak egymáshoz, ezáltal egy funkcionális hálózatot, funkcionális syncytiumot alkotva. A **simazom** zsigerek falában található mononukleáris, orsó alakú sejtekből épül fel. Nem tartalmaz miofibrillumokat, csupán miofilamentumokat, ezért nem mutat harántcsíkolatot.

1.3.2. V/1.3.2. A harántcsíkolat izom szerkezete

A harántcsíkolat izomrostok (vázizom) vagy sejtek (szívizom) kötegéből, hálózatából épül fel. A rostok és sejtek különleges organellumok, úgynevezett miofibrillumok szárait tartalmazzák. A miofibrillumok harántcsíkolattal rendelkeznek, melyek háttérben az őket felépítő ismétlődő szerkezeti elemek, a szarkomerek felelősek (sarcos, gör: hús). A szarkomer a harántcsíkolat izom szerkezeti és működési egysége (V.9. ábra). A szarkomer citoszkéletális fehérjékből, asszociált fehérjékből és motorfehérjékből álló különböző miofilamentumok különleges, rendezett, félkristályos szerkezetű szupramolekuláris rendszere. Hagyományosan két fő filamentális rendszert, a vékony és vastag filamentumokat különítjük el. A vékony filamentumok aktinból és a hozzá kapcsolódott asszociált fehérjékből (pl. troponin, tropomiozin, nebulin) állnak. A vastag filamentumok miozinból és egyéb asszociált fehérjékből (pl. C protein) állnak. A szarkomert átszövi egy úgynevezett harmadik filamentális rendszer is, melynek fő alkotóeleme a titin nevű óriásfehérje. A harmadik filamentális rendszer fő szerepe a szarkomer rugalmasságának meghatározása és szabályozása. A szarkomert a miofibrillum mentén kétoldalt az úgynevezett Z-csík vagy Z-lemez határolja, ami különböző fehérjékből (aktin, α -aktinin, titin, cap-Z, stb.) álló hálózat. A szarkomer középső szegmensében találjuk az A-szakaszt, amely nevét onnan kapta, hogy polarizációs mikroszkópban erős kettős törést, anizotrópiát mutat. A szomszédos A-szakaszok között található az I- (vagy izotróp) szakaszok. A fentieknek megfelelően a Z-csík az I-szakasz közepén húzódik. Az I-szakasz felépítésében a vékony filamentumok, és a velük párhuzamosan futó titinmolekulák vesznek részt. Az A-szakasz felépítésében a vastag filamentumok, illetve a közéjük kesztyűujjszerűen benyúló vékony filamentumok vesznek részt. Az A-szakasz közepén találjuk az M-csíkot, amely a Z-csíkhöz hasonlóan különleges fehérjék háromdimenziós hálózata; rögzítési pontként és erőátvivő elemként működik.

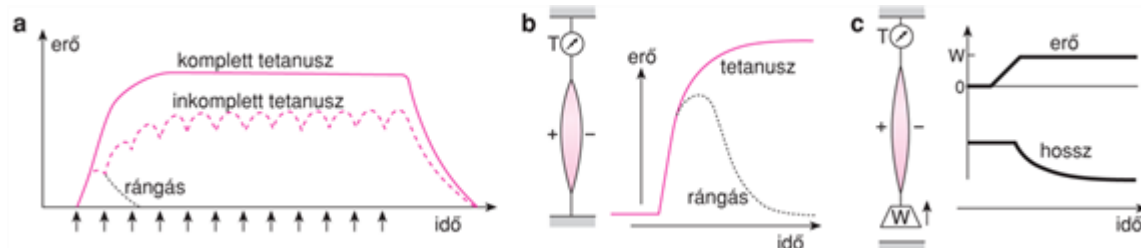


V.9. ábra. A harántcsikolt izomszarkomer vázlatos szerkezete

1.3.3. V/1.3.3. A harántcsikolt izom működése

Izomkontrakciós jelenségek

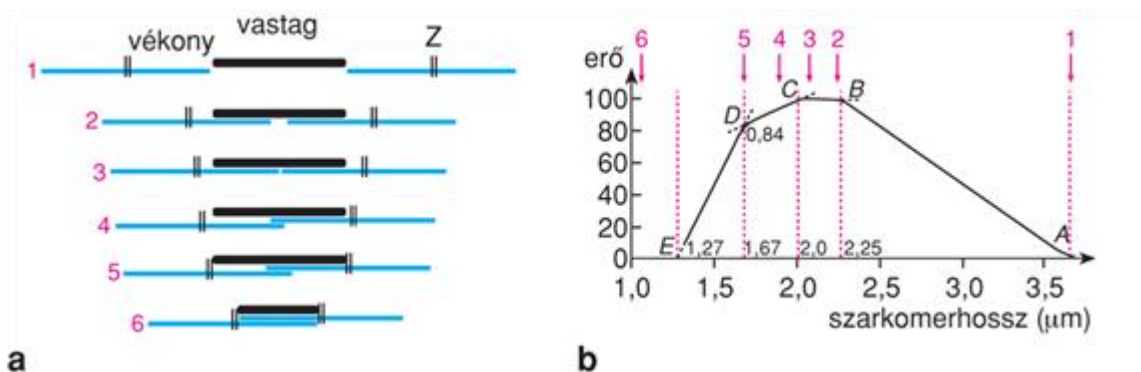
Ha egy izomköteget rövid elektromos impulzussal ingerlünk, akkor az összehúzódik, majd hamarosan elernyed. Ez a folyamat a rángás. Ha az izmot egymás után periodikusan fellépő impulzusokkal ingereljük, akkor az izom ennek megfelelően rángások sorozatán megy át. Ha az ingerfrekvenciát növeljük, akkor a rángások egymásba folynak (inkomplett tetanusz), majd az úgynevezett fúziós ingerfrekvenciát elérve az izom egyenletesen maximális erőt fejt ki (komplett tetanusz) (V.10a. ábra). A komplett tetanusz során kifejlődő maximális erő az izomműködés fontos kísérleti paramétere. Ha a tetanuszos összehúzódást úgy idézzük elő, hogy közben az izom hosszát állandó értéken tartjuk, izometriás kontrakcióról beszélünk (V.10b. ábra). Ha az izom állandó erő ellen dolgozik (például egy felfüggesztett izomkötegre egy súlyt akasztunk, V.10.c ábra), izotóniás kontrakcióról beszélünk. Ilyenkor az izom addig húzódik össze, amíg a súllyal megegyező erőt nem fejt ki.



V.10. ábra. a) Tetanuszos izomösszehúzódás kialakulása. b) Izometriás és c) izotóniás izomösszehúzódás

Az izomösszehúzódás fenomenológiai mechanizmusa: a csúszófilamentum modell

A csúszófilamentum modellben a kontrakció során a vastag és a vékony filamentumok elcsúsznak egymás mellett, miközben a két filamentális rendszer közötti kölcsönhatás során erő keletkezik (V.11. ábra). Minél nagyobb az átfedés a vastag és vékony filamentumok között, annál nagyobb a kifejlődő erő.



V.11. ábra. Csúszófilamentum-elmélet. a) A vastag és vékony filamentumok között átfedés különböző mértékben összehúzódtott szarkomer esetén. b) Tetanusos izomerő a szarkomerhossz függvényében a vastag és vékony filamentumok különböző mértékű átfedése esetén [a] ábra]

Az izom-összehúzódnás molekuláris modellje: rotáló keresztkötés modell („rotating cross-bridge model”)

Vajon molekuláris szinten mi idézheti elő a kontrakciót? Korai elektronmikroszkópos feltételek alapján kiderült, hogy a vastag filamentumokról úgynevezett kereszthidak ágaznak ki, amelyek képesek az aktinhoz kapcsolódni. Azóta a kereszthydról kiderült, hogy nem más, mint a miozinmolekula feji része, a motordomén. A modell szerint a molekula egy rotációs cikluson megy át (lásd motorfehérjék ciklusos működése).

A harántcsíkolt izom teljesítménye

Az izom teljesítményét megkapjuk, ha a kifejtett erőt megszorozzuk az összehúzódnás aktuális sebességével:

$$P = Fv. \text{ (V.5)}$$

Belátható, hogy mind a kifejtett erőnek, mind a sebességnek maximált határértékei vannak. A kifejtett maximális erőnek végső soron az aktin és a miozin közötti kémiai kötések energiája szab határt. A maximális sebesség pedig az ATP elhasítási sebesség maximális értékével függ össze. A harántcsíkolt izom erő-sebesség diagramja jellegzetesen nemlineáris (V.12. ábra). A maximális sebesség kb. 6000 nm/s, a maximális erő egyetlen miozinkeresthidra lebontva 1,7 pN. Az erő-sebesség összefüggésből kitűnik, hogy az izom maximális teljesítményét a maximális összehúzódnási sebesség kb. 1/3-ánál kapjuk. Az izom a befektetett kémiai energiát több mint 50%-os hatékonysággal hasznosítja, ami a leghatékonyabb motorok közé emeli.



V.12. ábra. A harántcsíkolt izom erő-sebesség diagramja

1.4. V/1.4. Az izom-összehúzódnás szabályozása

Az izom-összehúzódnás szabályozása az a folyamat, melynek eredményeként az izom ki- és bekapcsolható.

Az izom-összehúzódnás két alapvető feltétele a miozin ATPáz aktivitása és az aktinnal való kölcsönhatása. Ennek megfelelően kétféle szabályozómechanizmus figyelhető meg a természetben: a miozinmolekula aktivitásának, illetve az aktinfilamentummal való kölcsönhatásának regulációja.

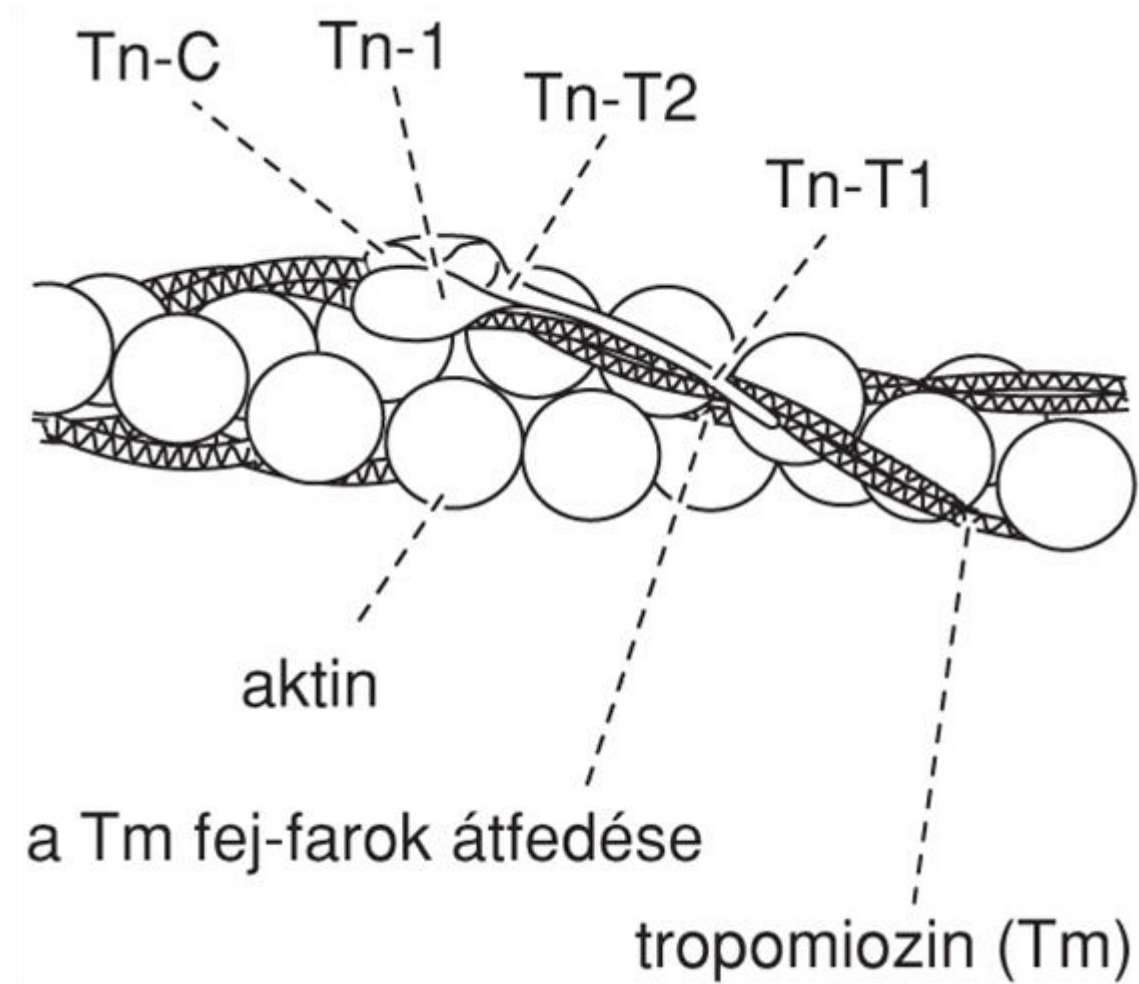
Fenn-féle jelenség

Megfelelő kísérleti elrendezésben (kaloriméterben elhelyezett izommechanikai berendezés) megmérhető az aktivált izom által kontrakció közben hő, illetve munka formájában felszabaduló energia. A hő és a munka összege a befektetett kémiai energia (elhasznált kreatin-foszfát és ATP mennyisége) nagyságával arányos. Az, hogy a munkavégzés sebessége (teljesítmény) függ az izom-összehúzódnás sebességétől, sejtethető az izom erő-sebesség diagramjából (V.12. ábra). 1924-ben Fenn kísérletesen kimutatta, hogy a hőfelszabadulás és munkavégzés sebességeinek összege nagyobb rövidülő izomban, mint izometriásan kontraháló izomban. A megfigyelés a Fenn-féle jelenség vagy Fenn-effektus. Mivel az energiefelszabadulás sebessége végső soron az ATP-hidrolízis sebességével függ össze, a Fenn-effektus arra utal, hogy az ATP-hidrolízis sebessége csökken mechanikai feszültség hatására, ami a miozin motorfehérje különböző nukleotid állapotai közötti átmenetek sebességi állandóinak feszültségfüggésével hozható összefüggésbe.

1.4.1. V/1.4.1. A tropomiozin-troponin alapú szabályozás

A harántcsíkolt (váz- és szív-) izom szabályozásáért az aktinnal asszociált tropomiozin-troponin fehérjerendszer felelős. Az aktinból, tropomiozinból és troponin komplexből álló fehérjerendszert a V.13. ábra szemlélteti. A szabályozás alapját ezen fehérjéknek a kalciumkoncentráció-növekedés hatására bekövetkező összehangolt,

alloszterikus kölcsönhatása jelenti. A tropomiozin, két molekula egymásba csavarodásával kialakuló csavart csavar („coiled-coiled”) dimer. A tropomiozin az aktinfilamentumhoz oldalról kapcsolódik. Egymással részleges átfedésben levő, tandem módon elhelyezkedő tropomiozin dimerek az aktinfilamentum teljes hossza mentén végighúzódnak. Az aktin-tropomiozin kölcsönhatás másodlagos (nem kovalens) kötések kialakulásával jön létre. Az aktinfilamentum dupla hélixének (V.5a. ábra) egy-egy szála mentén helyezkedik el egy-egy tropomiozinfilamentum (V.13. ábra). Az izomban található tropomiozin egy-egy molekulája, geometriai tulajdonságai miatt, hét aktinmonomerrel van kölcsönhatásban. Minden hét aktinmonomerből és egy tropomiozimból álló fehérjekomplexhez kapcsolódik egy troponinkomplex, amely a szabályozásban alapvető szerepet tölt be.



V.13. ábra. A vékony filamentum felépítése

A troponinkomplexet három különböző fehérje, a troponin T (a hagyomány szerint „tropomiozinkötő”), C („kálciumkötő”) és I („inhibitor”) alkotja. A troponinkomplex tömegének túlnyomó része megközelítőleg a tropomiozin dimer közepén helyezkedik el (V.13. ábra). A troponin T globuláris feji része a komplexbe ágyazódik, míg a hosszú farki rész az aktinfilamentum felszínén végighúzódnak a szomszédos tropomiozinmolekula kapcsolódási pontjáig nyúlik. A troponin T felelős a troponinkomplex szerkezeti stabilitásáért, az aktinnal való kölcsönhatás kialakításáért és fenntartásáért.

A harántcsíkolt izom szabályozásának folyamatában kulcsszerepet játszó molekuláris mechanizmusokat az ún. térbeli kizárási modell írja le. Nyugalmi izomsejtben a troponinkomplexben a troponin C gyenge kölcsönhatásban van a troponin I-vel. A troponin I a komplex ezen állapotában az aktinfilamentum felszínéhez kötődik, ezzel rögzíti a szabályozókomplex és egyszersmind a tropomiozin pozícióját. A tropomiozin a komplex ezen konformációjában az aktin felszínén blokkolja az aktin-miozin kölcsönhatást. Az izom ekkor összehúzódásra nem képes. Az izom aktiválásához szabad kalciumra van szükség. Nyugalmi sejtben a kalcium koncentrációja alacsony (~10 nM). Az idegi szabályozás hatására a szarkoplazmatikus retikulumból felszabaduló kalcium a citoplazma kalciumkoncentrációját megnöveli (>1 μ M). A kalciumkoncentráció

megnövekedése miatt a troponin C kalciumot köt. A kalcium kötődése megváltoztatja a troponin C konformációját. Az új konformációjában a troponin C-nek a troponin I-re vontakozó affinitása megnő. Ennek következtében a troponin I leválik az aktinról és a troponin C-hez kapcsolódik, s ezzel egyidejűleg a tropomiozin kiszabadul a korábban elfoglalt pozíciójából. A tropomiozin ebben az új konformációban elmozdul az aktinfilamentum felszínén, és szabaddá teszi az aktin-miozin kölcsönhatás kialakulásához szükséges miozinkötő helyeket.

Közvetlenül szabályozott miozinok

A természetben a térkizárásos modellben ismertetett molekuláris mechanizmus mellett más módja is van az izom szabályozásának. A nem akaratlagos kontrakciót végző simaizomban például az összehúzódás szabályozása közvetlenül a miozinon történik. A simaizom kikapcsolt állapotában a miozin két feje speciális kölcsönhatásban áll, és egyik fej sem képes izom-összehúzódást létrehozni. A miozinfejek aktivációja a miozin egyik könnyűláncra, az ún. regulációs könnyűlánc foszforilációjával jön létre. A foszforilációval a fejek közötti kölcsönhatás felszakad, és lehetővé válik az izom-összehúzódás.

A miozin közvetlen szabályozásával egy másik különleges izomtípusban is találkozhatunk. Kagyló harántcsíktolt izomban a miozin aktivitását a miozin másik, ún. esszenciális könnyűláncához közvetlenül kötődő kalcium szabályozza. Hasonlóan a simaizom esetéhez a miozinmolekula két feje egymással kölcsönhatásban áll, és a kalcium kötődésével, alloszterikus kölcsönhatás során a két fej között a speciális kölcsönhatás felszakad, a fejek a szabályozás szempontjából függetlenné válnak. Ennek hatására a miozin aktinnal való kölcsönhatása során létrejöhethet a húzási ciklus.

2. V/2. A mozgásszervek biomechanikája

A humán biomechanika legfontosabb tradicionális érdeklődési köre a mozgásszervek vizsgálata. Komplex mechanikai rendszerek elemzésének főbb lépései a funkció, a funkciót megvalósító mechanizmusok, a mechanizmusokat kialakító elemek és az elemeket alkotó anyagok vizsgálata. A tartórendszer alapját képező csontváz titkainak megfejtése során ezen a logikai soron érdemes visszafelé végighaladnunk. Ennek megfelelően a csont mint anyag, mint szövet, mint szerv, mint ízületalkotó-ízesülő struktúra, illetve a csontváz mint tartó szervrendszer kerülnek az alábbiakban tárgyalásra, pusztán biomechanikai szempontok alapján.

2.1. V/2.1. A csontrendszer

2.1.1. V/2.1.1. A csontszövet mint anyag

A csontszövet sejtekből és alapállományból épül fel. Az össztömegének mindössze 1-5%-át kitevő sejtállománya inkább biológiai, alapállománya pedig inkább mechanikai tulajdonságaiért felelős.

Anyagszerkezet

A csont szerkezete tökéletesen adaptálódott a szervezetben betöltött szerepéhez. Mechanikai tulajdonságait nagymértékben a csontszövet csőszerű alapegységei, az osteonok határozzák meg. Az 5-10 mm hosszú vagy akár még hosszabb osteonok lefutása nagyjából egybeesik a csont fő terhelési vonalaival, és így például csővescsontok esetében közel azok hossz tengelyében haladnak. Az anyagi szerkezet – technikai hasonlaltal élve – a következőképp jellemezhető: a csontváz csontjai olyanok, mint a vasbeton elemek, melyekben az osteonokba rendeződött kollagénrostok a betonvasnak, a mészsók pedig a cementnek és kavicsoknak felelnek meg. Az osteonok azonban a betonvasak mechanikai tulajdonságain túlmutatnak, mivel változatos lefutású kollagénrost rétegekből álló vastag falú csővecskékként – megtartott hajlékonyságuk mellett – egyaránt jól terhelhetőek húzó- és nyomóerőkkel. Nyomási szilárdságuk így alig múlja felül húzási szilárdságukat. A csont mechanikai tulajdonságait nagymértékben befolyásolja a szerves és szervetlen alkotórészek aránya.

Gyermekkorban – a fejlődő csont nagy szervesanyag-tartalma révén – annak rugalmassága a legjelentősebb. Maximális szilárdságát mintegy 35-40 éves korra éri el. Ezt követően csökken a szerves és szervetlen alkotók abszolút mennyisége és azon belül a szerves alkotók aránya: gyengül a csont, egyre veszít mind rugalmasságából, mind teherbírásából.

Az előbbi hasonlatnál maradva: a növekedőben lévő csont olyan vasbetonnak felel meg, melyben nagyszámú vasszál, de még nem teljesen kiszáradt beton található, felnőttkorban alakul ki a maximálisan terhelhető, de

kevésbé rugalmas „vasbetonállapot”, majd az öregedés a betonszerkezet fellazulását, porladását és a vasszálak megritkulását eredményezi.

Ugyanakkor nagy lehet az egyének és nemek közötti, illetve az egyéneken belül az egyes csontok és a két oldal közötti különbség is. A jobban igénybe vett domináns oldalon a csont általában erősebb. A corticalis felépítéséből következően tömege 1/3-ának elvesztésével mechanikai tulajdonságai csak 1/9 részben romlanak. A spongiosa mechanikai tulajdonságai hamarabb romlanak az életkorral, mint a corticalis csonté: morfológiailag a gerendák elvékonyodása vagy akár megritkulása figyelhető meg. Ez a csonttritkulás (osteoporosis) biológiai háttere.

Reológia

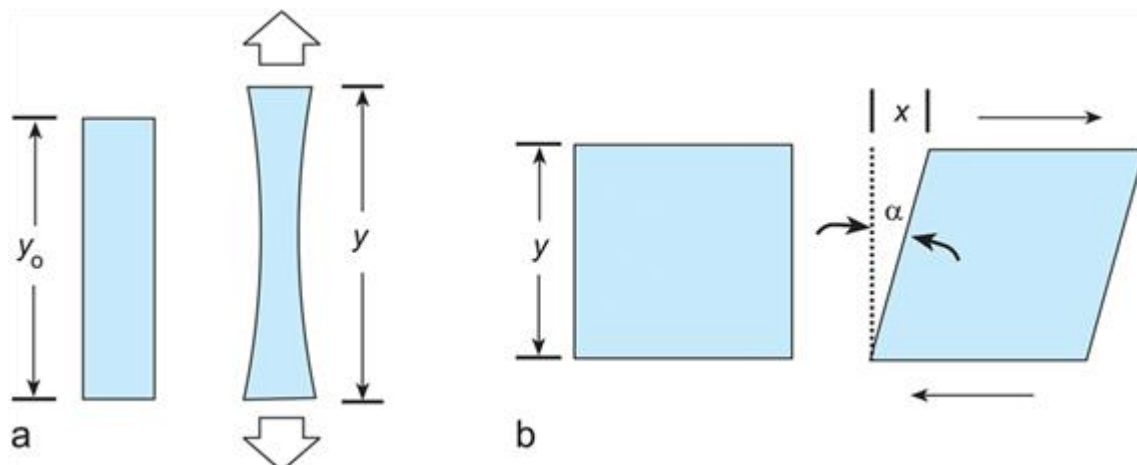
A reológia az anyagoknak külső erőhatásokra az idő függvényében létrejövő változásaival foglalkozó tudomány. Szilárd anyagok tisztán anyagminőséghez kötött paramétereit mintadarabokon szokás mérni. Ez a technika a csontok esetében segítséget nyújt abban, hogy a szervezetben található változatos geometriától elvonatkoztatva nyerhessünk információkat a csont mechanikai mutatóiról. Nyilvánvalóan így is számos faktor befolyásolja az eredményt, úgymint: a csont mikroszkopikus felépítése, anyagsűrűsége, tömört vagy szivacsos volta, a szervezet életkora, általános állapota, edzettségi foka, hormonális miliője, az anyagcsere, valamint a beható erők iránya, illetve a csontnak a szervezetben elfoglalt helyzete.

Alakváltozás

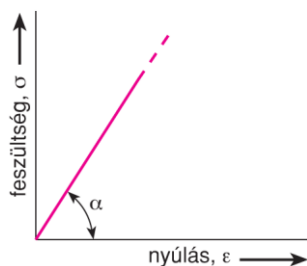
Alakváltozás (deformitás) akkor jön létre, ha az egymáshoz kapcsolódó anyagi pontok közötti távolságok az eltolódások következtében megváltoznak. Ez bekövetkezhet mind a felületre merőleges (normál), mind a felülettel párhuzamos (nyíró-) erő hatására (V.14. ábra).

Amikor egy szerkezetet húzásnak teszünk ki, az hosszában megnyúlik, de veszít a szélességéből, nyomás esetén pedig ennek az ellenkezője történik: rövidül és vastagszik. A deformált csont hossznövekedését elosztva annak eredeti hosszával megkapjuk a normál alakváltozást. Nyírás során a mintadarab egymással párhuzamos élei/felsőszéljei között jön létre elmozdulás. A nyírási alakváltozást a mintadarab nyíróerő irányába eső legnagyobb elmozdulásának és magasságának a hányadosa adja meg.

A terhelés és a hozzá tartozó deformitás grafikusán ábrázolható és **feszültség-alakváltozás** görbévé konvertálható. A σ feszültséget úgy kapjuk meg, hogy az F terhelést elosztjuk a csont A keresztmetszeti felszínével. A görbe $E = \frac{\sigma}{\epsilon}$ meredeksége megadja, hogy az anyag a terhelés hatására milyen mértékű normál alakváltozást ($\epsilon = \frac{\Delta y}{y}$ megnyúlást vagy zsugorodást) szenved. Amennyiben a kapott függvény egyenes (Hooke-egyenes, l. V.1. egyenlet és V.15. ábra), az anyagot a terhelési tartományban rugalmasnak, az E anyagi jellemzőt pedig rugalmassági modulusnak nevezzük. A Hooke-törvényt nem minden anyag, ill. nem tetszőleges nagyságú terhelés esetén követi, tehát nem minden anyag esetében kapunk lineáris feszültség-nyúlás görbét (l. keretes rész: „A csontszövet fizikai vizsgáló módszerei”). A corticalis csontot is csak egy bizonyos határig foghatjuk fel mint lineárisan elasztikus szilárd anyagot, ezen túlmenően nem lineáris viselkedést mutat a feszültség-alakváltozás vizsgálatok során. Ugyanakkor azt sem lehet figyelmen kívül hagyni, hogy a csont viszkoelasztikus tulajdonsággal is rendelkezik (l. keretes rész: A viszkoelaszticitás). Összességében tehát a csont mint számos biológiai élő szövet heterogén, anizotrop, inhomogén, viszkoelasztikus anyag, melynek pillanatnyi mechanikai viselkedésében az élő jelenségek nem játszanak jelentős szerepet.



V.14. ábra. Az elemi hasábon létrejövő normál és nyírási alakváltozások. a) Normál alakváltozás: $\varepsilon = (y-y_0)/y$;
b) nyírási alakváltozás: $\varepsilon = x/y = \tan \alpha \cong \alpha$



V.15. ábra. A rugalmassági modulus mint a Hooke-egyenes iránytangense

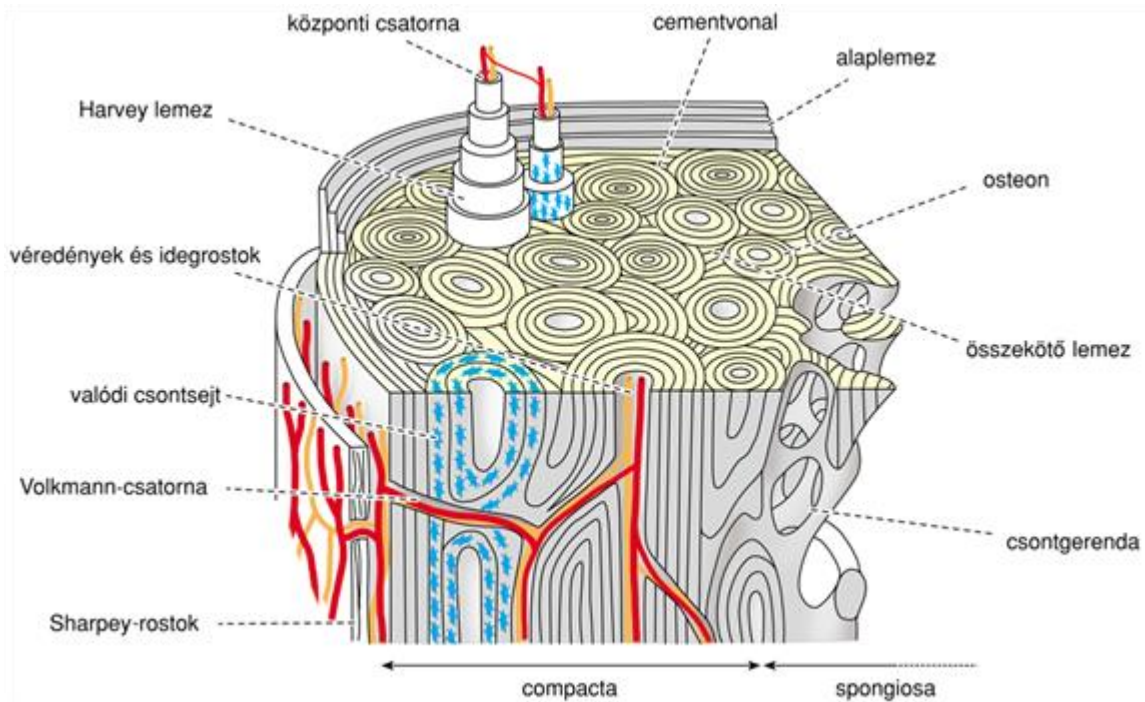
A csont szövettani és kémiai szerkezete

Makroszkópos megjelenésében a csontszövet alkothat tömör (*substantia compacta*) és szivacsos (*substantia spongiosa*) állományt. A compact csont legnagyobb részét a külső felszíneket, a csont kérgét (*cortex*) alkotja. A csont különböző szöveti megjelenési formáit alapvetően a kollagénrostok elrendeződése alapján osztályozhatjuk. A tömör csont szerkezeti alapeleme az *osteon* (*Havers-rendszer*). Ez 5-10 μm vastag, koncentrikus héjából álló, szűk csatornát magába záró vastag falú cső. A csontsejtek befogadására az *osteonok* falában elhelyezkedő szilvamac alakú kis üregek szolgálnak. Ezeket az üregeket egymással harántirányban összekötik a Volkmann-csatornák, melyek körül nincsenek lemezrendszerek. Az *osteonok* falát alkotó lemezekben kollagénrostok vannak. Attól függően, hogy a kollagénrostok hosszában (L), keresztben (T) vagy alternálón (A) jobbos-balos spirálba rendeződve helyezkednek el, különböztetünk meg L, T és A *osteonok*at. A szivacsos csont mikroszkóposan osteonális elrendeződést nem mutat, hanem finom lemezekből, tömör, hengerded szálakból és finom csövecskékből felépülő szövet, melyek bonyolult üregrendszereket zárnak magukba. A csontok fontos életjelensége az állandó csontátépülés (bontás és építés). Felnőtt ember csontrendszerében évente a corticalis csontállomány osteonjainak 5-10%-a, míg a spongiosa gerendáinak akár 20%-a is kicserélődhet. Ennek során az eredeti ép csont vagy a törésgyógyulási folyamat során képződő csonting szerkezete lebontási és csontképzési folyamatok révén módosul.

Kémiaailag minden csontnak közel azonos a felépítése: a csontállomány durván 1/3 rész vízből, 1/3 rész szerves anyagból (kollagén) és 1/3 rész szervetlen anyagból (apatit) áll. A **kollagének** a soksejtű állatokban széles körben elterjedt vázfehérjék. A szervezetben gyakorlatilag mindenütt előfordulnak: a csonton kívül a bőr, az inak és a szalagok mechanikai tulajdonságait is alapvetően meghatározzák. Szintézisük a csontban a csontképző sejtekben zajlik. A kollagénmolekulák finom fonalakba, az ún. mikrofibrillumokba rendeződnek, melyek szövetes kollagénhálózatot alakítanak ki. Az összes kötő- és támasztószöveti típusok közül a csont ásványianyag- tartalma a legnagyobb. A csontok hordozzák a szervezet kalciumtartalmának mintegy 99%-át. A csontok anorganikus összetevőinek fő részét döntően a szubmikroszkopikus **hidroxil-apatit** [$\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$] kristályok adják, melyek aggregációs magvakon [$\text{Ca}_9(\text{PO}_4)_6$ ionaggregátumok, foszfolipidmolekulák] képződnek és dinamikus egyensúlyban állnak az oldott ionokkal.

Néhány egyszerű kísérlettel demonstrálhatjuk az egyes csontalkotó anyagok szerepét illetve viselkedését:

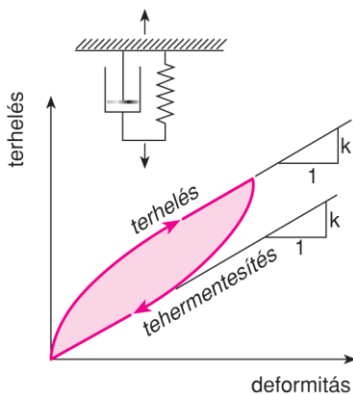
- A kollagénrostok főzésekor enyvet adnak.
- Ha a csontokat híg savba tesszük (dekalcinálás), a szervetlen anyagok kioldódnak belőlük és rugalmas, hajlékony lesz a csont.
- A csontokat elégetve (kalcinálás) a szerves alkotórész kiég, és hamyszerű, porlékony kalciumsók maradnak vissza.



Az emberi csont szöveti szerkezete. Sémás ábra a corticalis és a spongiosus csont átmenetéről

A viszkoelaszticitás

A csontszövet nemcsak lineárisan rugalmas, de viszkoelasztikus tulajdonságokkal is rendelkezik. A viszkoelaszticitás lényege, hogy a külső erők rugalmas alakváltozást, majd bizonyos mértéken túl az idő függvényében maradandó deformitást okoznak. Minden egyes terhelés-tehermentesítés ciklus után elnyelt energia marad a szövetekben. Ez azért van, mert minden egyes meghatározott idejű terhelés során ún. hiszterézishurok képződik, vagyis a terhelés-deformitás görbe más lefutású a terhelés felléptekor, mint a relaxáció során. A viszkoelaszticitás magyarázatára számos modell készült. Ilyen pl. az ún. Kelvin-test, mely egy párhuzamosan kapcsolt rugó (Hooke-test) és egy folyadékot tartalmazó dugattyú (Newton-test) egysége. A dugattyú a benne lévő összenyomhatatlan folyadék áramlásával lassítja mind a deformitást, mind az alak visszatérését, miközben energiát nyel el (1. ábra). Viszkoelaszticitási vizsgálatok során fontos tehát meghatározni az erő behatási idejét is. Nagyobb deformitás nagyobb elaszticitási modulust produkál, ezáltal a viszkoelasztikus anyagok nagyobb behatás esetén nagyobb energiaabszorpcióra is képesek. Fontos megjegyezni, hogy a csontokon túlmenően az azon tapadó szalagoknak is számottevő viszkoelaszticitásuk van.



A Kelvin-test mint viszkoelaszticitás-modell és a viszkoelasztikus anyagokra jellemző hiszterézishurok

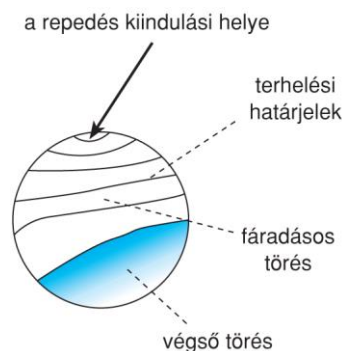
Fáradás

A fáradás az a jelenség, amelynek során az anyag a statikus teherbíró képességnél lényegesen kisebb, de ismétlődően fellépő terhelés hatására megy tönkre. A fáradás az anyagi szerkezet károsodásán keresztül végül

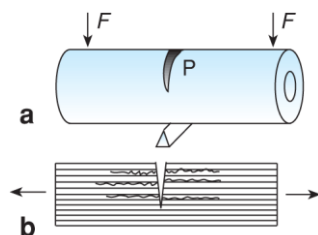
töréshez vezet. A fáradás – mint tisztán anyagi jellemző – meghatározására szabványos méretű és szabványosan sértett felszínű próbatesteken ciklikusan ismétlődő erőbehatást szokás alkalmazni. A sértett feszültséggyűjtő helyen repedés, mikrofraktúra keletkezik, ami lassan tovaterjed. Ezáltal csökken a hasznos keresztmetszet, nő a névleges feszültség és tovább nő a feszültségcsúcs. Végül az összefüggő keresztmetszet már olyan kicsi lesz, hogy a statikus terhelést sem bírja el: az anyag eltörik (V.16. ábra).

A csontok osteonális szerkezetéhez kötött „elemi szálak” felépítése a fáradásos törésvonal tovaterjedését lassítja, azok mintegy útját állhatják a repedések tovaterjedésének. A másik mechanizmus, amely a repedések tovaterjedését lassítja, magából az osteonok lemezes szerkezetéből adódik. Mivel virtuális rések vannak mind a csont külső lemezes héjszerű, mind az osteonok koncentrikus lemezei között, a lemezek harántirányú berepedései a határrétegen csak akkor futnak túl, ha éppen ott és éppen akkora erők hatnak, melyek újabb repedést hoznak létre. (V.17. ábra).

Az eddigiekből kiderül, hogy a fáradás mérése során a kérdés úgy merül fel, hogy egy adott erő ismétlődő behatására egy anyag szerkezete tönkremegy-e, és ha igen, milyen számú ismétlődés után? Az anyagok fáradását leíró empirikus törvény szerint, ha egy struktúra $5 \cdot 10^6$ ciklus alatt nem törik el, akkor ugyanennek az erőbehatásnak végtelen ideig ellenáll fáradásos törés nélkül. A fáradási jelenségek vizsgálati eredményei alapján az osteonális csont szerkezete rövid, orientált elemi szálakat tartalmazó összetett anyagként viselkedik, hasonlatosságot mutatva különböző üveg- és karbonszálak anyagokkal. A mintadarabokon történő vizsgálat a csontok mechanikai viselkedését illetően talán a fárasztás esetén adja a legkevésbé mérvadó eredményeket. Szemben ugyanis a laboratóriumi körülményekkel az élő szervezetben a terhelés során esetlegesen létrejövő mikrofraktúrák rövid időn belül megindítják azokat a javítómechanizmusokat, melyek az igénybevételekhez adaptálják a csontszerkezetet. A corticalis csont az emberi szervezet legkeményebb szövete: hosszirányú nyomási teherbírása 140 MPa (vö. acél: 200 MPa), és közel ekkora a húzási teherbírása is. Harántirányú (nyíró- és csavaró-) igénybevételekkel szembeni ellenállása ennél sokkal kisebb. A spongiosa hosszirányú nyomási teherbírása a corticalis csonténál mintegy 20-szor kisebb.



V.16. ábra. A fáradásos törés kialakulásának modellje



V.17. ábra. A fáradásos repedési vonalak tovaterjedése lemezes anyagszerkezetben

A csontszövet fizikai vizsgáló módszerei

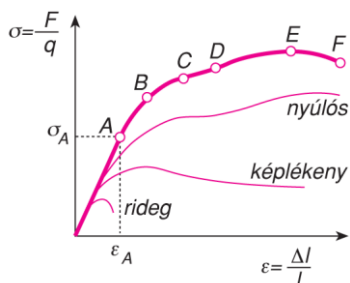
A **keményiségmérés** lényege, hogy a befogott mintadarab csiszolt lapjára merőlegesen, abba adott erővel és sebességgel, meghatározott geometriájú, nagy keménységű hegyet nyomunk és meghatározzuk az anyagon létrejövő bemélyedés felszínét.

A **törésvizsgálat** során egyszeri nagy erőbehatást alkalmazva ingás ütőmű segítségével törjük el a mintadarabot, és az alkalmazott erőt újabb mintadarabokon sorra csökkentve keressük meg a töréshatárt.

A **terhelés-deformitás vizsgálat** során húzásnak és nyomásnak tesszük ki a vizsgált anyagot, és így határozzuk meg bizonyos anyagállandókat (rugalmassági határ, szakítószilárdság stb). A vizsgálat során a feszültséget a megnyúlás függvényében ábrázoljuk (1. ábra). Rugalmasnak nevezünk egy szilárd testet akkor, ha az alakját megváltoztató külső erők megszűnte után az anyagban az összenyomás vagy húzás során ébredt belső erők a test eredeti alakját igyekeznek visszaállítani. A szilárd anyagok bizonyos határokon belül rugalmasan viselkednek. Ha a húzó terhelés túllép egy adott értéket – az ún. arányossági határt (a görbe **A** pontja) – a terhelés megszűnte után az alakváltozás már nem áll vissza a nulla értékre. A további nyújtás után már nem teljes a visszatérés, ennek szélső értéke a rugalmassági határ (**B**). Fémeknél ezt követően az anyagot tovább nyújtva maradandó, képlékeny alakváltozás jön létre, melynek szélső értéke a folyási határ (**C**). Ettől a ponttól a fém ismét „megszilárdul”, és egy következő határig a további megnyújtáshoz szükséges feszültség egyre nő (ezt nevezzük felkeményedésnek, **D**), majd az anyag keresztmetszete egy helyen hirtelen erősen lecsökken (**E**), és végül az anyag elszakad (**F**). Aszerint, hogy egy adott anyagra döntően a rugalmas vagy a maradandó alakváltozás a jellemző, teszünk különbséget rugalmas és képlékeny anyagok között. Azt az anyagot, amelyik az arányossági határon túl hirtelen eltörik, ridegnek nevezzük.

Napjaink technikája lehetővé teszi, hogy hasonló mechanikai méréseket nagyságrendekkel finomítva mikroszkopikus méretekben is lehessen végezni. Így pl. lehetőség van akár célzottan az osteonokon is direkt mechanikai mérések végzésére. Ezekből a mérésekből derült ki, hogy az osteonok mechanikai tulajdonságai nagymértékben függenek annak típusától. Az L típusú osteonok a húzásnak, a T típusúak a nyomásnak állnak jobban ellen, az A típusúak pedig minden igénybevétellel szemben közepes ellenállást mutatnak. De ugyanúgy lehetőség van ebben a dimenzióban fárasztás, keménységmérés és deformitásvizsgálatok végzésére is.

A méréseket a szivacsos csont esetében a corticalis csontnál is nagyobb mértékben befolyásolja, hogy a vizsgált minta terhelését a csont élében elfoglalt helyéhez viszonyítva azzal megegyező vagy más irányban végeztük. Mint a spongiosa szöveti szerkezetének ismertetésénél láttuk, a csontgerendák lehetnek vékony lemezek, tömör, hengerded szálak vagy finom csövecskék. Ez attól függ, hogy milyen mechanikai megterhelésnek van kitéve az a csontrés, amelyben elhelyezkednek, és a csontrésben a terhelés hatására milyen erővonalak képződnek. A spongiosán belül ébredő húzóerőknek megfelelően lemezes-szálás gerendák, míg a nyomóerőknek megfelelően csövecskék képződnek. A csontvégek csontgerenda-hálózatai ezáltal biztosítanak adekvát egységnyi ellenállást az ízesülő csontvégeken.



A terhelés-deformitás vizsgálat kimeneteli lehetőségei. A) arányossági határ; B) rugalmassági határ; C) folyási határ; C-D) „felkeményedés”; D-E) nyúlás; F: szakadás

2.1.2. V/2.1.2. A csont mint szerv

Morfológia

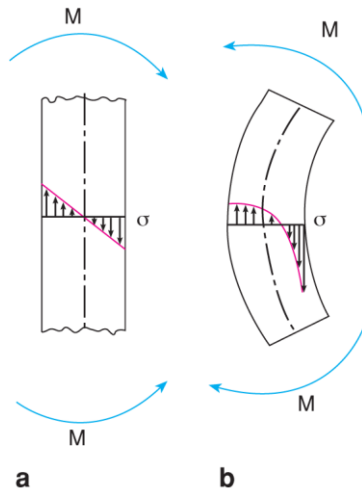
Morfológiailag lapos, köbös, légtartó, rövid és hosszú csöves csontokat különböztetünk meg. A testben elfoglalt helyzetük és funkcióik szerint a különböző csontokra más és más speciális feladatok hárulnak, így igénybevételüket tekintve vannak állandó teherviselő (alsó végtagok, gerinc), alkalmi teherviselő (felső végtagok) és nem teherviselő (arcoponya) csontok. A csontok alakja nagy vonalakban genetikailag determinált, de az élet során nagymértékben igazodik az igénybevételekhez és ezáltal jelentős egyedi variációkat is mutathat.

Reológia

Az **elemi igénybevételi módok** lehetnek normál (húzás, nyomás, hajlítás) és csúszató igénybevételek (nyírás, csavarás). Az igénybevétel időbeni lefolyása alapján megkülönböztethetünk statikus és dinamikus igénybevételeket, mely utóbbiak lehetnek harmonikus és szabálytalan periodikus igénybevételek. Ha valamely szerkezeti elemre külső erők hatnak, annak belsejében ellenálló erők, az ún. belső erők ébrednek. Ezek a terhelhetőségi határig egyensúlyt tartanak a külső erőkkel. A belső F erőket a vizsgált idom A

keresztmetszetéhez viszonyítjuk, és az egységnyi felületre eső erőt adjuk meg. Ez a $\sigma = \Delta F / \Delta A$ feszültség (l. V/2.1.1.2.1.). Homogén egyenes rúdban a feszültség eloszlása a keresztmetszet mentén húzó-nyomó igénybevétel esetén egyenletes, hajlításkor várhatóan szimmetrikus. Görbe vagy inhomogén rúd húzása vagy nyomása eleve hajlítást is jelent és ilyenkor a feszültségeloszlás szabálytalan (V.18. ábra).

A statikából ismert, hogy a nagy húzó-nyomó igénybevételnek a csövek jobban megfelelnek, mint a rudak. Az olyan csöves teherhordó szerkezeti elemet, amelynek falvastagsága sokkal kisebb, mint a szerkezet jellemző külső geometriai mérete, héjnak nevezzük. Vastag falú csőről akkor beszélünk, ha a falvastagság a szerkezet jellemző külső geometriai méretének nagyságrendjébe esik. Ez utóbbival analóg a hosszú és rövid csöves csontok közel hengeres felépítésű teste (corticalis). Általánosságban elmondható, hogy a csöves csont merevsége átmérőjének negyedik hatványával arányosan nő.



V.18. ábra. A feszültség eloszlása a) egyenes rúd hajlítása, b) görbe rúd hajlítása esetén. Az ívelt nyilak a hajlító-erőket, ill. M a forgatónyomatékokat jelölik. Az idomok közepén húzott vízszintes szimmetriatengelyből kiinduló nyilak hossza az adott ponton fellépő feszültséget jelöli. Gyakran a nyilak burkológörbéjét ábrázolják, mint a vizsgált vonal mentén tapasztalható σ feszültségprofil

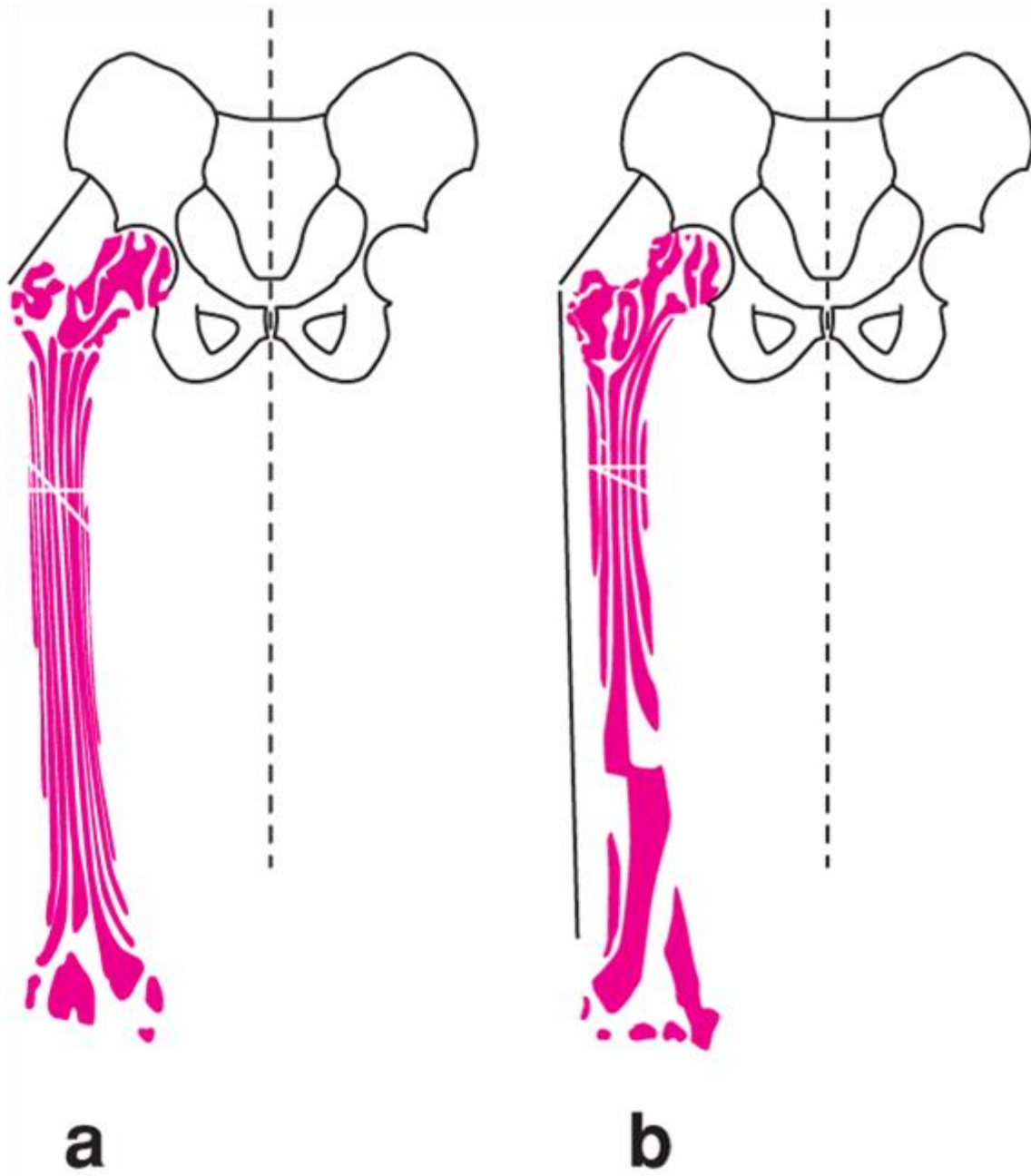
A mozgásrendszer vizsgálatánál mindig figyelembe kell venni azt is, hogy az izmok eredése, tapadása és feszültségi állapota, a szalagok és egyéb ízületi struktúrák jelentős mértékben módosítják a csontok terhelési viszonyait. Erre példa a combcsont „előfeszítettsége”. A nagytompor csúcsa és a combcsont oldalsó bütöke között feszül ki egy szalagszerű képlet (tractus iliotibialis), ami valójában a combizmokat borító kötőszöveti hártya megvastagodása. Fotoelasztikus vizsgálatokkal bizonyított tény, hogy ennek a szalagnak a hiánya esetén alapvetően megváltozik a terhelés hatására a combcsontban ébredő erők lefutása (V.19. ábra).

A teherviselő csontok csontvázban elfoglalt helyüknek megfelelően ízületi felszíneiken keresztül csatlakoznak egymáshoz. A csöves csontok ízesülő végei a változó irányú és nagyságú erőátadáshoz adaptálódva bunkószerűen kiszélesednek. Ezt a részüket szivacsos belső csontszerkezettel megtámasztott vékony tömör (compacta állományú) csonthéj képezi, melyet a jóval puhább és rugalmasabb üvegporc fed. A szivacsos csont a teherelosztás biztosítására kialakult, egy nagyságrenddel kisebb méretű, térbeli rúdrendszerként fogható fel. Az egymással ízesülő csontvégek különböző homorú és domború görbületű felszínei sokszor csak egy vagy több ponton biztosítanak érintkezést. Az érintkezési pontokban a porcban a terhelés hatására deformitás alakulhat ki, ami az érintkező felületek nagyságát kismértékben növelheti.

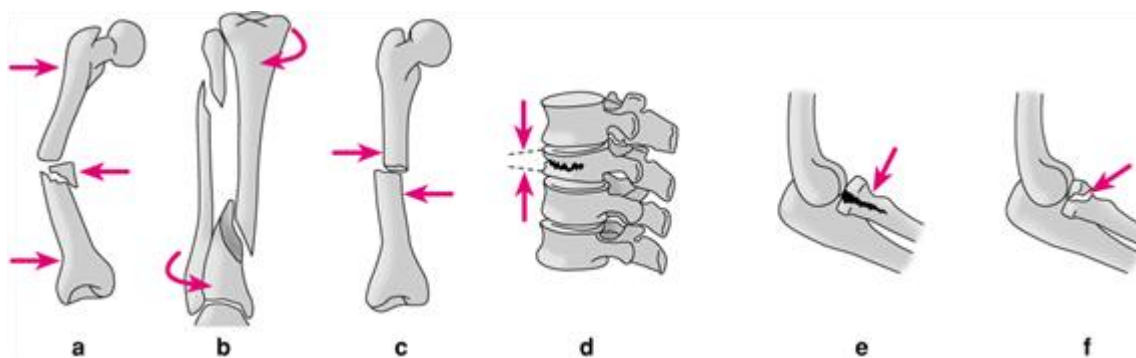
Azt az állapotot, amelynek bekövetkeztekor a szerkezet rendeltetésszerű használatra mechanikailag alkalmatlanná válik, határállapotnak nevezzük. Ebbe az állapotba kétféle úton juthat el a szerkezeti elem: egyszeri nagy erőbehatást (trauma) vagy ismétlődő apró erőbehatásokat (mikrotrauma) követően. A csont akkor törik, ha a teherbírását meghaladó külső erő éri. A törés típusa nagymértékben függ a behatás típusától: a csöves csontokon csavaró erő hatására spiráltörés, direkt behatásra haránttörés, hajlításra ékkitörés, nyíró erőre vésőtörés, szakításra peremtörés következik be, míg a spongiosus csontok nyomóerő hatására zömülnek (V.20. ábra).

A fentiekben a csont feszültségi és alakváltozási viszonyait nyugalomban lévő, rugalmas testet terhelő egyensúlyi erőrendszer képében elemeztük. A mozgó csontokra ható külső erőrendszer azonban általában nem

egyensúlyi. Ilyenkor a vizsgált csont feszültségállapotát nem csupán a külső erők határozzák meg, arra maga a mozgás is hatással van.



V.19. ábra. A combcsontban hosszirányú terhelés során futó erővonalak a) a tractus iliotibialis hiánya, b) megléte esetén



V.20. ábra. Gyakoribb típusos csonttörések. a) hajlítás ékkitöréssel; b) csavarás spiráltöréssel; c) nyírás haránttöréssel; d) kompresszió zömítéses töréssel; e) ékhatás hosszanti töréssel; f) szakítás peremtöréssel

Kóros és fáradásos csonttörések

Ha a csont valamilyen betegség hatására meggyengül és ennek megfelelően a szokásosnál kisebb terhelésre is eltörik, kóros (patológias) törésről beszélünk.

Az anyag fáradásának lényege, hogy az egyszeri maximálisan elviselt erőbehatásnál kisebb erő hatására is el tud törni, ha benne kis repedések keletkeznek, terjednek és az elégtelenné váláshoz megfelelő számú ismétlődéssel terhelődnek. Mivel a csont normálisan is jelentős erejű dinamikus terhelésnek van kitéve, logikus, hogy a fáradással szembeni ellenállása nagy. Nagy, ismétlődő megerőltetéseket követően időnként mégis kialakulhat a csont fáradásos törése. Ez a jelenség először sokat masírozó katonák lábközépcsontjain került észlelésre, ezért szokásos ezt a típusú törést Marsh-fracturának is nevezni. Mivel azonban időben elhúzódó folyamatról van szó, a csont még a repedés stádiumában beindítja a törésgyógyulási folyamatokat, a callusképződést. Így az élő csont fáradásos törése – bár jelentős fájdalom kíséri – sohasem jár a szokásos klinikai törési tünetekkel (kóros mozgathatóság, elmozdulás stb.).

2.1.3. V/2.1.3. A csontváz mint szervrendszer

A csontvázat felépítő 206 csont különböző módokon ízesül egymással, létrehozva így a fej, a törzs és a végtagok belső vázát. A csontváz súlya egy 70 kg-os embernél nagyjából 10 kg (15%), egy 20 g-os egérnél 1 g (5%), míg egy 7 tonnás elefántnál 2 t körüli (kb. 30%). Ez már önmagában komoly evolúciós-szelekciós ellenérv a túl nagy testtel szemben. Ha a hosszú csontok nem csöves felépítésűek lennének, hasonló igénybevételhez tömör felépítés esetén olyan nagy súlyú csontra lenne szükség, ami a szárazföldi mozgást eleve lehetetlenné tenné.

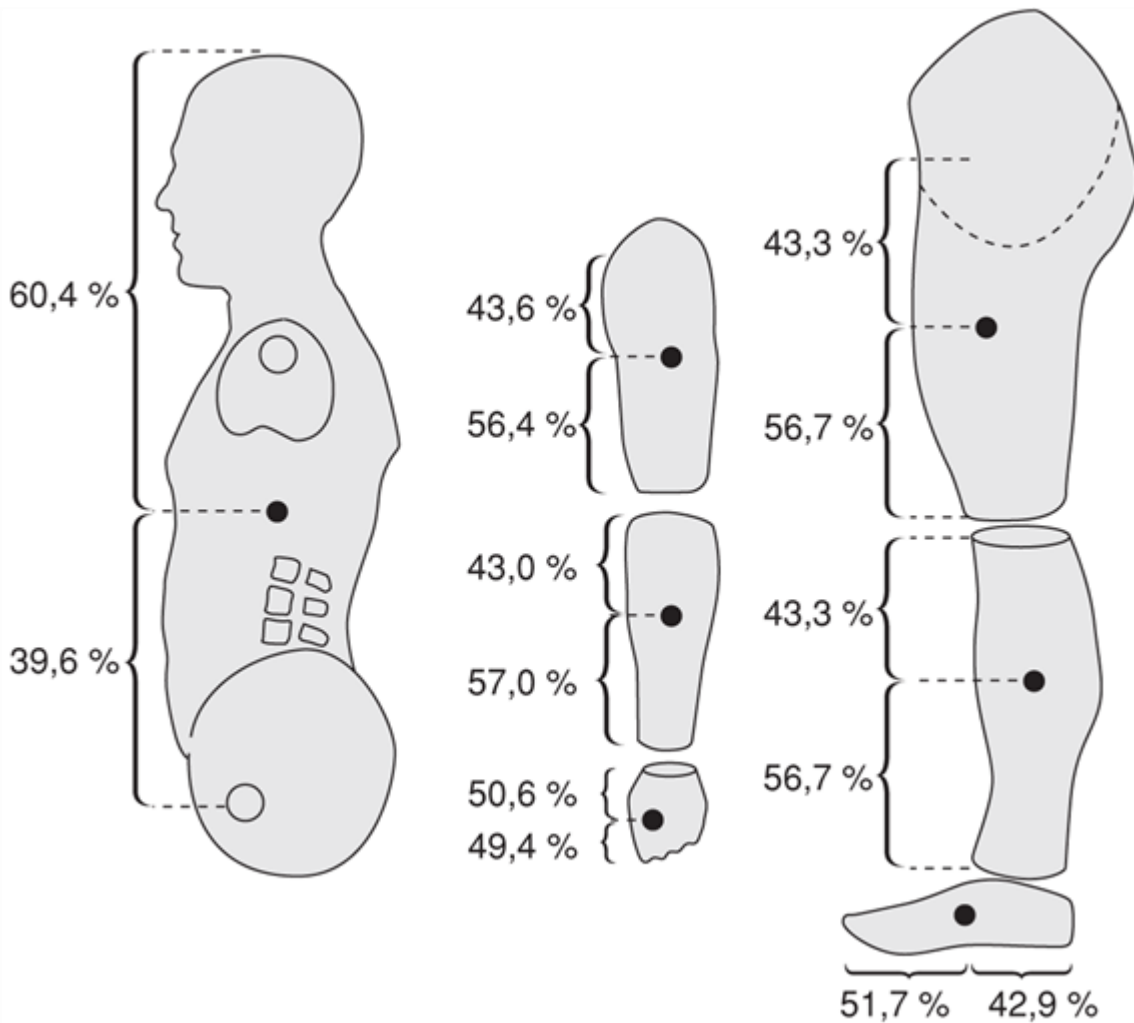
Statika

Az ember két lábon álló testhelyzete statikai értelemben annyit jelent, hogy a földön támaszkodó lábak egy-egy csuklós rúdban folytatódnak, melyeket a lábszár (tibia) és a comb (fémur) alkot; ezek egy-egy gömbben (a combcsont feje) végződnek, és ezen az építményen kerül elhelyezésre a felsőtest.

Mechanikai közelítések és számítások végzésénél nagyon fontos a súlypont vagy **tömegközéppont** meghatározása. A tömegközéppont a nehézségi erő támadáspontja. Négy lábú állatoknál ez a gerinc mentén előrébb vagy hátrébb helyezkedik el attól függően, hogy a mellső lábak és a fej, vagy a hátsó lábak és a farok tömege jelentősebb. A főemlősöknél a tömegközéppont jelentősen hátrtolódott. Ezáltal a mellső lábak egyre inkább alkalmassá váltak a fogásra, a hátsó lábak pedig az ugrásra, és megjelent az ülő helyzet lehetősége is. A két lábra állással összefüggésben az emberi test tömegközéppontja végül a II. keresztcsonti szelvény elülső felszíne magasságába került.

A test a legkülönbözőbb helyzeteket veheti fel mind nyugalomban, mind mozgásban, megváltoztatva ezzel az aktuális tömegközéppont helyzetét. Ezért a nyugalmi álló helyzeten túlmenően szükséges meghatározni számos tipikus vagy épp extrém mozdulat elemzése során is a test tömegközéppontját. Fizikai kísérletekben a tömegközéppont meghatározásának egyik legegyszerűbb kísérleti módszere, ha egy testet egymás után két különböző pontjánál fogva felakasztunk és meghatározzuk az így kapott súlyvonalak metszéspontját. Emberi testek esetében ez a módszer aligha lenne alkalmazható. A megoldást Dempster módszere adja, mely abban áll, hogy a különböző testrészekre – azokat külön-külön testként felfogva – meghatározzuk a tömegközéppontokat, és a testrészekből összerakott szervezet tömegközéppontját ezekből határozzuk meg. A módszer lehetőséget ad

arra is, hogy az egyedi alkati sajátosságokat (elhízási típusok, végtaghiányok) is figyelembe vegyük (V.21. ábra).



V.21. ábra. Dempster tömegközéppont- meghatározási technikája

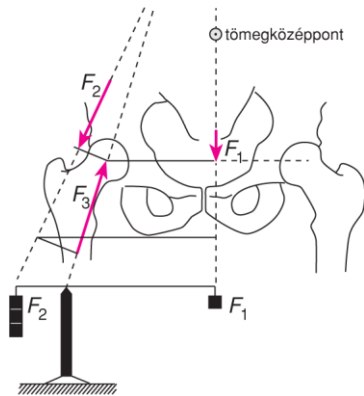
A különböző testhelyzetek felvétele csak az izomerő aktív megtartóerejével lehetséges. Mindazonáltal két lábon álláskor normál esetben létezik egy olyan testhelyzet, melynek megtartásához csak minimális izomerő szükséges. Ezt a helyzetet energiatakarékos testhelyzetnek nevezzük. Az energiatakarékos helyzeten kívül már jóval több izommunka szükséges bármely egyéb testhelyzet megtartásához.

Speciális helyzet az egy lábón állás (V.22. ábra). Ilyenkor a test tömegközéppontja kismértékben a nem terhelt (felemelt) oldal irányába tolódik el, ugyanis a Dempster-séma értelmében a támaszkodó végtag súlyával nem kell számolni. Az emberi járás fajspecifikus sajátosságaként a felemelt végtag oldalán azonban ennek ellenére a medencefél a vízszintes fölé emelkedik. Ennek feltétele, hogy a támaszkodóoldalon a csípő körüli izmok (V.22. ábra, F_2 erő) képesek legyenek aktívan kompenzálni, illetve kissé túlkompenzálni a testsúly (F_1 erő) hatására létrejövő forgatónyomatékokat. Ilyenkor egy kétkarú emelő alakul ki, ahol a combcsont fejének középpontja a forgáspont, és az erőkart, illetve a teherkart a csípőtávoltító izmok, illetve a test tömegközéppont támadáspontja (F_2 és F_1 erővektorok végpontja) jelöli ki. A combcsontfejre azonban mind az izomerőből, mind a testsúlyból származó erők együttesen ($F_1 + F_2 = F_3$) hatnak. A csípőízületet alkotó csontok geometriája és a testsúly együttesen határozza meg a csípőízületben ható erőket. Ha az aktív erő nem elegendő az egyensúlyi rendszer kialakítására, a felsőtest döntésével a test tömegközéppontját a támaszkodó oldal felé közelítve lehet az F_1 erő erőkarját csökkenteni, s így a nem alátámasztott medencefelet közel vízszintesen megtartani.

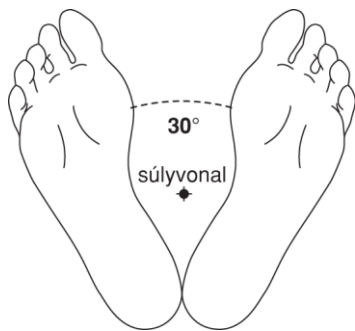
További fontos statikai kérdés a test **alátámasztása**. A két lábára állással az alátámasztási pontok csökkenésének megfelelően megkétszereződött a terhelés. Ezt a szervezet az állati patákhoz és mancsokhoz képest viszonylag nagy feltámaszkodást biztosító talpakkal kompenzálja. A lábak 3-3 támaszkodási ponttal (sarokcsont talpi gumója, I. és V. lábközepcsont fejecse) és a közöttük kifeszülő hosszanti és harántboltozattal biztosítják

egyrészt a stabilitást, másrészt a test rugalmas alátámasztását. Nyugalmi vagy normál helyzetben a lábak hossz tengelye egymással mintegy 30° -os szöget zár be, és a test súlyvonala a belbokákat összekötő vonal előtt halad el (V.23. ábra).

A szerkezeti rugalmasság nem egyedül a lábak sajátja. A 32 csigolyából álló gerinc például oldalirányból nézve kettős S alakú görbületet mutat. Egy egyenes rúd alátámasztásához képest egy n hajlatot viselő rúd $n^2 + 1$ -szeres alátámasztási rugalmasságot mutat. A gerinc, 3 élettani teherviselő görbületét alapul véve, az egyenes rúddhoz képest $3^2 + 1 = 10$ -szeresen rugalmas alátámasztást biztosít a koponyának.



V.22. ábra. Az egy lábon állás sémája Pauwels után. Mivel az F_1 súlyerő erőkarja kb. háromszor nagyobb, mint az F_2 ellensúlyozó izomerő erőkarja, az F_2 izomerő a támaszkodó láb nélkül számított testsúly háromszorosa kell legyen az egyensúly megtartásához. Az ízületben $F_1 + F_2 = F_3$ erő hat a combcsont fejére



V.23. ábra. A test súlyvonalának vetülése a támaszkodó lábakhoz viszonyítva

Kinetika

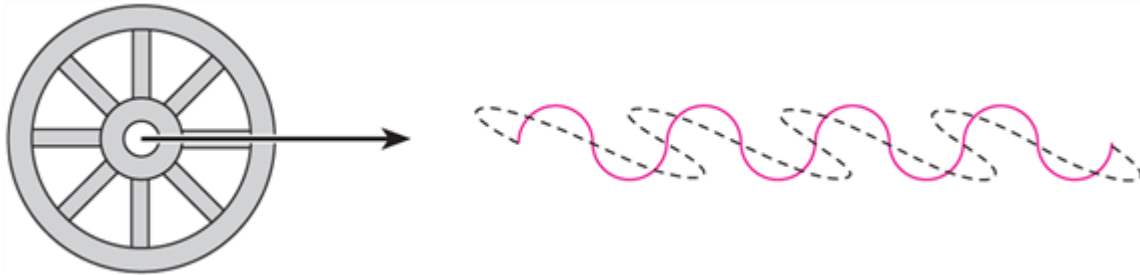
A testeknek erő hatására, a külső szemlélő által észlelhető módon, térben és időben történő hely-, illetve helyzetváltozásával foglalkozó tudományágat külső biomechanikának is nevezik.

A mozgáshoz motor, energia és meghajtott szerkezet szükséges. Az ember esetében a motor az izomzat, a meghajtott szerkezet az egyben a test belső megtámasztását, külső alátámasztását és megkapaszkodását lehetővé tevő csontváz.

A helyváltoztatás az emberi élet alapvető szükséglete, melynek emberre legjellemzőbb módja a járás. A járás tanulás útján elsajátított összetett célmozgás, mechanikai értelemben a test tömegközéppontjának térbeli elmozdítása. A négy lábúak helyváltoztatásában fontos szempont, hogy a testet előre toló erőnek a tömegközépponton át kell haladnia, mert ha nem így lenne, az előre toló erő a tömegközépponton áthaladó függőleges tengely körül forgatónyomatékokat is kifejtené, és a test minden lépésnél jobb- vagy balfelé is elfordulna. Két lábon járáskor ez a szempont már nem elsődleges, mivel a járáshoz szükséges erőt kifejtő végtagok nem a súlypont előtt és mögött, hanem alatta, a súlyvonalhoz igen közel, majdnem egy vonalban helyezkednek el, a horizontális keresztmetszet pedig a súlypont magasságában erősen lecsökkent a négy lábúakéhoz képest, és szimmetrikus. Az ennek ellenére mégis fennálló oldalirányú forgatónyomatékok megszüntetésére a test összetett mozgása járás közben a súlypontot állandóan áthelyezi.

Energetikailag egy test térbeli elmozdításának a legtakarékosabb módja az, ha a tömegközéppont egy egyenes vonal mentén halad, amire a legjobb példa a kerékbe dugott tengely tovahaladása. Harmonikus járáskor nem ez történik, hanem a test tömegközéppontja egyidejűleg egy fel-le és egy ezzel kombinálódó jobbra-balra irányú mozgást mutat. A térben ezt egy vízszintes és egy függőleges síkú szinuszgörbe kombinációjával lehet modellezni (V.24. ábra).

Ez az ingamozgás többletenergiát igényel az egyenes vonalú mozgáshoz képest. A kitérés azonban normál járás során egyik síkban sem nagyobb 5 cm-nél. Természetesen minél nagyobb a kitérések amplitúdója, annál nagyobb energiát igényel a járás. Tipikus példa erre a rosszul csatlakoztatott és rosszul megválasztott súlyú alsóvégtag-pótló protézisek esete, amikor a durva sántítás miatt a protézisviselők csak jelentős többletmunka árán képesek a járásra.



V.24 ábra. Az egyenes vonalú és a kettős sinusos mozgási pálya

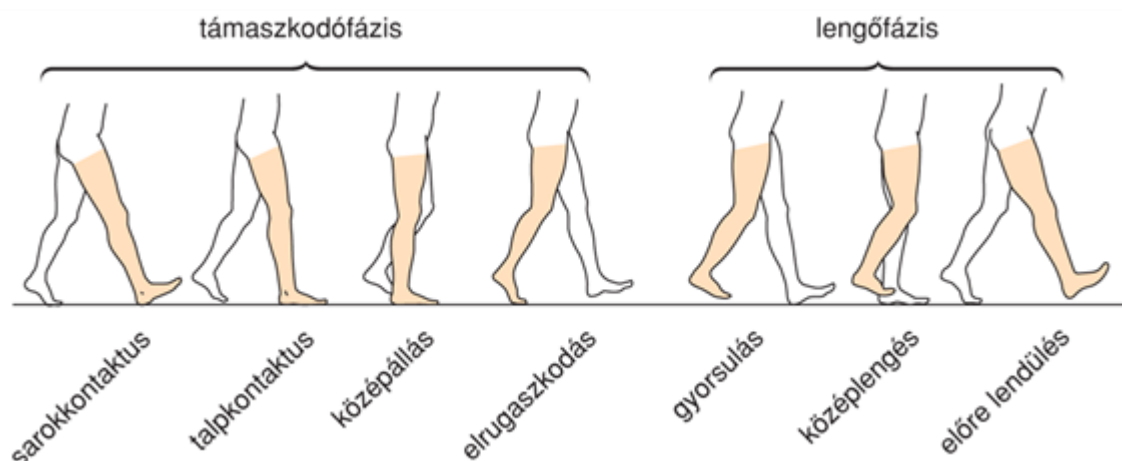
Az emberi járás kinetikai elemzése

A járás elemzése során általában az egyik végtag mozgásait vesszük alapul. Amennyiben a járás nem harmonikus és nem szimmetrikus, akkor természetesen az elemzést mindkét végtagra vonatkoztatva elvégezzük. A járás alapegysége a ciklus. Ciklus alatt azt a két lépést értjük, melynek során a vizsgált végtag a kiindulópályára tér vissza. A ciklust – egy adott lábat tekintve – 2 fő fázisra lehet osztani, a támaszkodó- és a lengő főfázisra, amelyek összesen 7 további fázisra oszthatóak. Ebből a támaszkodó főfázisra 4, a lengő főfázisra 3 fázis esik (1. ábra).

A támaszkodófázis a sarokkontaktussal kezdődik, ami egyben a test sebességének fékeződésével is jár. A támaszkodó láb ezután a talp teljes felszínén támaszkodik, ez a talpkontaktus fázisa. A középpályás fázis akkor következik be, amikor – továbbra is teljes talpi terhelés mellett – az ellenoldali lengő alsó végtag a támaszkodó végtaggal egy vonalba kerül. Ezt követően a talp előre gördül és megkezdődik az elrugaszkodás fázisa, melynek során a lábujjak erőteljes hajlításának következtében a végtag elemelkedik a földről. Az elrugaszkodást az annak következtében kialakuló gyorsulás fázisa követi. A testsúly inentől az ellenoldali végtagra helyeződik át, ahol a sarokkontaktus a járás lendületét ismét lassítja, miközben a vizsgált végtag megkezdte előre lendülését. Amikor eléri a másik oldali támaszkodó végtag vonalát, a középlengés fázisában van. A mozgás folytatásaként az előre lendülés fázisába kerül, majd sarokkal ismét a földre támaszkodik, kijelölve ezzel a lépéshosszt, és itt ér véget a járás egy ciklusa. Ahhoz, hogy a járás egyáltalán bekövetkezhesen, négy alapvető feltétel szükséges:

- Mindkét alsó végtag képes legyen összecsuklás nélkül alátámasztani a testet.
- A lengő fázisban a statikus és dinamikus egyensúlyt egyaránt fenn kell tudni tartani.
- A lengő lábat olyan helyzetbe kell hozni, hogy képes legyen átvinni a támaszkodás szerepét.
- Elegendő erővel kell rendelkezni a szükséges végtagmozgásokhoz és a törzs előrehaladásához.

Mindennek megfelelően a járásban részt vevő izmok különböző részfeladatokat látnak el: csökkentik az ütközést, egyensúlyoznak, biztosítják az elrugaszkodást, illetve a levegőben lévő végtag előrelendítését és megtartását. Vízszintes járás során a csípő- és térdizületet mozgató izmok munkavégzése a legjelentősebb. A járás jellegét nagymértékben befolyásolja a viselt cipő is. Lapos sarkú cipőt viselő férfiak és nők járásmintája nem tér el egymástól, magas sarkú cipőt viselő nők esetében azonban a láb szerepe megváltozik, és ez kihat a térd és a medence állására is. Az átlagos járás sebessége 1,45 m/s, lépésszáma 112/min, lépéshossza 53 cm.



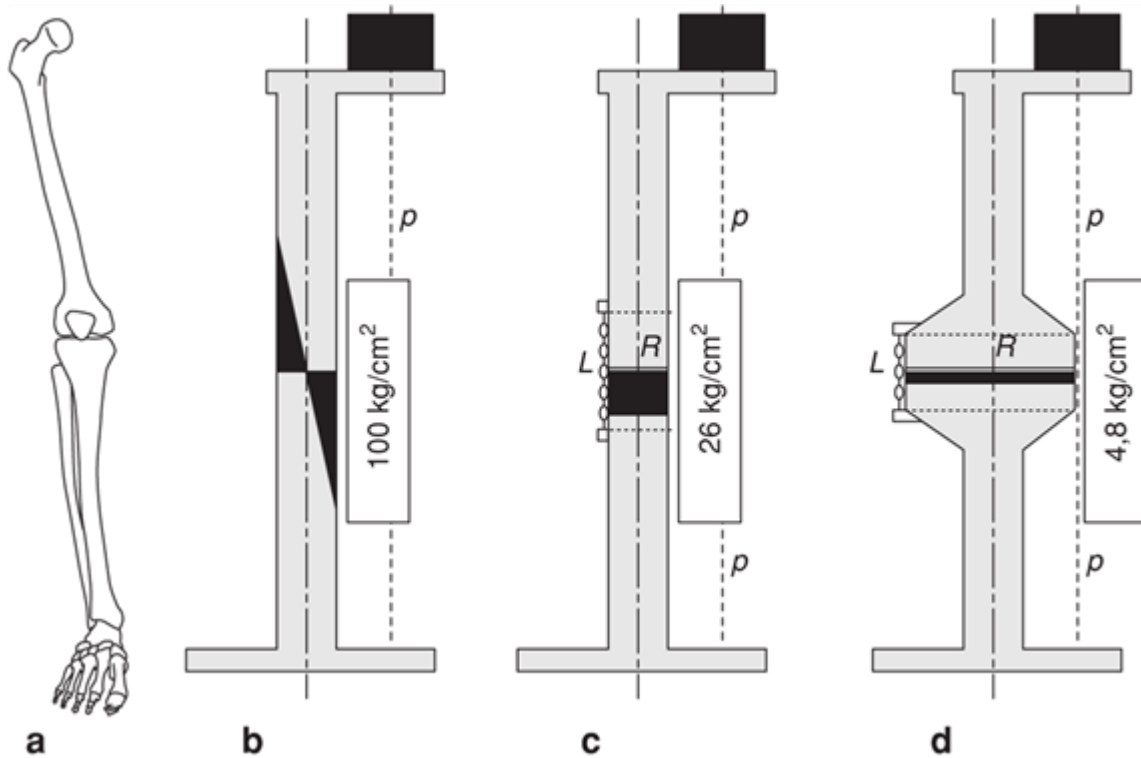
A járási ciklus fázisai

2.2. V/2.2. Az ízületek biomechanikája

A csontvégeken porc található. Attól függően, hogy a csontvég ízesül vagy nem, és ha ízesül, milyen ízületet alkot, különböző szöveti szerkezetű és anyagi jellemzőkkel rendelkező porcborítások lehetnek: (1) bordaporc (ízület nélküli csontlehangonyzás); (2) rostos porc (nem csúszó ízesülő felszínek); (3) hyalinporc (csúszó ízületi felszínek). A mozgásszervrendszer funkcióit röviden úgy is összegezhetnénk, hogy a csontok a testet vázként tartják, a váz egyes szegmentumait az ízületek csuklópontokként elmozdulásokra alkalmassá teszik, a csuklópontokat szalagok stabilizálják, s az izmok ezt a rendszert olyan motorként működtetik, melynek mozgatóerejét az inak áttételként közvetítik. Az ízületek mozgásainak tanulmányozása a fiziológiás mozgások és a stabilitás, a degeneratív kórképek és az instabilitások, illetve az ízületpótló protézisekkel kapcsolatos kérdések megértése szempontjából ad fontos alapokat.

2.2.1. V/2.2.1. Statika, reológia

Pauwels nevéhez fűződik a statika és reológia fogalmainak a mozgásszervekkel való első megfeleltetése. Klasszikus sémái közül a testsúly függvényében a térdízület körül kialakuló feszültségek alakulását mutatjuk be (V.25. ábra). A csontok alakja és ízesülései a különböző igénybevételek hatására ébredő erők eloszlását és lefutását alapvetően meghatározzák. A combcsontot sematizáló T alakú idom felső végének terhelése – megegyezően a normál anatómiai viszonyokkal – nem az azt alátámasztó idomrész (combcson és lábszár) vetületében történik: mechanikai értelemben ilyenkor külpontos terhelésről beszélünk. Ha ízület nélküli rúddal helyettesítjük a láb csontjait, a külpontos terhelés miatt igen nagy feszültségek ébrednek a kérgi részekben (V.25b. ábra). Ha a rúd közepére ízületet tervezünk, külpontos terheléssel átellenes oldalon az L láncra van szükségünk az egyensúly megtartásához. Ilyenkor a láncban jelentős feszültségek ébrednek, ami a rudakat részben tehermentesíti (V.25c. ábra). Ha az ízesülő felszíneket kiszélesítjük (V.25d. ábra), akkor az ott mérhető feszültségek a felület növelésével fordított arányban csökkennek.



V.25. ábra. Az alsó végtag és műszaki alternatíváinak statikai sémája: a) A sematizált jobb alsó végtag; b) merev rúd külpontos terheléssel, nincs térdízület; c) Ízesülő rudak külpontos terheléssel, a terheléssel ellentétes oldalon egy kötéll szükséges a stabilitás fenntartásához; d) mint c), de a térdízülethez hasonlóan kiszélesedett ízesülős felszínnek kisebb nyomásterheléssel

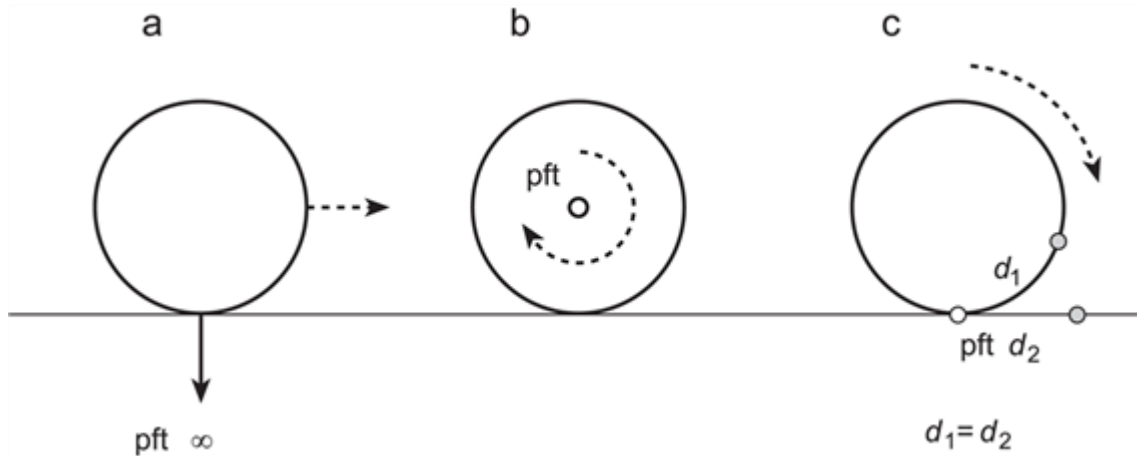
2.2.2. V/2.2.2. Kinetika

A mozgások elemzését az elmozdulás típusa és a forgástengely helyzete alapján végezzük. Az elmozdulás típusa alapján beszélhetünk lineáris és rotációs mozgásokról. A forgástengely pillanatnyi helyzetét pedig mindig a zéró elmozdulást mutató pontként határozhatjuk meg. Ezek alapján három fő mozgástípus különböztethető meg. (1) A **csúszás** tisztán lineáris, translációs elmozdulás, melynek során a mozgó testnek mindig ugyanaz a pontja érintkezik a rögzített felület mindig más pontjával. Ha a rögzített felület sík, a pillanatnyi forgástengely a végtelenben lesz, ha görbe, akkor a görbület középpontjában (V.26a. ábra). (2) A **rotáció** tisztán forgómozgás, melynek során éppen az ellenkező eset áll elő: a mozgó testnek mindig más pontja érintkezik a rögzített felületnek mindig ugyanazon pontjával. A pillanatnyi forgástengely a mozgó szegmentum görbületi középpontjában helyezkedik el (V.26b. ábra). (3) A **gördülés** az előző két mozgás keverékeként is felfogható, ahol a fix és a mozgó felszín érintkezési pontjai állandóan változnak, és az érintkező ívek hosszúsága mindkét felszínen azonos hosszúságú. A pillanatnyi forgástengely az aktuális érintkezési pontban helyezkedik el (V.26c. ábra).

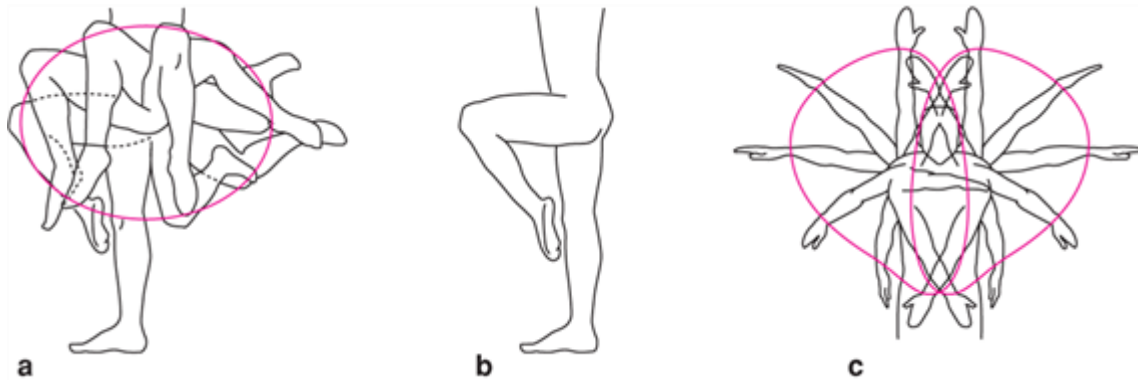
Még sarkítottabban fogalmazva azt mondhatjuk, hogy egy test a környezetéhez képest lineáris és forgómozgást végezhet, melynek egyik köztes határeset a gördülés. Végül soron minden mozgás forgásra vezethető vissza. Ha a vizsgált test forgástengelye a végtelenben van, akkor sík felszínen létrejövő lineáris mozgásról, ha annak érintkező felszínén, akkor gördülő mozgásról, ha a vizsgált test geometriai középpontjában, akkor forgómozgásról beszélünk. A fenti elemzést elvégezhetjük a tér három fő síkjára képzett vetületekben, megállapítva, hogy melyik síkban van lineáris, illetve forgómozgás, melyek – mint láttuk – nem zárják ki egymást. Ennek az elemzésnek a révén megkapjuk, hogy a vizsgált test a környezetéhez – azaz a másik kapcsolódó testhez – képest hányféle mozgást-elmozdulást tud végezni, s ezt **szabadsági foknak** nevezünk. Ha egy testnek a derékszögű koordináta-rendszer mindhárom fő tengelye mentén, illetve tengelye körül is van mozgáskomponense, akkor a szabadsági foka maximális, azaz 6, míg egymáshoz képest elmozdulásra képtelen testek szabadsági foka 0, hasonlóképpen a többatomos gázok molekuláris szabadságfokaihoz.

Az ízületi mozgások legtöbbje leírható minden síkban a három alapmozgásból (csúszás, forgás, gördülés) kettőnek a kombinációjaként. Az ízületi mozgásokat a tisztán mechanikai megfontolásokon túlmenően számos egyéb szempont alapján is lehet csoportosítani. Amint az V.27. ábra mutatja, alapvetően el kell különíteni a

tisztán a csontos-porcós geometria által meghatározott ízületi mozgásokat (pl. csípőízület), a nagyjából szalagok-inak által stabilizált mozgásoktól (pl. térdízület), valamint a nagyrészt az izomegyensúly által meghatározott mozgáspályáktól (pl. vállízület).



V.26. ábra. A mozgási alaptípusok: a) csúszás; b) forgás; c) gördülés. pft: pillanatnyi forgástengely



V.27. ábra. Az ízületi mozgások a különböző mozgáspályák alapján. a) csípőízület (3 szabadsági fok), döntően csontosan meghatározott mozgáspálya; b) térdízület (2 szabadsági fok), döntően a szalagok által meghatározott mozgáspálya; c) vállízület (3 szabadsági fok), döntően az izomtónus és izomegyensúly által meghatározott mozgáspálya

2.2.3. V/2.2.3. Tribológia

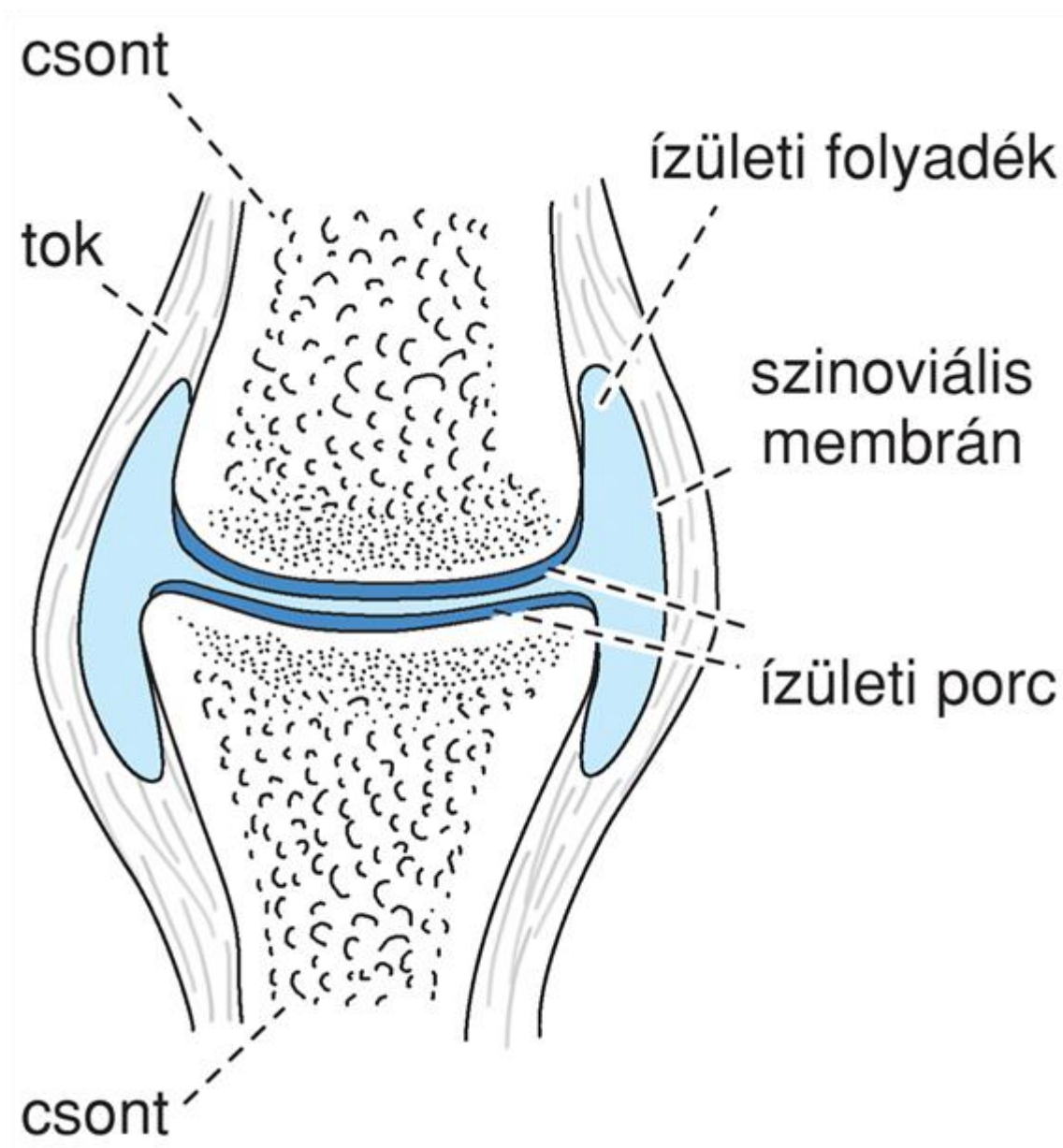
A tribológia az a műszaki tudományág, mely az anyagok érintkező felszíneinek mozgás közben létrejövő károsodásaival, illetve azok mértékének csökkentésével foglalkozik. Az ízületek működésének tanulmányozása során, érthető módon kiemelt jelentősége van a műszaki megközelítésnek. Az alábbiakban ízesülő felületek súrlódási, kopási, sérülési és kenési kérdéseivel, majd az ízületek néhány tribológiai vonatkozásával foglalkozunk. Élő struktúrákról lévén szó szokásos biotribológiáról is beszélni.

A **súrlódás** fogalma azokat a jelenségeket foglalja magában, melyek érintkező testek viszonylagos elmozdulásával, illetve annak akadályoztatásával kapcsolatosak. Megkülönböztethetünk csúszási és tapadási súrlódást, attól függően, hogy az egyik test a másikon csúszásban van, vagy annak nyugalmi állapotból való megindításáról van szó. A súrlódást számos tényező határozza meg: (1) elemelkedést okozó egyenetlenség, (2) egyenetlenségek összekapaszkodása, amit nyírás követ, (3) egyenetlenségek összekapaszkodása, amit plasztikus deformáció és karcolás követ, (4) adhézió, amit nyírás követ, (5) elasztikus hiszterézis, (6) adhézió vagy egyenetlenségek összekapaszkodása, amit szakítás követ, (7) elektrosztatikus jelenségek, végül (8) viszkózus jelenségek.

A **kopás** és a **felületkárosodás** fogalma a tribológiában az érintkező felszíneken a mozgásokkal összefüggésben létrejövő progresszív állományvesztést jelenti. Mechanizmusát illetően (1) abráziós, (2) adhéziós, (3) fáradásos és fémek esetében (4) kémiai vagy korróziós eredetű kopásról beszélhetünk. Fontos megjegyezni, hogy a súrlódás és a kopás mértéke nem feltétlenül arányos egymással.

A **kenés** az a mechanizmus, ami a súrlódás és/vagy a kopás mértékét csökkenti. Ez lehet szilárd, folyékony vagy gázemű anyag is. Alapvető formája a hidrodinamikusan kenés, mely esetén nincs direkt érintkezés a mozgó felzínék között, hanem ott filmréteg képződik. Ennek nyomása a felzínék geometriájától és az elmozdulás jellegétől, súrlódása pedig alapvetően a kenőanyag viszkozitásával összefüggő nyírástól függ.

A természetes ízületek sémás felépítését a V.28. ábra mutatja. Az ízesülö csontvégeket vékony rugalmas porc borítja, melyek között a tojásfehérjéhez való makroszkópos hasonlósága miatt szinoviális folyadéknek nevezett kenőanyag képez filmszerű réteget, ezáltal hidrodinamikusan kenést biztosít. Az ízületet tok veszi körül, melynek mechanikai funkcióin túlmenően belső fala révén szerepe van a szinoviális folyadék termelésében és felszívódásában, valamint a folyadék elfolyásának megakadályozásában.



V.28. ábra. Ízület sémás felépítése

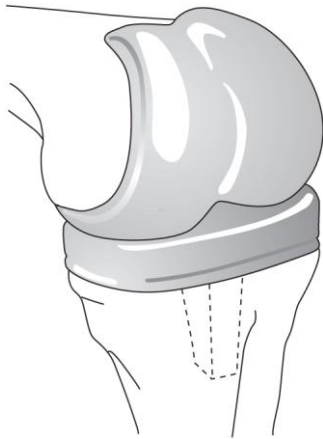
Ízületpótló protézisek

A működésképtelenné vált beteg ízületek funkcionális pótlása a mozgásszervi sebészet egyik nagy vívmánya. A kezdeti, most már több mint egy évszázada lezajlott, naiv próbálkozásokat követően a fémkohászat, a műanyagipar, a vegyipar, a finomgépészet és az orvosi tudományok együttes fejlődésének és összefogásának köszönhetően az ízületpótló endoprotézisek beültetése a XX. század közepétől a rutin orvosi feladatok közé sorolódott. Külön tudomány foglalkozik a bioanyagokkal, melyek három nagy csoportját a fémek (rozsdamentes

acél és titán, kobalt, króm nikkell, vanádium és alumíniumötvözetekkel), a műanyagok (ultranagy molekulásúlyú polietilén) valamint a csontcement poli(metil-metakrilát) alkotják. Az ízületpótló protézisek funkciójukban az eredeti ízület legfontosabb mozgásait és szükséges stabilitását próbálják biztosítani. Alakjukat legtöbbször a természetes ízület főbb geometriai jellegzetességeinek másolásával nyerik (1. ábra).

A biotribológiai szempontok érthető módon itt is nagy jelentőséggel bírnak. Az elkopott protézis cseréje a szervezetet nagymértékben igénybe vevő, és technikailag is nehéz beavatkozás. Ugyanakkor a beültetett protézis kopási termékei az ízület környezetébe kerülve nem tudnak szabadon eliminálódni a szervezetből, azokat az élő szövetek különböző szöveti és immunológiai folyamatok révén próbálják eltüntetni, aminek gyulladáso és allergiás következményei lehetnek.

Az endoprotézisek készítésénél nagyon fontos az egyes komponensek alapanyagának és az egymással érintkező mozgó terhelési felszínek geometriájának és felületkezelésének kérdése. A kenőanyagot itt is a szervezet szinoviális folyadéka biztosítja, a tervezésnél ehhez az adottsághoz is igazodni szükséges. A másik fontos probléma az idegen anyagok rögzítése a csontszövethez. Ez történhet pusztán mechanikai úton (befeszüléssel vagy csavarokkal) vagy ragasztással (csontcement). Az élő-élettelen határfelületek hosszú távú mechanikai viselkedése azonban attól függ, hogy a csont természetes közegként vagy irritatív ágensként érzékeli az implantátumanyagokat, valamint a rajtuk keresztül a csontot érő mechanikai behatások a csontot csontképzésre vagy épp csontfelszívódásra készítik.



Térdízületi endoprotézis

6. fejezet - VI. rész – A molekuláris és sejtdiagnosztika fizikai módszerei

Az élőlények életfolyamataiban a sejtek és ezeken belül a makromolekulák meghatározó szerepet játszanak. A genetika hallatlan fejlődése az élettudományi kutatásokban – viszonylag hirtelen változással – a jelenségek molekuláris értelmezésére irányította a figyelmet. A molekuláris biológia eredményei azonban nemcsak egyes molekulák jelentőségére hívták fel a figyelmet, hanem arra is, hogy a makromolekulák szerkezetének óriási szerepe van az élettani funkciók betöltésében. Azt a közismert példát említjük meg, hogy a hemoglobin aminosav-sorrendjének egyetlenegy konkrét aminosavat érintő megváltozása már elegendő ahhoz, hogy a sarlósejtes anaemia betegségét kiváltsa. A genetikai kód GAG nukleotidszekvenciája GTG-re változva a teljes fehérjeszerkezetet átalakítja, és a torzult hemoglobin hatására a vörösvértestek külső formája is megváltozik jellegzetesen sarlószerű alakúra.

Makromolekulák, makromolekuláris komplexek, sejtorganellumok és sejtek tulajdonságai között számos fizikai tulajdonság található, amelyek lehetőséget adnak fizikai módszerek alkalmazására eme élettani egységek felismerésére, kóros elváltozásaik esetén az elváltozás molekuláris szerkezeti alapjainak felderítésére.

Ezért a nemzetközi klinikai gyakorlat egyre inkább igyekszik támaszkodni ezekre az ismeretekre, és a fizikai, fiziko-kémiai módszerek egyre inkább megjelennek a rutin laboratóriumi diagnosztika szintjén. Úgy éreztük, hogy érdemes a legfontosabb módszereket összefoglalóan áttekinteni akkor is, ha a terület állandó fejlődése miatt nem léphetünk fel a teljesség igényével. A jelenleg még csak az élettudományi kutatómunkában használt módszereket a X. fejezetben tárgyaljuk.

1. VI/1. Szedimentációs és elektroforetikus módszerek

1.1. VI/1.1. Szedimentációs módszerek

Részecskék, makromolekulák (fehérjék, nukleinsavak, egyéb polimerek) vizsgálatakor gyakran meghatározandó paraméter a részecsketömeg vagy az alak. A fizikai-kémia molekulatömeg meghatározásra használatos módszerei (fagyáspontcsökkenés, forráspont-emelkedés) makromolekulákra nem vagy csak korlátozottan alkalmazhatók, mert a mérhető fagyáspont vagy olvadáspont eltolódáshoz szükséges igen nagy koncentrációk 10^4 dalton feletti molekulatömegek mellett nem biztosíthatók. Ilyen tartományban az ultracentrifugás és fényszórásos vizsgálatok adnak többek között lehetőséget a molekulatömeg meghatározására.

Tömeg mérésére elfogadott módszer, hogy a szóban forgó tömegnek egy ismert erő hatására bekövetkező gyorsulását mérik meg. Oldatban lévő molekulák esetén – ha a ható erő a nehézségi erő – ez a módszer nem célravezető, mert a környező oldószer-molekulák termikus mozgása a nehézségi erő hatását elnyomja. Önként kínálkozik az a megoldás, hogy a gravitációs erő helyett nagyobb, mesterségesen előidézett erőket alkalmazzanak. Ilyen körülmények például gyors forgatással biztosíthatók. Ezáltal csak annyi változik, hogy a nehézségi gyorsulásnál (g -nél) sokkal nagyobb gyorsulások ($r\omega^2$) érhetők el.

1.1.1. VI/1.1.1. Szedimentációs sebességi módszer

Tekintsünk egy függőleges tengely körül ω szögsebességgel forgó edényt, amelyben m tömegű molekulákat tartalmazó oldat van. Az oldott anyag sűrűsége ρ , az oldószeré ρ_0 . Ha forgó koordináta-rendszerből vizsgáljuk az erőket, akkor az m tömegre három erő hat (lásd VI.1. ábra):

a súrlódási erő

$$F_s = f\mathbf{v}, \quad (\text{VI.1})$$

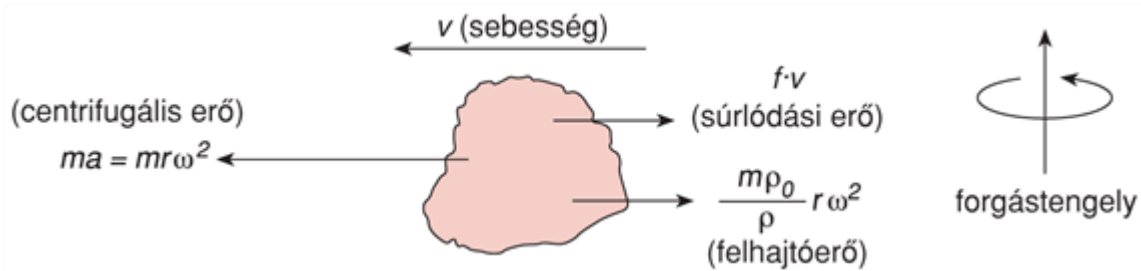
ahol f az ún. alakfaktor, v a részecske sebessége; a felhajtóerő

$$F_f = \rho_0 V r \omega^2 = \frac{m}{\rho} \rho_0 r \omega^2$$

(VI.2)

ugyanis $V = m/\rho$, g helyett pedig a forgásból származó gyorsulást kell alkalmazni ($r\omega^2$); valamint a centrifugális erő

$$F_c = m r \omega^2. \quad (\text{VI.3})$$



VI.1. ábra. Centrifugálás során fellépő erők

A centrifugális erő és a felhajtóerő különbsége addig mozgatja a részecskéket gyorsuló mozgással a tengelytől kifelé, amíg (a sebesség növekedésével) az ellenkező irányú súrlódási erővel egyensúlyba nem kerül:

$$f v = m r \omega^2 - \frac{m}{\rho} \rho_0 r \omega^2 = m r \omega^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right)$$

(VI.4)

Ezek után a részecske sebessége már csak olyan arányban nő, ahogy távolodik a forgástengelytől. Vegyük észre, hogy az

$$S = \frac{v}{r \omega^2} = \frac{m \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right)}{f}$$

(VI.5)

mennyiség állandó és idő jellegű (sebesség/gyorsulás). Az S neve szedimentációs állandó, egysége 1 svedberg = 10^{-13} s. Az ultracentrifugálás segítségével meghatározott jellemző paraméter annak a Svedbergnek a nevét viseli, aki a módszert kitalálta. Összetartozó v és $r\omega^2$ adatokból S meghatározható, aminek segítségével:

$$m = \frac{fS}{1 - \frac{\rho_0}{\rho}} \quad (\text{VI.6})$$

E formulának az a hátránya, hogy pontos tömegadatokhoz az f alakfaktor ismerete szükséges. Ismeretes viszont, hogy az f alakfaktor és a D diffúziós együttható a következő módon függ össze:

$$f = \frac{kT}{D} = \frac{RT}{ND}$$

(VI.7)

ahol k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet, $N = 6 \cdot 10^{23}$ az Avogadro-szám. Ezek után

$$m = \frac{RTS}{ND \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right)}$$

(VI.8)

Ily módon a szedimentációs sebességi módszert diffúziós mérésekkel kombinálva a molekula alakjára tett minden további feltevéstől függetlenül megbízható móltömegadatokat kapunk, ha ismert a vizsgált anyag ρ sűrűsége. A ρ meghatározható többek között sűrűséggradiensben való centrifugálással (lásd: következő rész).

A módszer a molekulatömegén kívül a molekula méreteinek meghatározását is lehetővé teszi, ha az alakra vonatkozóan meghatározott ismeretek rendelkezésre állnak.

A tapasztalat szerint a szedimentációs állandó bizonyos kölcsönhatások miatt koncentrációfüggést mutat, és növekvő koncentrációval csökken. Ezért általában a nulla koncentrációra extrapolált S érték segítségével szokás az m molekulatömeget meghatározni.

Ultracentrifugás méréseknél fontos szerepe lehet az ionerősségnek, ti. amennyiben az ülepedő molekuláknak töltése is van, a korábbiakban figyelembe vett erőhatásokon túl intermolekuláris elektrosztatikus erők is befolyásolják az ülepedés sebességét.



Theodore Svedberg (1884–1971) Nobel-díjat kapott 1926-ban a diszperz rendszerekkel kapcsolatban végzett munkáiért.

1.1.2. VI/1.1.2. Szedimentációs egyensúlyi módszer

Ennél a módszernél meg kell várni, amíg a molekulák átlagos ülepedési sebessége nulla lesz. Ekkor az ülepedő, „szedimentáló” mozgás és a hőmozgás (diffúzió) között egyensúly áll be. Ha a molekulákra csak a centrifugális erő hatna, egy idő után minden molekula a lehető legkisebb energiájú helyen, az edény alján gyűlné össze. A hőmozgás termikus energiája azonban a molekulák egy részét nagyobb energiájú állapotba viszi. A tengelytől mért két különböző r_1 , illetve r_2 távolságban az n_1 és n_2 molekulakoncentráció arányát a Boltzmann-eloszlásból (I/3.1. fejezet) nyerhetjük:

$$\frac{n_1}{n_2} = e^{-\frac{E_1 - E_2}{kT}}, \quad (\text{VI.9})$$

ahol E_1 és E_2 az r_1 és r_2 helyen lévő molekulák helyzeti energiája.

A (VI.9)-ből nyilvánvaló, hogy az n_1/n_2 arány annál jobban eltér az 1-től, minél nagyobb (adott r_1 és r_2 mellett) a potenciális energiák különbsége. Ez a különbség egyenlő azzal a munkával, amellyel egy molekulát az r_2 helyről az r_1 helyre lehet vinni (ehhez hasonló számolás látható a III/1.3.2., illetve III/1.3.3. részekben).

$$E_1 - E_2 = \frac{m}{2} \omega^2 \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right) (r_2^2 - r_1^2)$$

(VI.10)

Ez az eredmény azt jelenti, hogy a molekulák annál szűkebb r intervallumban helyezkednek el, minél nagyobb a rotor szögsebessége. Az $E_1 - E_2$ energiakülönbség nagyságát ugyanis a részecskék hőmozgása ($\sim kT$) szabja meg.

Ha a szedimentációs egyensúly beállt, az

$$\ln \frac{n_2}{n_1} = \frac{m \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right) \omega^2}{2kT} (r_2^2 - r_1^2)$$

(VI.11)

összefüggésből m meghatározható.

A módszernek nagy előnye a diffúziós mérésekkel nem kombinált sebességi módszerrel szemben, hogy az eredmények nem függenek az f alakfaktortól. Gömb alakú molekulák esetén $f = 6\pi\eta R$, ahol η a belső súrlódási együttható, R a molekula sugara. Ha azonban nincs elegendően pontos adat az alakra vonatkozóan, a kapott molekulatömeg nem megbízható. További problémát jelent, hogy a molekulák általában ún. szolvatált állapotban ülepednek, így az f -ben szereplő R már nem molekulasugár. Az alak és a szolvátburok miatt megváltozott részecskesugár befolyásolja az ülepedés sebességét, de az egyensúlyra nincsenek hatással.

Az egyensúlyi módszernél az egyedüli kritikus paraméter a molekula sűrűsége, amelyet sűrűséggradiensben való futtatással lehet meghatározni. Nagy sűrűségű, kis molekulatömegű anyagok (például CsCl, CsBr stb.) centrifugálásakor az egyensúly beálltakor sűrűséggradiens keletkezik. Ha az ultracentrifugás futtatást ilyen oldószerben végezzük, akkor a makromolekulák ott állnak meg, ahol az oldószer sűrűsége a saját sűrűségükkel azonos. Ilyen módon a különböző minták homogenitását lehet vizsgálni. A módszer nagy érzékenysége például lehetővé teszi, hogy a ^{14}N , illetve ^{15}N tartalmú táptalajon nőtt bakteriális DNS-molekulákat szétválassza egymástól. Természetesen ehhez nem elegendő egy vagy néhány molekula, de a két egyenként homogén molekulapopuláció ultracentrifugálással szétválasztható.

1.2. VI/1.2. Elektroforézis és izoelektromos fókuszálás

A biológiai szempontból jelentős makromolekulák túlnyomó részének élettani körülmények között általában nullától különböző osztályozása van. Ha egy ilyen molekula elektromos térbe kerül, a töltésének megfelelő módon haladómozgást végez. Mivel a molekulákon belüli töltéeloszlás (akár nulla osztályozás mellett) aszimmetrikus is lehet, így a dipólus jellegű molekulákra az elektromos tér forgatónyomatékot is gyakorol, ami orientáló hatást eredményez.

A részecskének, molekuláknak elektromos erőter hatására bekövetkező translációs mozgását elektroforézisnek nevezik. Egy $+Ze$ töltésű molekulára egy E térerősséggel jellemezhető elektromos erőterben $F = ZeE$ nagyságú erő hat. Ennek az erőnek a hatására a részecske sebessége addig növekszik, amíg a mozgási sebességével arányos közegellenállás (erő) a mozgatóerővel egyensúlyba nem kerül

$$ZeE = f\dot{v}. \quad (\text{VI.12})$$

Az f állandó a mozgó rész alakjától, méretétől és a közeg belső súrlódási együtthatójától függ, de gyakran csak alakfaktorként említik. Az **elektroforetikus mozgékonyosság** (az egységnyi térerősség hatására létrejövő mozgási sebesség):

$$u_{\text{el}} = \frac{v}{E} = \frac{Ze}{f}. \quad (\text{VI.13})$$

Az u_{el} mennyiség nem azonos a korábban (lásd III/1.5.) definiált mozgékonyossággal (u):

$$u_{\text{el}} = Q \cdot u, \quad (\text{VI.14})$$

ahol Q a töltés (Ze).

Tekintettel azonban arra, hogy az elektroforézis az esetek többségében pufferelt folyadékfázisban játszódik le, a (VI.13) kifejezéstől jelentős eltérések léphetnek fel. Az eltéréseket az okozza, hogy a mozgó töltött részecskét egy „ionatmoszféra” veszi körül, amelynek méretei a pH-tól, a hőmérséklettől, az ionerősségtől stb. függenek. A módosító tényezők hatását különféle korrekciós faktorokkal szokás figyelembe venni, de az ilyen módon számított elméleti értékeknek a mért adatokkal való egyezése még mindig nem kielégítő. Ezért az elektroforézist általában nem molekuláris adatok meghatározására, hanem a makromolekulákat tartalmazó oldatok homogenitásának vizsgálatára vagy az oldat különböző komponenseinek szétválasztására alkalmazzák.

1.2.1. VI/1.2.1. Szabad elektroforézis

A VI.2. ábrán látható elektroforetizáló edényben elhelyezett, makromolekulákat tartalmazó oldat fölé puffert rétegeznek. Feszültséget kapcsolva az elektródokra megindul az elektroforézis. Az elektródokat oldalt helyezik el, hogy az elektrolízis termékei a mozgó határvonalakat ne zavarják.

Az ábrán bejelölt polaritásviszonyok esetén a pozitívan töltött makromolekulák határvonala a bal oldali ágba emelkedik, a jobb oldaliban süllyed. Sík falú edényt alkalmazva a mozgó határvonalak helyzete egyszerű optikai méréssel (pl. koncentrációtól függő fényabszorpció) követhető. Így magasság-koncentráció adatokat kapunk, amelyekből a $\Delta c/\Delta x$ koncentrációgradiens meghatározható x függvényében.

Ha az oldatban két, különböző mozgékonyaságú komponens (a és b) van jelen, a folyamat indításakor a VI.3a ábra mutatja a koncentráció és a koncentrációváltozás mértékét az x tengely mentén. Az elektroforézis előrehaladtával a megfelelő viszonyokat a VI.3b ábra mutatja.

Az ábrák alapján a mozgékonyaság meghatározásához szükséges sebességek számíthatók. Az emelkedésre és a süllyedésre mért sebességek kismértékben különböznek egymástól, mert az emelkedő határvonal pufferben, míg a süllyedő határvonal az eredeti oldatot tartalmazó közegben mozog. Emiatt mozgékonyaság-mérésre kizárólag a süllyedő határvonalra kapott értéket használják.

A térerősség meghatározását az Ohm-törvény alapján végzik. Egy A keresztmetszetű, $\rho = 1/\sigma$ fajlagos ellenállású folyadékoszlop Δx rétegvastagságára eső ΔU feszültség arányos a réteg ΔR ellenállásával

$$\Delta R = \rho \frac{\Delta x}{A} = \frac{\Delta x}{\sigma A}$$

(VI.15)

$$\Delta U = -I\Delta R = -\frac{I\Delta x}{\sigma A}$$

(VI.16)

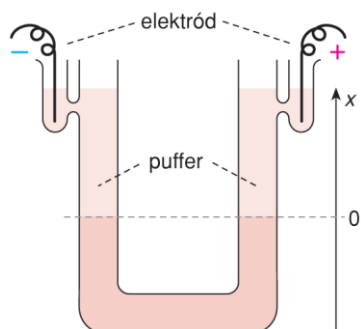
Innen a térerősség:

$$E = \frac{\Delta U}{\Delta x} = \frac{I}{\sigma A} \quad (\text{VI.17})$$

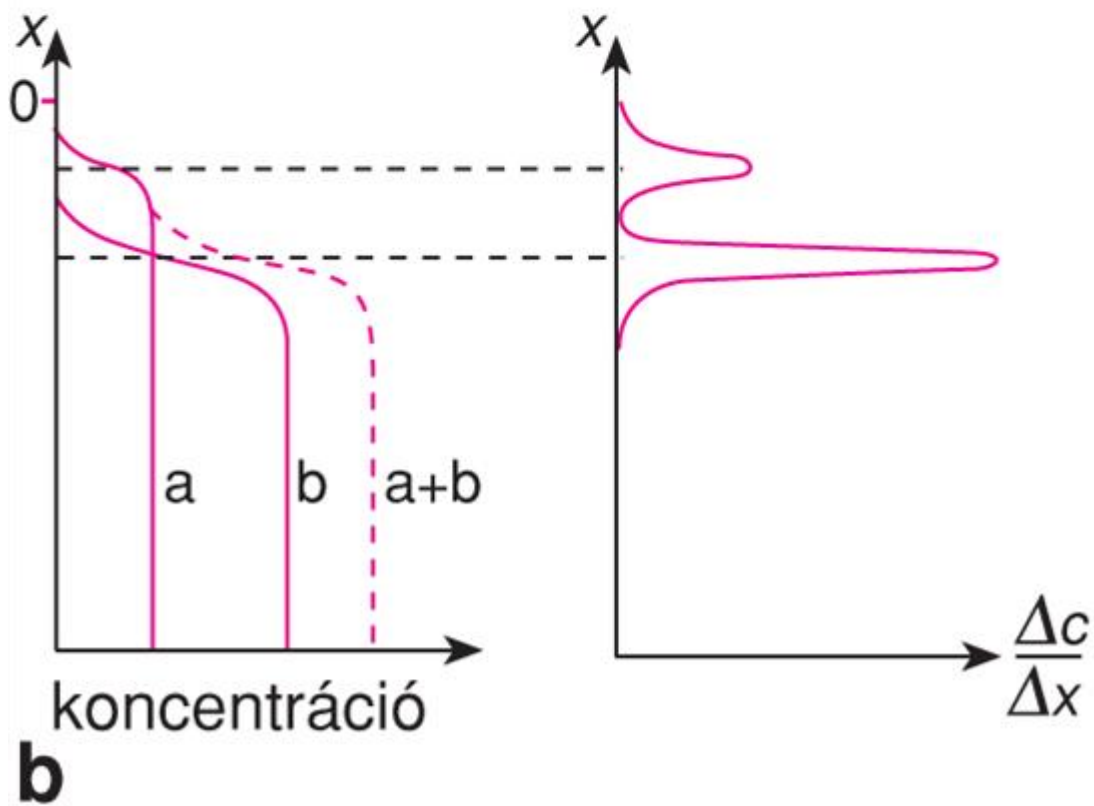
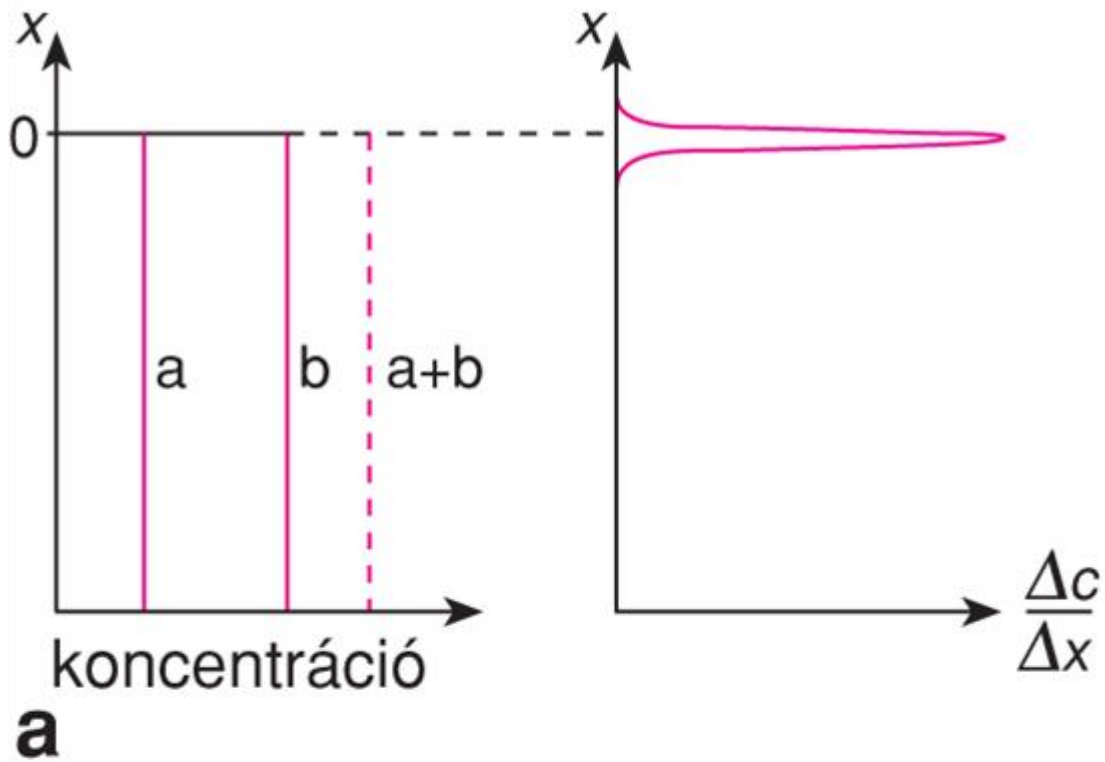
Az áramerősség, a vezetőképesség és a keresztmetszet könnyen mérhető mennyiség, így a (VI.17) összefüggés segítségével az $u_{el} = v/E$ elektroforetikus mozgékonyág meghatározható.

A módszer igen érzékeny, segítségével molekulánként egy elektrontöltésnyi töltéskülönbség már kimutatható. Az inhomogenitás sok esetben kimutatható még akkor is, ha nincsenek egymástól jól szétváló mozgó határok. Ha ugyanis az elektroforézis előrehaladtával az áram irányát megváltoztatva a határvonal élesedik, ez egyértelműen inhomogenitásra utal, mert homogén minta esetén a határvonal sohasem élesedhet, hanem a diffúzió miatt egyre „elkentebbé” válik.

A módszer hátrányai: a mozgékonyági adatok molekuláris interpretációja nehézkes, az elektroforetizáló edény a csiszolt síklapok miatt drága. Preparatív célokra nem alkalmas, mert a vizsgált mintákból csak egy-egy kis mennyiség izolálható (a leggyorsabban mozgó komponensből a felszálló ágon, a leglassabban mozgó komponensből a leszálló ágon).



VI.2. ábra. Elektroforézis-készülék vázlata



VI.3. ábra. Koncentráció eloszlás az elektroforézis során. a) kezdeti eloszlás; b) később, az elektroforézis előrehaladtával tapasztalható eloszlás

1.2.2. VI/1.2.2. Gélelektroforézis

A szabad elektroforézisnél jóval elterjedtebb az analitikai és preparatív célokra egyaránt alkalmas gélelektroforézis. Ennél a módszernél az elektroforézis – a szabad elektroforézissel ellentétben – félig szilárd mátrixban (keményítő-, agar- vagy poliakrilamidgél) játszódik le, ami a konvekció kiküszöbölése céljából előnyös. A módszerhez igen kis mintamennyiség elegendő, a komponensek szinte teljes mértékben elválaszthatók, a reprodukálhatóság igen nagy. Az elválasztott frakciók az elektroforézis befejezése után rögzíthetők, különböző módszerekkel festhetők vagy jelölhetők, majd számos mérési technikával kiértékelhetők (abszorpciós-fotometriás, fluoreszcenciás, autoradiográfias módszerrel stb.).

A gélelektroforézisnek általában két változatát szokás megkülönböztetni: alacsony- és nagyfeszültségű gélelektroforézist (10-20 V/cm, illetve 100 V/cm térerősségek mellett).

1.2.3. VI/1.2.3. Izoelektromos fókuszálás

Ez az eljárás analóg a sűrűséggradiensben végrehajtott szedimentációs módszerrel, ahol az ülepedő anyag molekulái a saját sűrűségükkel azonos sűrűségű mélységben gyűlnek össze.

Ismeretes, hogy olyan makromolekulák, amelyekben savas, ill. bázikus tulajdonságú csoportok találhatóak, a közeg pH-ja változásának hatására össztöltésüket megváltoztathatják. Ilyen sajátosságuk többek között a fehérjék is. Magas pH mellett negatív, alacsony pH mellett pozitív nettó töltéssel rendelkeznek, van azonban egy olyan pH-érték (izoelektromos pont), amelyen az adott fehérje nettó töltésének értéke nulla.

Ha az elektroforézis pH-gradiensben játszódik le, a makromolekulák mindaddig mozognak, amíg nettó töltéssel rendelkeznek. Pályájuk mentén a pH úgy változik, hogy a makromolekulák nettó töltése egyre csökken. A mozgás megszűnik, amint az izoelektromos pontjuknak megfelelő pH-jú helyre érnek, mert ott elvesztik nettó töltésüket. A rendszer a folyamat eredményeképpen egy olyan állapotba ér, amelyben az elektroforézis és a diffúzió között egyensúly van. Amint egy makromolekula diffúzió révén kikerül az izoelektromos pontjának megfelelő pH-jú helyről, nullától különböző töltésre tesz szert, így elektroforézis folytán visszajut az egyensúlyi helyzetbe. Ennek eredményeképpen minden különböző izoelektromos ponttal rendelkező komponens egymástól jól elválasztható, vékony sávba „fokuszálódik”. Ezt a nagy érzékenységű módszert analitikai és preparatív célokra egyaránt széleskörűen alkalmazzák.

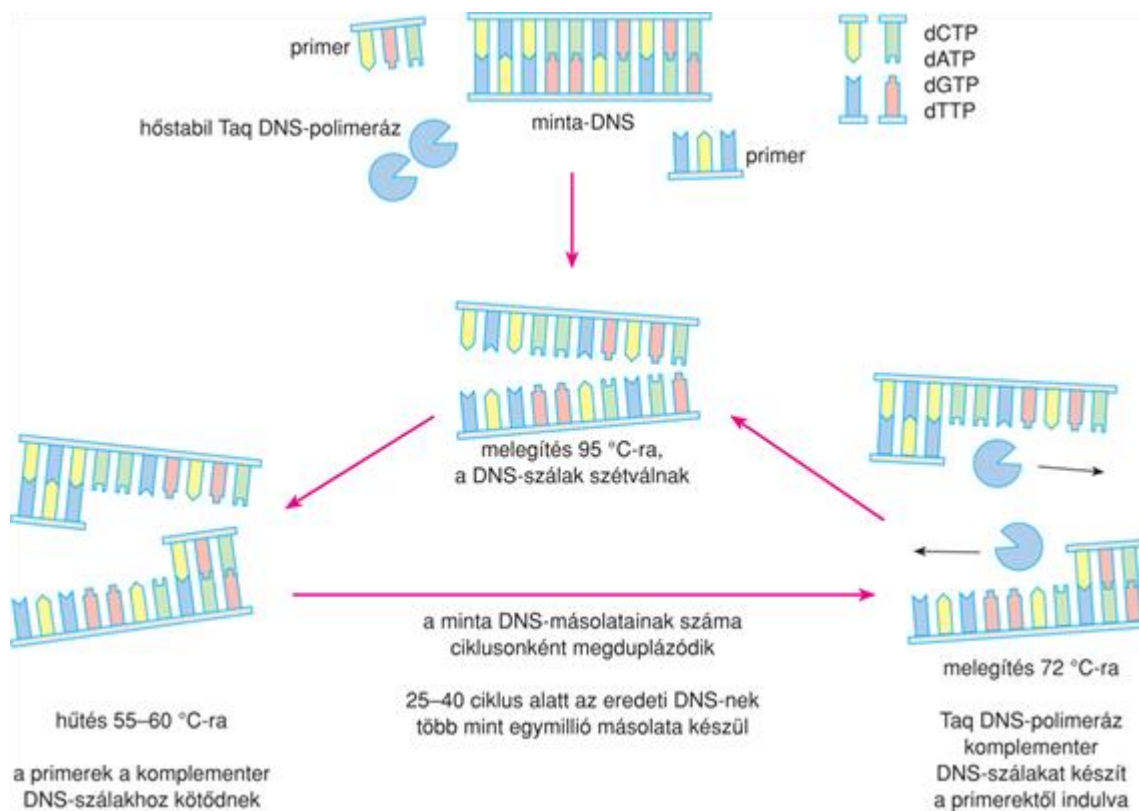
1.2.4. VI/1.2.4. Blottingtechnikák

Nukleinsav-molekulákat is elválaszthatunk elektroforézissel nagyságuk alapján annak ellenére, hogy nem gömb alakú molekulák. Az elválasztáshoz ugyanolyan agarózgél alkalmazunk, mint a fehérjék esetében. Edward Southern 1975-ben a Stanfordi Egyetemen új módszert fejlesztett ki a nukleinsav-molekulák azonosítására. A módszer kombinálta az elektroforézis, a nukleinsav-hibridizáció és az izotópjelzés előnyeit. Az előzetesen enzimekkel feldarabolt DNS-t agarózgélben végzett elektroforézis után izotóppal jelzett DNS-próbákkal hibridizálta, és a radioaktivitás alapján azonosította. A módszert Southern blottingnak nevezték el, mivel az egyik közbeeső lépés során a már elektroforéziselt DNS-darabokat „átítatják” cellulóz-acetát-papírra (ítatás = blotting), és ezután végzik a hibridizációt. Az itatás kiküszöböli a nemkívánatos háttéreffektusokat. Hasonló módon lehet RNS-mintákat, illetve specifikus antitestekkel fehérjéket is azonosítani. Az utóbbi két módszert a Southern nevére való játékos utalással Northern, illetve Western blottingnak is szokás nevezni.

Polimeráz-lánreakció (PCR)

A molekuláris biológiai technikák közül csak megemlítjük a polimeráz lánreakciót, amely in vitro módszer meghatározott DNS-szakaszok enzimatisz feldarabolására két, a sokszorozandó szakaszt közrefogó specifikus oligonukleotid primer segítségével. Mivel az oligonukleotid indító bázispár az amplifikálandó szakasz DNS-szálaival komplementer kell legyen, elvileg a sokszorozandó DNS bázissorrendjét ismerni kell, tehát a PCR elsősorban ismert DNS-szakaszok feldarabolására alkalmas. Bizonyos technikai trükkökkel ez a probléma sok esetben áthidalható (pl. Arbitrarly Primed PCR, RAPD). A PCR technika létrejöttét a Taq polimeráz felfedezése, és az automatizált fűtőblokkok (thermocyclerek) kialakítása tette lehetővé. A módszerben alapvető szerepet játszik az a biofizikai felismerés, hogy a makromolekulákat stabilizáló nem kovalens (elektrosztatikus és hidrofób) kötések felszakadását a makromolekulára specifikusan, hőmérséklet-változással lehet szabályozni (lásd I/3.1.) A Taq polimeráz enzimfunkciója a kellő számú felszakadt kötés által biztosított szerkezeti flexibilitás következtében optimális 72-75 °C körül, és 95 °C-on a szerkezet a kovalens diszulfidhidak miatt még nem denaturálódik. 95 °C-on azonban a feldarabolandó DNS kettős hélixet összetartó H-híd-kötések nagy százalékban felszakadnak, és a kettős lán szétválak. A sokszorozás során a DNS szintézisének, majd a képződött termék denaturációjának ismétlődő ciklusai zajlanak (ábra). A genomban lévő DNS-szakaszokról több millió kópia készíthető néhány óra alatt.

A módszert érzékenysége elvileg a kérdéses gén egyetlen kópiájának kimutatására alkalmassá teszi. Eredeti formájában főleg diagnosztikai tesztként használják a csak patogén fajokra, törzsekre jellemző virulenciaspecifikus gének kimutatására. Szinte napról napra növekszik a PCR-módszerrel kimutatható bakteriális és virális kórokozók száma, csak példaként említünk néhányat *Mycobacterium tuberculosis*, *Legionella*, *Mycoplasma*, *Chlamydia trachomatis*, herpesz-, adeno-, papovavírusok, HIV-vírus stb. Emellett az RT-PCR (reverz transzkripciót követő PCR) technika a legszélesebb körben alkalmazott RNS-vizsgáló módszer, amely alkalmas RNS vírusok kimutatására és az mRNS megszokottól eltérő érési folyamatának (alternatív splicing) kimutatására. RT-PCR esetén a kiinduló templát nem DNS, hanem RNS, erről a reverz transzkriptáz cDNS-t készít, és ezt szaporítják fel a PCR során. Több megfelelő primerpár kombinálásával lehetőség nyílik az ún. multiplex rendszerek összeállítására. Ekkor egy reakcióelegyből (tehát azonos mintából) egyszerre több szekvencia is sokszorozható. Így lehetőség van például a *Shigella*, hőstabil és hőlabilis enterotoxint termelő *E. coli* törzsek egyidejű kimutatására. Igazságügyi orvostani vizsgálatokban több polimorf markert lehet egyszerre jellemezni multiplex PCR-ral a genom adott szakaszain megfigyelhető DNS-hossz-változatokból. Megfelelően választott primerek esetén ezeknek az eljárásoknak igen nagy a diagnosztikai specifitása és érzékenysége, ugyanakkor a PCR-vizsgálatok eredményesen alkalmazhatók kis mennyiségű és degradálódott DNS-t tartalmazó minták esetében is.



A PCR berendezés működésének sémája

2. VI/2. Mikroszkópos módszerek

Az orvoslás mindennapjaiban a mikroszkópos módszerek hagyományosan igen jelentős szerepet játszanak. Példaként említhetjük a szemészet, nőgyógyászat, szövettan, bakteriológia területét (lásd VI.4. ábra). A betegségek nagy részének felismerése és a terápia pontos meghatározása egyaránt igényli a mikroszkópos vizsgálatot, illetve megerősítést. A patológiai vizsgálat kórszövettani része az, ami már a műtét alatt vagy a gyógyítás során felállítja a diagnózist, és csak kisszámú esetben hagy maga után bizonytalanságot. A sejtszintű orvos-biológiai kutatások (gyógyszerek kifejlesztése, kipróbálása) nagymértékben függenek a feltárt morfológiai részletek feloldásától és megbízhatóságától, melyek a mikroszkópos vizsgáló módszerek mindenkor fejlettségének a függvényei.



VI.4. ábra. Sztereomikroszkóp használata műtét közben

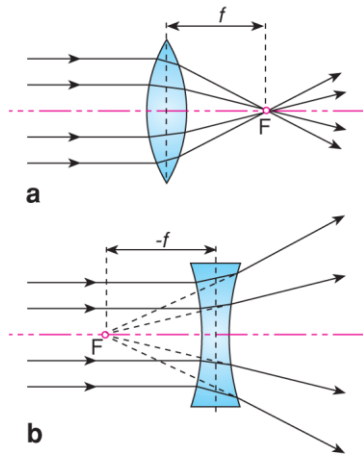
Szemünk feloldásának vannak határai, ez meghatározza, hogy szabad szemmel mekkora tárgyakat tudunk megkülönböztetni. Ami ennél „kisebb”, annak megfigyeléséhez optikai segédeszköz kell. A legegyszerűbb eszköz a nagyító (lupe), amely egy gyűjtőlencse (lásd II/2.1.2.). Összetettebb rendszer a hagyományos fénymikroszkóp, amely két gyűjtőlencse alkalmas távolságban. A mikroszkópia a biofizika napjainkban is talán leggyorsabban fejlődő ága. A hagyományos fénymikroszkópnak is több, speciális célokra alkalmas változata létezik, melyeket a mindennapos orvosi gyakorlatban is alkalmaznak. A következőkben a fénymikroszkópia alapfogalmait, és a rutin-labordiagnosztikai eljárásokban használható speciális módszereket tekintjük át.

Azt mondhatjuk, hogy a fénymikroszkóp célja az, hogy a minta apró részleteit szemünk számára láthatóvá tegye, tehát megfelelő **felbontású, nagyított, kontrasztos képet** állítson elő.

VI.1. megjegyzés. Nincs az emberiségnek még egy olyan találmánya, beleértve a ma és a jövő elektronikus csodáit, amely a világnézetét olyan döntő módon változtatta volna meg, mint a csiszolt kis üvegdarabka, a lencse. Megnyílt előttünk a végtelen világegyetem, a kozmosz, és felfedeztünk egy addig teljesen ismeretlen világot, a parányokét, a mikrokozmoszt. Lovas Béla: A mikroszkóp története, Búvár évkönyv 1986, Móra

2.1. VI/2.1. Az egyszerű nagyító (lupe)

A vékony (gömbfelületekkel határolt) lencsékre vonatkozó leképezési törvényt a II/2.1.2. részben már megbeszéltük. Ennek alapján kétfajta lencsét különböztetünk meg gyűjtő- és szórólencsét (VI.5. ábra). Az elnevezés azon alapul, hogy az adott lencse a párhuzamosan érkező fénysugarakat egy pontban összegyűjti vagy pedig szétszórja. A lencsét határoló gömbök középpontján átmenő egyenest optikai tengelynek nevezzük. Ha a gyűjtőlencsére eső sugarak párhuzamosak az optikai tengellyel, akkor az összegyűjtött fénysugarak az optikai tengely egy pontjában, a fókuszpontban találkoznak (jelölése F , lásd VI.5a ábra). (Szimmetriaokokból a lencse túloldalán, ugyanolyan f fókusz távolságra van a lencse másik fókuszpontja.) Szórólencsék esetén a párhuzamosan érkező fénysugarak a lencse után úgy szóródnak szét, mintha a fókuszpontból indultak volna ki (VI.5b ábra). Optikai leképezésnél a tárgypontról kiinduló fénysugarakat optikai rendszeren (például lencsén vagy több lencséből álló rendszeren) vezetjük át. Egy tárgypontról valódi képe az a pont, ahol a tárgypontról kiinduló fénysugarak a lencsén áthaladva újra találkoznak. Az így kialakuló kép ernyőn felfogható, az ernyőn kialakuló fényes és kevésbé fényes találkozási pontok fényforrásként szolgálnak, onnan a fotonok a szemünkbe jutva képet alkotnak a retinán. Amennyiben a lencsén áthaladó fénysugarak széttartóak maradnak, vagy lesznek, szemünkbe úgy érkeznék, mintha egy, a lencse mögötti pontszerű forrásból érkeznének, mely a visszafelé való meghosszabbításuk metszéspontjában van. Ezt a pontszerű forrást fogjuk az eredeti tárgypontról virtuális (látszólagos) képeként érzékelni. A virtuális kép ernyőn nem fogható fel, hiszen a fénysugarak haladásuk során nem metszik egymást.



VI.5. ábra. A gyűjtőlencse a) a fókuszpontba gyűjti össze az optikai tengellyel párhuzamos fénysugarakat, míg a szórólencse b) szétszórja

Ha a tárgy a fókusz távolságon belül van, akkor egyenes állású, nagyított, látszólagos (virtuális) kép keletkezik. Ilyenkor a szemünkbe érkező fénysugarak iránya olyan, mintha a virtuális kép helyén lévő tárgyról jönnének. (l. VI.6. ábra)

Egy tárgy **látószöge** két legtávolabbi pontjából a szemünkbe érkező fénysugár egymással bezárt szöge. Mivel szemünkkel az azonos látószögű tárgyakat ugyanakkorának látjuk (VI.7. ábra), ezért a már ismert lineáris nagyítás ($N = K/T = k/t$) helyett célszerűbb a szögnagyítást használni. Ha a tárgyat „normális” látótávolságból, az ún. tisztán látás távolságából ($a \approx 25$ cm) α szög alatt látjuk, a nagyítóval előállított képét pedig β szög alatt, akkor a **szögnagyítást** e két szög tangenseinek hányadosaként kapjuk meg. A VI.6. és a VI.7. ábra alapján:

$$N_{\text{szög}} = \frac{\text{tg}\beta}{\text{tg}\alpha} = \frac{K}{-k} \frac{a}{T} = \frac{T}{t} \frac{a}{T} = a \left(\frac{1}{f} - \frac{1}{k} \right) \quad (VI.18)$$

ahol felhasználtuk a β szöget tartalmazó háromszögek hasonlóságát és a lencsetörvény szerint $1/t$ -re érvényes összefüggést.

Ha a képet a tisztánlátás távolságából nézzük, akkor

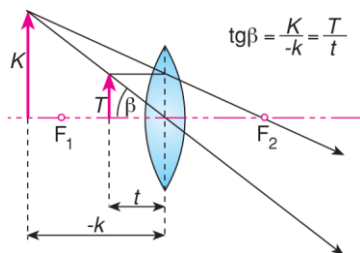
$$-k = a \rightarrow N_{\text{szög}} = \frac{a}{f} + 1 \quad (VI.19)$$

Optimális esetben a kép a végtelenben keletkezik, ekkor a szemünkbe párhuzamos sugarak érkeznak, tehát

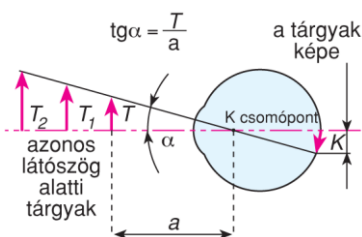
$$-k = \infty \rightarrow N_{\text{szög}} = \frac{a}{f}$$

(VI.20)

és $t = f$. Ebben az esetben tehát azt mondhatjuk, hogy a lencse nagyítása a fókusz távolság reciprokával arányos.



VI.6. ábra. Az egyszerű nagyító (lupa) képalkotása és a szögnagyítás

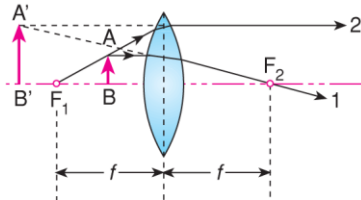
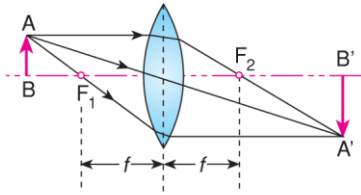


VI.7. ábra. A különböző méretű tárgyakat (T, T_1, T_2) azonos látószög α esetén ugyanakkorának látjuk K)

Vékony gyűjtőlencsék képalkotása

A fenti ismeretek birtokában egyszerűen megszerkeszthetjük egy tárgyának egy gyűjtőlencse által alkotott képét. Ehhez az alábbi három nevezetes sugármenet közül bármelyik kettőt felhasználhatjuk:

- A tárgypontból az optikai tengellyel párhuzamosan kiinduló fénysugár a túldoldali fókuszponton (F_2) halad át.
- Ha az érkező fénysugár (vagy annak meghosszabbítása) a fókuszponton (F_1) halad át, akkor a megtört fénysugár párhuzamos lesz az optikai tengellyel. (Az előző fénysugár útjának megfordítása.)
- A lencse középpontján áthaladó fénysugár iránya nem változik.

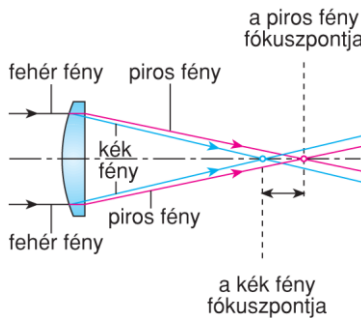


Ha egy tetszőleges tárgypontból e három különböző irányba kiinduló fénysugár útját megszerkesztjük, a fénysugarak egy pontban, a képpontban találkoznak (ábra). Egy kiterjedt tárgy valamennyi pontjának képpontját megszerkesztve kapjuk meg a képet. A kép- és tárgytávolság közötti összefüggés az ismert lencsetörvény (lásd II/2.1.2.):

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{t} + \frac{1}{k}$$

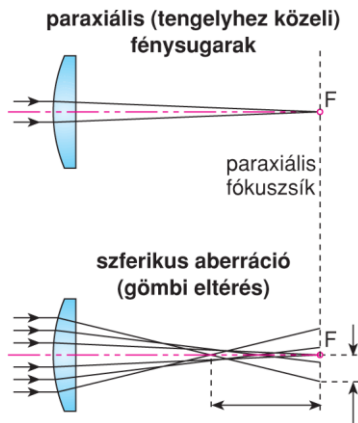
A leképezés hibái (a legfontosabb lencsehibák)

Még a legegyszerűbb optikai lencsék képalkotása sem tökéletes. A legkönnyebben észrevehető hiba a kép körüli elszíneződés. Ezt a hibát **színhibának** (kromatikus aberrációnak) nevezik, és a lencse anyagát képező üveg törésmutatójának a fény frekvenciájától való függése (diszperziója) az oka. Az eredmény kissé eltérő fókusz távolság a különböző színek esetén és ennek megfelelően a kissé eltérő távolságban jelentkező különböző színű képek serege (lásd 1. ábra). A hiba megszüntethető különböző optikai tulajdonságú gyűjtő- és szórólencsék kombinációjával, amelyben az egyik üveg diszperziója kompenzálja a másikét.



1. ábra. Színhiba

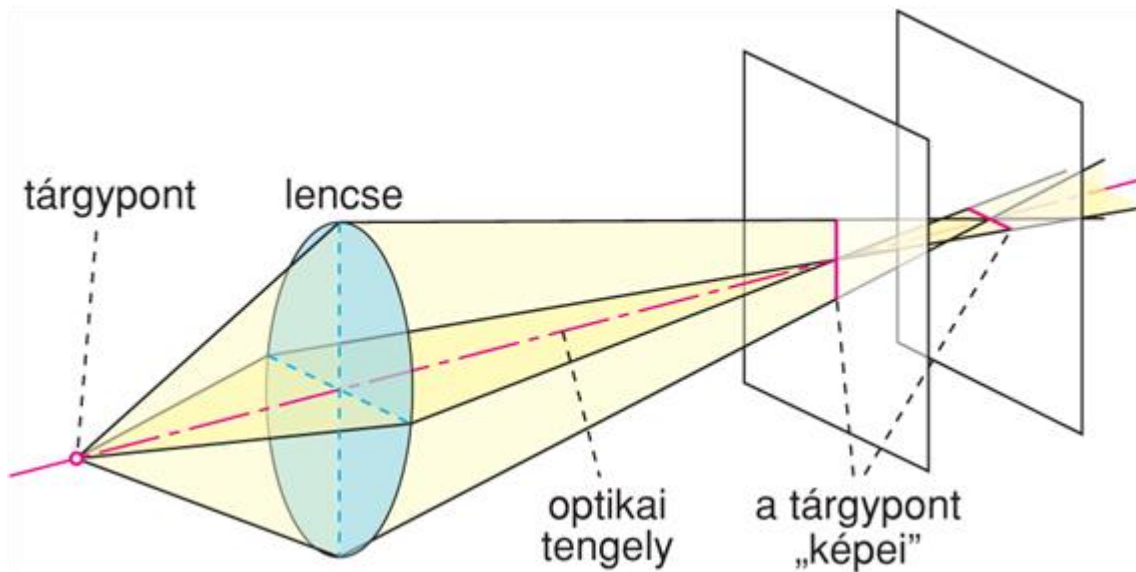
A másik jellegzetes hiba a **gömbi eltérés** (szferikus aberráció), ami akkor lép fel, ha nemcsak a paraxiális (az optikai tengely közelében haladó) sugarak, hanem a tengelytől távoli fénysugarak is részt vesznek a képalkotásban. A lencse szélén áthaladó sugarak az optikai középponthez közelebb fókuszálódnak, mint az optikai tengelyhez közel áthaladók (lásd 2. ábra). Ezt a hibát több tagot tartalmazó lencserendszerek segítségével lehet kiküszöbölni, amelyekben az egyes lencsetagok anyaga és domborulata egymástól eltérő. (Itt jegyezzük meg, hogy fényrekesz segítségével a tengelytől távolabbi fénysugarak kizárhatók a képalkotásból, amivel csökkenthető ez a fajta hiba, de ez a beavatkozás maga után vonja a fényintenzitás csökkenését is.)



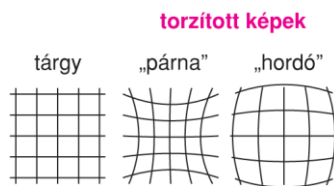
2. ábra. Gömbi eltérés

Gyakran előfordul, hogy a fénysugarak nem egy pontban, hanem az optikai tengelyre merőleges kitérő vonalak mentén találkoznak, ez az **asztigmatizmus**. Ez a hiba olyankor lép fel, ha a lencse görbülete az optikai tengelyre merőleges különböző irányokban eltérő (nem gömbszimmetrikus). Például, ha két különböző görbületű hengerlencsét egyesítünk, akkor jutunk hasonlóhoz. Ebben az esetben a 3. ábrán látható módon egy tárgypontból két különböző távolságban lévő képvonal keletkezik. Az asztigmatizmust a legkönnyebben hengerlencsékkel lehet korrigálni. Megjegyezzük, hogy asztigmatizmus tökéletes gömbszimmetrikus lencsék esetén is fellép, ha a leképezett objektum távol van az optikai tengelytől.

Mivel a lencsék gömbfelületekkel határolt testek, ezért a „valódi” tárgysíkok és képsíkok is görbült felületek. Egy síkfelület konkáv vagy konvex gömbfelületre vetülése (vagy ennek a fordítottja) eredményezheti az ún. „párna”-, illetve „hordó”-torzítást (lásd 4. ábra).



3. ábra. Asztigmatizmus



4. ábra. „Párna”-, illetve „hordó”-torzítás

2.2. VI/2.2. A fénymikroszkóp

2.2.1. VI/2.2.1. A fénymikroszkóp képkalkotása

A fénymikroszkóp két gyűjtőlencséből, a tárgyhoz közeli tárgylencséből (objektív), és a szemünk felől eső szemlencséből (okulár) áll, melyek adott távolságban vannak egymástól (VI.8. ábra). Az objektívet úgy közelítjük a tárgyhoz, hogy a tárgy az objektív egyszeres gyújtótávolságán kívül de közel a fókuszponthoz essék. Így az objektív a tárgyról a lencse túloldalán, a kétszeres fókusz-távolságon kívül valódi, nagyított, fordított állású képet hoz létre (közbülső kép). Ezt a képet az okuláron mint egyszerű nagyítón keresztül nézzük. A közbülső kép az okulár egyszeres fókusz-távolságán belül helyezkedik el, közel az okulár fókuszpontjához. A közbülső képről mint tárgyról a szemlencse látszólagos, nagyított és egyenes állású képet hoz létre. Végeredményben tehát az eredeti tárgyról látszólagos, nagyított és fordított állású képet látunk. (Amennyiben a mikroszkóp által alkotott képet fényképezni kívánjuk, akkor az objektív által alkotott valódi képnek a fényérzékeny anyag síkjában kell keletkeznie.)

A VI.8. ábra alapján kiszámítjuk a mikroszkóp szőgnagyítását is.

$$N_{\text{szög}} = \frac{\text{tg}\beta}{\text{tg}\alpha} = \frac{K}{f_2} \frac{a}{T} = \frac{k_1}{t_1} \frac{a}{f_2}$$

(VI.21)

ahol a a tisztánlátás távolsága, ahonnan a T tárgyat α szög alatt látjuk (lásd még VI.6. ábra). Az ábrán jelölt háromszögek hasonlósága miatt $\frac{K}{T} = \frac{k_1}{t_1}$.

A lencsetörvényt alkalmazva kapjuk:

$$\frac{1}{t_1} = \frac{1}{f_1} - \frac{1}{k_1} = \frac{k_1 - f_1}{f_1 k_1} = \frac{d}{f_1 k_1}$$

(VI.22)

ahol d az optikai tubushosszat jelöli, ami az objektív és az okulár egymás felé mutató fókuszpontjainak távolsága. Behelyettesítve $1/t_1$ -et, a szőgnagyításra a következő adódik:

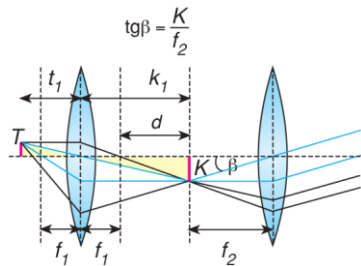
$$N_{\text{szög}} = \frac{d}{f_1 k_1} \frac{k_1 a}{f_2} = \frac{da}{f_1 f_2}$$

(VI.23)

Adott tubushossz mellett a nagyítást az objektív és az okulár fókusz-távolságainak csökkentésével lehet megnövelni. A tárgy részleteit az objektív tárja fel, az okulár további részletekkel nem szolgál, csak az objektív által alkotott képet nagyítja tovább. A képelemek szempontjából ez azt jelenti, hogy az okulár csak a képelemek méretét növeli, azok számát változatlanul hagyja. Itt jegyezzük meg azt is, hogy míg a nagyítás akár a

képelemek számának, akár azok méretének növelését jelentheti, addig a felbontás csak a képelemek számától függ.

Bár a fenti összefüggés szerint a szőgnagyítást elvileg korlátlanul növelhetjük, a fény hullámtermészete határt szab a feloldásnak (lásd II/2.1.3.).



VI.8. ábra. A mikroszkóp lencséinek képalkotása (kék színnel kiemelve a fényutak jellegzetes szakaszait)

A mikroszkóp felépítése

A tárgylencse (objektív). Az objektív a mikroszkóp legfontosabb alkatrésze, a felbontás (VI/2.2.2. rész) és az elérhető képminőség meghatározója. Ez ma már nemcsak egy lencsét, hanem egyes lencsehibákra korrigált összetett lencserendszert jelent. A vizsgálat tárgya határozza meg, hogy milyen objektívet válasszunk. A lencse foglalatán számos felirat tájékoztat a tulajdonságairól. Például a színhibák és a képmezőhajlás korrigálásának a foka szerepel, illetve az, hogy egy vagy több színű fényre korrigálják a lencsét. A nagyítást $40\times$ vagy $40:1$ formában adják meg, a numerikus apertúrát (lásd VI/2.2.2.) NA-val jelölik. Nagyobb nagyításoknál lényeges a használt fedőlemez vastagsága is. A $160/0.17$ vagy $\infty/0.17$ jelek közül az első a tubushosszat (d , VI.8. ábra), a második pedig az optimális fedőlemezvastagságot mm-ben, melyre az objektív leképezése korrigálva van. Ha a tubushossz helyén ∞ szerepel, az olyan optikai rendszerhez illeszkedő objektívet jelöl, ahol az objektívből kilépő fénysugarak párhuzamosak és egy, a fényútban távolabb elhelyezett ún. tubuslencse fókuszálja ismét. Az ilyen rendszerek ideálisak pl. epifluoreszcens megvilágítás becsatolására (VI/2.3.3. rész), vagy konfokális mikroszkópokhoz (lásd X/3.1.). További betűjelek mutatják a speciális tulajdonságokat: Olaj- (Oel, HI) immerziós, vízimmerziós (W), feszültségmentes polarizációs (Pol) vagy fáziskontraszt (Ph) objektívról van-e szó.

A szemlencse (okulár). Szerepe, hogy az objektív által alkotott képet megnagyítva juttatja el a szemünkbe. Az objektívek színi hibáinak kiküszöbölése végett kompenzációs okulárokat (betűjele K) is szerkesztenek, melyeknek színi hibája ellenkező előjelű, mint az objektívéké. Az okulár segítségével megmérhetjük a mikroszkópban megfigyelt tárgyak méretét. Ehhez okulár-mikrométert használunk, amely tulajdonképpen egy skála, amit az adott objektívre hitelesítünk például egy tárgymikrométerrel. Az egy szemmel történő mikroszkópi megfigyelések kényelmetlenségét kiküszöbölendő, a mikroszkópok jelentős része binokuláris, azaz két okulárlencsét tartalmaz. Természetesen az így kapott kép nem lesz térbeli, ugyanis csak az egy objektívlencsével létrehozott kép kettéosztása és további nagyítása történik meg.

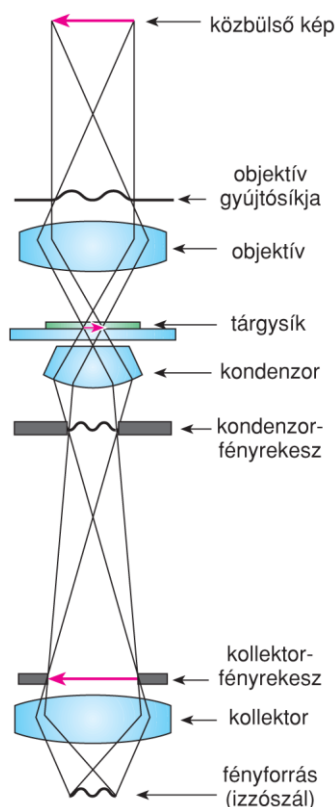
A megvilágítás. A mikroszkóp feloldóképessége akkor érvényesül optimálisan, ha a tárgy (és a látómező) egyenletes megvilágítású, és a szórt fény a lehető legkevesebb. Az egyenletes megvilágítás elengedhetetlen a mikrofényképezéshez, a szórt fény minimálisra csökkentése pedig minden mikroszkópos vizsgálatnál fontos. A szórt fény ugyanis a kép kontrasztosságát csökkenti, és elfedhet olyan részleteket, amiknek megfigyelését az objektív feloldóképessége egyébként lehetővé tenné.

A világos látóterű (konvencionális) mikroszkópia a legelterjedtebb és legtöbbet alkalmazott módszer a laboratóriumokban. A vizsgálni kívánt objektum megvilágítása fehér (összetett) átmenő fényvel történik, így lehetőség van festett és a festetlen minták tanulmányozására. A festetlen minták egyes részei eltérő optikai tulajdonságaik miatt különböző mértékben törnek meg, illetve szórják a fényt, így a mikroszkópba tekintve eltérő intenzitású alakzatokat láthatunk (sötét-világos kontraszt). Ha a mintát megfestjük, akkor a festék tulajdonságaitól függően más és más alkotóelemek válnak láthatóvá.

A modern mikroszkópokban általában Köhler típusú megvilágítást alkalmaznak (ábra). A mikroszkóplámpában a fényforrás (izzószál) képét a kollektorlencse vetíti a kondenzor fényrekeszének síkjába. Ez a sík egyben a kondenzor elülső gyújtósíkja is, ezért a kondenzor az izzószál képét (ami számára a tárgy) a végtelenben képezi le. Ily módon a fényforrás minden pontja a kondenzor fókuszába kerül, és ezért a kondenzor minden egyes pontról párhuzamos nyalábot állít elő, amely egyenletesen világítja be a látóteret. Az objektív a kondenzorból

(„végtelenből”) érkező sugarakat a hátsó gyújtósíkjában gyűjti össze. A továbbiakban az izzószál képe nem zavar, mert az objektívet nem erre, hanem a tárgyra állítottuk élesre.

A kondenzort úgy állítjuk be, hogy a kollektor fényrekesz (ami az ábrán nyílként is meg van jelölve) kicsinyített valódi képét a tárgy síkjában hozza létre, így a kollektor fényrekesz változtatásával a tárgy átvilágított területe is változik. A mikroszkóp látómezejében a tárgy képével együtt a kollektor fényrekesz „képe” is látszik. A kondenzor és a különböző objektívek apertúrájának összehangolására szolgál a kondenzor fényrekesze. A tapasztalatok szerint a legkontrasztosabb képet akkor kapjuk, ha a kondenzor fényrekesz csak mintegy 2/3-át világítja meg az objektív hátsó lencsefelületének.



August Köhler (1866–1948)

2.2.2. VI/2.2.2. Felbontóképesség, Abbe-elv

Először nézzük meg, mi történik, ha a vizsgált objektum egy optikai rács (lásd a II/2.1.5., II/2.1.6. fejezeteket). Optikai rácsnak nevezünk egy olyan tárgyat, amelyben a fényáteresztő képesség periodikusan változik. A rácsot átvilágítva egy „végtelen” távoli ernyőn periodikus elhajlási képet kapunk: maximális intenzitású és sötét helyek

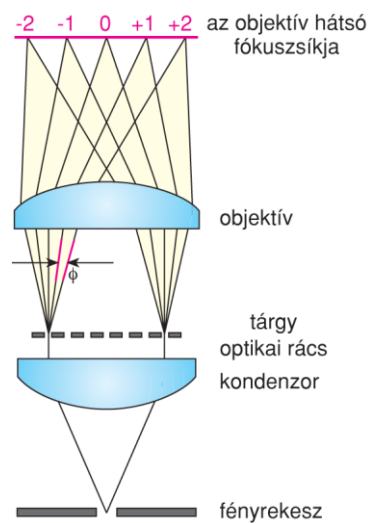
váltakoztatják egymást. A maximumhelyek olyan kitüntetett elhajlási irányoknak (α_k) a találkozási helyei, amelyekre az útkülönbség (Δs) a megvilágító fény hullámhosszának (λ) egész számú többszöröse (lásd II/2.1.5.):

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

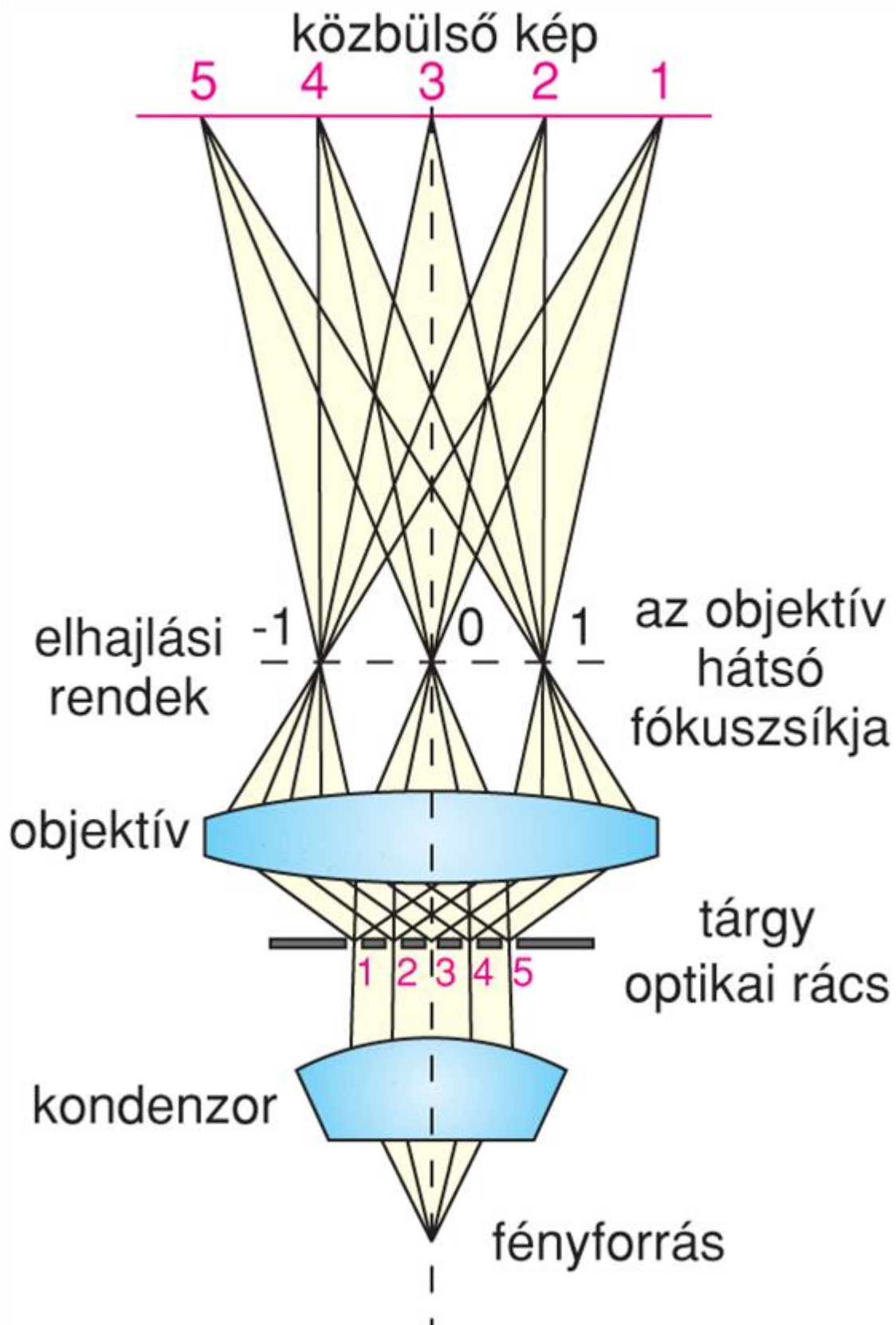
(VI.24)

ahol d a rácsállandó. A $k = 0, 1, 2, \dots$ egész számhoz tartozó maximumokat nevezzük rendeknek. A nulladrendű főmaximumnak, az első-, második-, stb.-rendűeket pedig mellékmaximumoknak is szokás nevezni.

Ha a rács (mint tárgy) után gyűjtőlencsét (objektív) helyezünk, a végtelen távoli ernyő helyett az elhajlási kép most a gyűjtőlencse képoldali fókuszisíkjában jelenik meg. Az elhajlási kép a főmaximumra nézve szimmetrikus (VI.9. ábra). A megfelelő képtávolságban létrejön a rács képe, a mikroszkóp közbülső képe (VI.10. ábra). Ez a kép azonban szintén interferencia eredményeként jön létre, nevezetesen most az egyes elhajlási rendekből „kiinduló” (valójában továbbhaladó) fénycsugárak hozzák létre. A nulladrendű hullám középső, kitüntetett helyzete miatt mindig megjelenik a fókuszisíkjában, ezért a leképezésben is kitüntetett szerepe van. Ha csak ez az egyetlen „forrás” bocsátana ki hullámokat, és a közbülső kép síkjába is csak ez érkezne meg, interferencia hiányában kép nem jönne létre, ezért ilyenkor a közbülső kép helyett egyenes megvilágítást kapnánk. Ebből az következik, hogy további rendekből „kiinduló” hullámra is szükség van a kép keletkezéséhez. Tehát ezekből a sugarakból is legalább néhánynak feltétlenül részt kell vennie a leképezésben ahhoz, hogy a tárgyról információt kapjunk.



VI.9. ábra. A rács elhajlási képének megjelenése az objektív képoldali fókuszisíkjában



VI.10. ábra. A mikroszkóp közbülső képének létrejötte

„Tökéletes” képet csak akkor kapnánk, ha a képalkotásban az összes elhajlási rend részt venne, ami nem teljesíthető feltétel. Eszerint csak azt mondhatjuk, hogy minél magasabb rendben elhajlott sugarak is részt vesznek a leképezésben, annál részletgazdagabb képet kapunk. A rács képét hűnek, megfelelően

részletgazdagnak nevezzük, ha benne a sötét és világos tartományok a rácséhoz hasonló módon követik egymást.

Abbe írta fel először azt az összefüggést az optikai rendszer (jelen esetben az objektívlencse és a megvilágító fény) paraméterei és a még hűen leképezett rács rácsállandója között, ami elvezet a felbontóképességhez. Az elhajlási rendek távolságát a fókusz síkban az erősítési irányok (α_k) szabják meg. Ugyanott a rendek száma függ még a lencse (objektív) fél nyílásszögétől, ω -tól is (VI.11. ábra). Minthogy ω -nál nagyobb szögben elhajlott sugarak nem jutnak be a mikroszkópba, a k -ik elhajlási maximum megjelenésének feltétele:

$$k \frac{\lambda}{d} = \sin \alpha_k \leq \sin \omega$$

(VI.25)

A VI.9. illetve a VI.10. ábrából látható, hogy a rács képének létrehozásában döntő szerepet játszanak az elsőrendben elhajlított sugarak, ezek hiányában kép egyáltalán nem jön létre. Ezek a felismerések vezették Abbet a következő elv kimondására: **mikroszkópban csak akkor kapunk képet, ha a tárgyon elhajlott sugarak közül legalább az elsőrendben elhajlottak bejutnak a mikroszkóp tárgylencséjébe, és részt vesznek a képalkotásban, azaz, ha az objektív fókusz síkjában a főmaximumon kívül legalább az elsőrendű mellékmaximumok is létrejönnek.**

A fenti összefüggésből kifejezhetjük azt a legkisebb távolságot, az ún. **feloldási határt** (δ), amelyre lévő két rácspont (tárgypont) képe még megkülönböztethető egymástól. $k = 1$ helyettesítéssel:

$$\delta = \frac{\lambda}{\sin \omega}. \quad (\text{VI.26})$$

Ez Abbe elvének matematikai következménye. A fenti távolság reciprokát a **mikroszkóp feloldóképességének** nevezzük (lásd VI.1. példa).

Ha a tárgy és az objektív közötti közeg nem levegő, akkor a levegőben érvényes hullámhossz (λ) helyett az n törésmutatójú közegben érvényes λ/n hullámhosszat kell képleteinkbe helyettesíteni. Ezért, ha a tárgy és az objektív közötti teret n törésmutatójú anyag (immerzió) tölti ki, akkor a

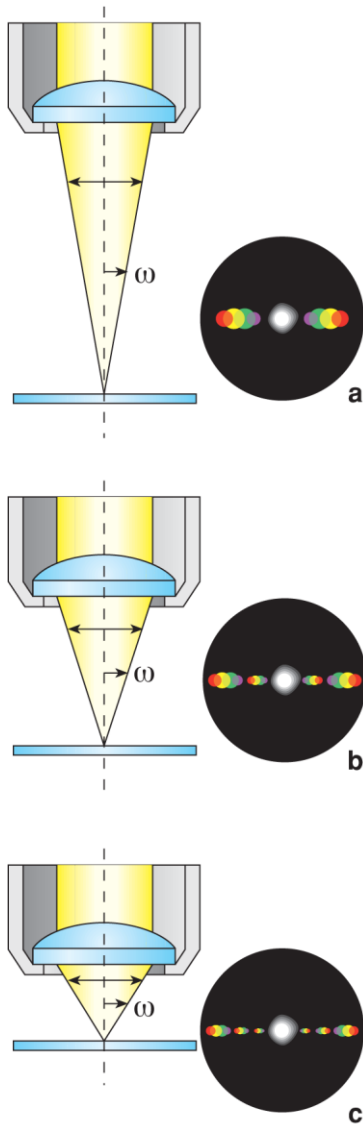
$$\delta = \frac{\lambda}{n \sin \omega} = \frac{\lambda}{A} \quad (\text{VI.27})$$

összefüggés érvényes. Az $A = n \sin \omega$ mennyiséget **numerikus apertúrának** (NA) nevezzük, ez a mennyiség az objektív jellemzőit foglalja magában (VI.11. ábra).

Pontosabb megfontolásokkal (pl. a leképezőrendszer kör alakú keresztmetszetét is figyelembe véve) δ -ra a következő kifejezés adódik:

$$\delta = 0,61 \frac{\lambda}{n \sin \omega}. \quad (\text{VI.28})$$

A mikroszkópok fejlesztésének egyik lényeges célkitűzése a **feloldás javítása**, aminek egyik lehetősége a hullámhossz csökkentése. Ez valósul meg például az ultraibolya-mikroszkópban, illetve extrém példaként az elektronmikroszkópban. A másik lehetőség az, hogy növeljük az objektív numerikus apertúráját. Ennek egyszerű módja az ω fél-nyílásszög növelése, például jobb objektív alkalmazásával, melynek nagyobb a frontlencse átmérője és kisebb a munkatávolsága. További lehetőség a törésmutató növelése, például immerziós olaj bejuttatása az objektív és a tárgy közé, melynek törésmutatója $\sim 1,5$, szemben a levegő $\sim 1,0$ értékével.



VI.11. ábra. Különböző félnyílásszögű objektívek numerikus apertúrái és az adott objektívbe bejutó, annak fókusz síkjában megjelenő rács elhajlási képek (keskeny nyalábú és fehér fényű megvilágítással). $NA = n \sin \omega$: a, $\omega = 15^\circ$ – $NA = 0,26$; b, $\omega = 28^\circ$ – $NA = 0,47$; c, $\omega = 60^\circ$ – $NA = 0,87$

Ernst Abbe (1840–1905) német matematikus és fizikus Jénában Carl Zeissel találkozott, és 1866-tól az akkori mikroszkópok lencséinek tökéletesítésén dolgozott. A Zeiss lencsék voltak az elsők, amelyeket részletes számítások alapján terveztek meg. Abbe hullámoptikai számításainak eredményeit azonban csak jó minőségű üvegből készülő lencsékkel lehetett a gyakorlatban is megvalósítani, amit Otto Schott vegyész készített. Apokromát objektívjeik az addigi legprecízebbek voltak, és megalapozták a Zeiss gyár által gyártott objektívek jó hírnevét. Abbe érdeme az a felismerés is, hogy a legnagyobb igyekezet ellenére sem lehet a látható fény hullámtermészete által meghatározott felbontóképességnél jobbat elérni.



Ernst Abbe

VI.1. példa. Ha a tárgy azon részletei, amelyeket a mikroszkóp segítségével még éppen külön lehet látni, egymástól $\delta = 0,001$ cm távolságra vannak, akkor a mikroszkóp feloldóképessége 1000/cm. Tehát egy 1000/cm feloldóképességű mikroszkóppal cm-enként 1000 részletet tartalmazó tárgy (például egy olyan optikai rács, amelynek rácsállandója 10^{-3} cm) periodikus struktúráját jól fel lehet ismerni, de a tárgynak még finomabb részleteit (például a rács karcolatának az érdességét) ez a mikroszkóp már nem oldja fel.

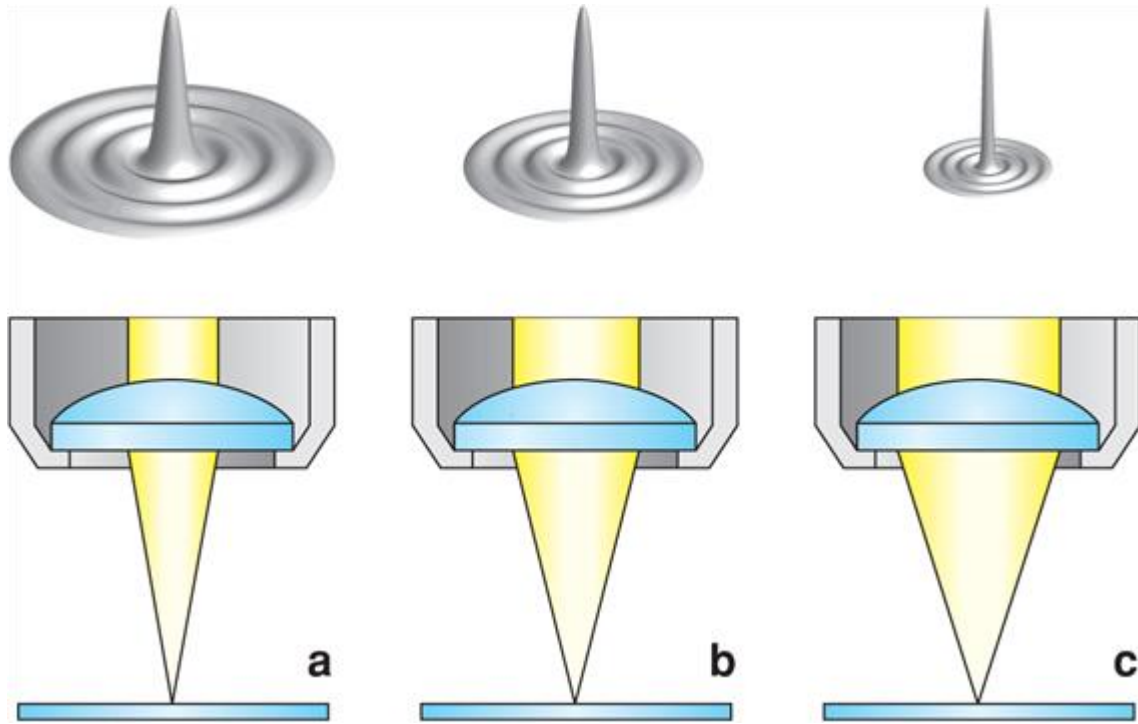
A feloldóképesség és a nagyítás kapcsolata

A következő példán azt szemléltetjük, hogy a feloldóképesség határt szab a nagyítás kihasználható mértékének is. Alkalmazzunk 1000×-es nagyítást (például 100× objektív, 10× okulár). Ez a legkisebb feloldható távolságot (ami körülbelül 300 nm) 0,3 mm-re nagyítja. Szemünkkel a tisztánlátás távolságában keletkezett képen (a szem mint optikai rendszer feloldóképességéből adódóan) milliméterenként kb. 10 pontot tudunk megkülönböztetni. Így a 0,3 mm-es szakasszal elválasztott két képpontot jó eséllyel két pontnak látjuk, hiszen a szakaszon belül is meg tudunk különböztetni legalább két különálló pontot. Ha a nagyítást fokozzuk, például 20× okulárral, akkor az objektív NA-ja által meghatározott 300 nm-es távolságot 0,6 mm-re nagyítjuk. Ez felesleges, hiszen az objektív feloldóképessége miatt ebben az esetben is csak a 0,6 mm-es szakasz két végén láthatunk egy-egy pontot, míg ilyen nagy nagyítás mellett a szemünkkel már legalább 6 különálló pontot tudnánk a szakaszon megkülönböztetni. Általában követhetjük azt a szabályt, hogy az objektív NA-jának 1000-szeresét meghaladó nagyítást alkalmazni felesleges.

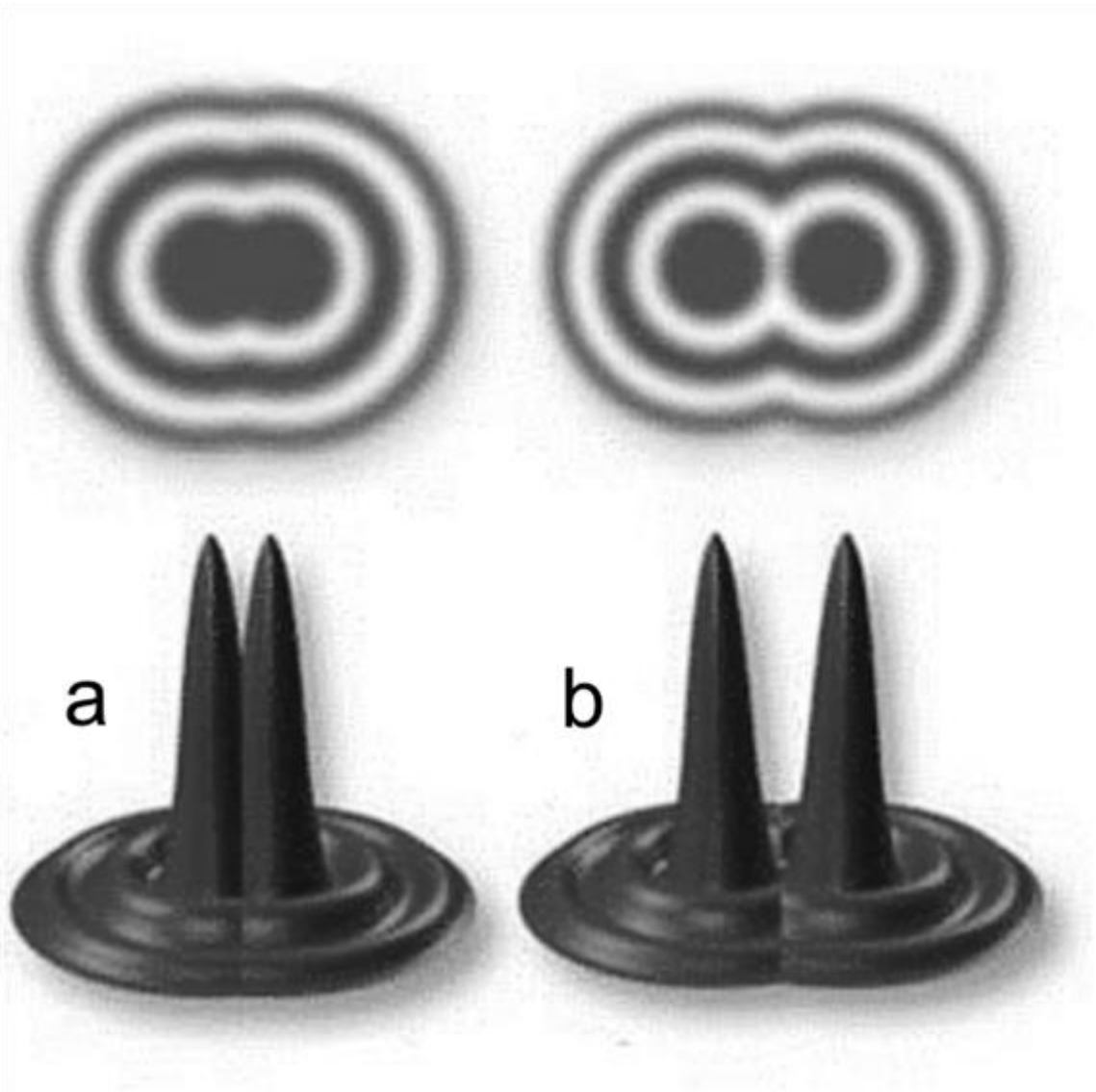
Nem szabad a feloldást, ill. feloldóképességet az észlelhetőséggel összetéveszteni. Az utóbbi nem két pont elkülöníthetőségére vonatkozik, hanem arra, hogy egyetlen pontnak önállóan, milyen „nagy” kell lennie, és milyen sötétnek (vagy fényesnek) a környezetéhez képest (a kontraszt fontosabb, mint az abszolút fényesség!), ahhoz, hogy észlelhessük. Az észlelés nem jelenti azt, hogy a tárgy alakját, nagyságát megítélhetjük (lásd ultramikroszkóp).

Felbontóképesség értelmezése nem periodikus tárgy esetén

Ha a minta nem optikai rács, akkor egy kicsit más gondolatmenetet kell alkalmaznunk a felbontóképesség megfogalmazására. A tárgy egyes pontjaiból érkező fénysugarak ugyanis általánosan az objektív nyílásán elhajlást szenvednek. Ennek következményeként a képpontok helyett koncentrikus körök formájában megjelenő erősítési és kioltási helyek sorozata alakul ki. Egyetlen tárgypont elhajlási képét Airy-korongnak nevezik. Annál kisebb az Airy-korong átmérője, minél nagyobb az objektív numerikus apertúrája, ahogy azt az 1. ábra mutatja. Akkor mondhatjuk, hogy két közeli pont még éppen feloldott, ha az egyik Airy-korong maximuma éppen a másik első minimumába esik (l. 2. ábra).



1. ábra. Különböző numerikus apertúrájú objektívek esetén kialakuló Airy-korongok

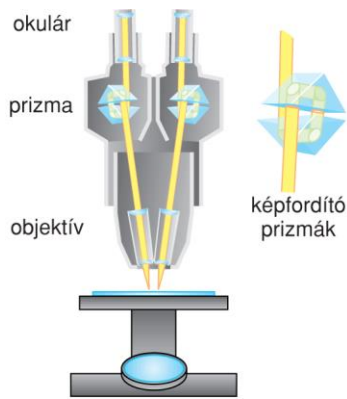


2. ábra. Nem felbontott a) és éppen felbontott b) közeli pontok elhajlási képei (Airy-korongok)

2.3. VI/2.3. Speciális mikroszkópok

2.3.1. VI/2.3.1. Sztereomikroszkóp

Térbeli képet úgy kapunk, hogy a szemeink által ugyanarról a tárgyról alkotott két, kicsit különböző képet az agyunk „összerakja”. Sztereomikroszkópot tehát úgy készíthetünk, ha összeépítünk két mikroszkóptubust, amelyek mindegyike tartalmaz egy-egy objektív- és okulárlencsét. A két összeépített mikroszkóp egyike jobbról, a másik balról képezi le a tárgyat. A tubusok tengelyei által bezárt szög 14 fok körüli, ami megegyezik a két szem tengelye által bezárt szöggel. Fontos része még a sztereomikroszkópnak a képfordító prizmarendszer, melynek segítségével a kép egyenes állásúvá és oldalhelyessé válik (l. VI.12. ábra). Más tervezésű sztereomikroszkópokban csak egy (nagyobb apertúrájú) objektív van, és egy prizmarendszerrel a mintából kijövő kicsit balról és kicsit jobbról érkező sugarakat úgy kezelik, mintha két önálló nyaláb lenne, így végeredményben ténylegesen térbeli képet látunk. (Ez utóbbi technika nem azonos a binokuláris lencsével, amikor két szemlencse könnyíti meg a megfigyelést.) A sztereomikroszkóp a mikroszkópban elengedhetetlen segédeszköz.



VI.12. ábra. A sztereomikroszkóp felépítése

2.3.2. VI/2.3.2. Ultramikroszkóp

Mindenki ismeri a leengedett redőny csíkjai között besütő napfényben táncoló milliónyi porszem látványát. Élénken világítanak az oldalfényt kapott, egyébként láthatatlan részecskék. Lényegében ez történik a sötét látóteres mikroszkóp (ultramikroszkóp) esetében is, amikor speciális kondenzorral a megvilágító fénykúp központi sugarait kiiktatva (mintegy körkörösén, oldalról) világítjuk meg a mintát. Csak az „indirekt” fénysugarak vesznek részt a képképzésben, melyek a minta részletein szóródva jutnak be a mikroszkóp tárgylencséjébe. Ez a módszer lehetővé teszi például kis fényszóró objektumok látótérben való mozgásának a megfigyelését. A direkt nyaláb kikapuzása miatt az objektumok „valódi” színe is meghatározható. Lényeges, hogy a sötét háttér miatt a készülékben a felismerhetőség alsó határa csökken, olyan kis méretek is láthatóvá válnak, melyek azonos felbontású világos mezőjű megvilágítás esetén nem.

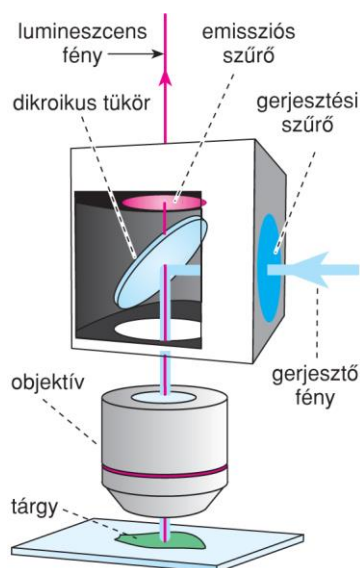
2.3.3. VI/2.3.3. Fluoreszcenciamikroszkóp

A fluoreszcenciamikroszkópban a mintáknak a megvilágító fény által kiváltott fluoreszcenciáját képezzük le. Ez lehet natív vagy intrinsic fluoreszcencia, mivel az élő sejteket (szöveteket) felépítő anyagok egy része (például fehérjék, egyéb szerves molekulák: pl. NADH, A-, B-, C-vitamin) fluoreszkál. Az esetek nagy részében azonban a natív fluoreszcenciát inkább kiküszöbölni igyekeznek, és szelektíven kötődő fluoreszcens festékeket (VI/3.3.3.) alkalmaznak.

A fluoreszcenciamikroszkóp működésének alapfeltétele, hogy a gerjesztést a megfelelő hullámhosszú fényrel végezzük, és az általában sokkal gyengébb emittált fényt a gerjesztőtől szétválasszuk. Így a jól konfigurált mikroszkópban csak az emittált fény juthat a szemünkbe, amely általában jól elválik a sötét háttértől (ezért fontos, hogy minél kevesebb legyen az autofluoreszcencia az éppen alkalmazott gerjesztéssel).

Az optimális gerjesztési hullámhossz tartományt a lámpa elé helyezett színes szűrővel, illetve megfelelő lézer alkalmazásával választjuk ki a használt festék abszorpciós spektrumának megfelelően, általában az ultraibolya, kék vagy zöld tartományban. Ha a gerjesztéshez ultraibolya fényre van szükség, akkor az UV fényt áteresztő speciális, kvarcból készült lencsét kell alkalmazni a megvilágító oldalon. Ma már a fluoreszcens festékek olyan széles választéka áll rendelkezésre, hogy az adott feladatok általában megoldhatók a látható fényrel gerjeszthető festékek alkalmazásával is. Így az eljárást megdrágító kvarcoptika kiküszöbölhető.

A mintából minden irányba kilépő fluoreszcencia fényt, a megfelelő színszűrővel, spektrálisan el kell választani a gerjesztő fénytől. Az **epifluoreszcens** elrendezésben (VI.13. ábra) ehhez ún. dikroikus tükröt helyeznek az okulár és az objektív közé, mely a gerjesztő fényt a mintára vetíti, de az emittált fotonokat eltérítés nélkül átengedi a megfigyelő irányába. Az emittált fotonok ezt követően még egy emissziós szűrőn is áthaladnak a jobb jel/zaj arány elérése érdekében. Ha ultraibolya fényrel gerjesztünk, akkor biztonsági okokból az okulárba is lehet UV-szűrőt tenni, a megfigyelő szemének védelmére. A modern mikroszkópokban nemcsak lámpát alkalmazhatnak megvilágító fényforrásként, hanem lézereket is, például argon-ion vagy argon-kripton (ion) vagy hélium-neon lézert. Lézerek alkalmazása esetén gerjesztési színszűrőt nem kell használni, a megvilágító fény nagy intenzitású és igen jól fókuszálható (lásd II/2.2.8.).



VI.13. ábra. Epifluoreszcens elrendezés

Dikroikus tükör

A dikroikus tükör egy olyan tükör, amely visszaveri a fényt bizonyos (pl. a gerjesztő) hullámhossztartományban és átengedi a többi (pl. emissziós) tartományokba eső fotonokat. Az epifluoreszcens elrendezésnek, mely a dikroikus tükör egyik legfontosabb alkalmazási helye a mikroszkópiában, több előnye is van. Az objektív egy tökéletesen beállított kondenzor, hiszen ugyanaz a lencse végzi a megvilágítást és a detektálást. A gerjesztő fény nagy része ebben az elrendezésben átmegy a mintán, az objektívbe nem jut be, csak a gyenge szórt fény, így azt könnyebb kiszűrni. Az emittált fény az objektíven keresztül jut vissza a dikroikus tükörrre, amelyen áthaladva az okulárba jut. Természetesen a színek szétválasztása sohasem tökéletes, ezért általában még további színszűrőket is tesznek a gerjesztő és emissziós oldalra. Az alkalmazott fluoreszcens festék spektruma alapján kell a megfelelő szűrő és dikroikus tükör kombinációt kiválasztani, ezeket már a leggyakrabban használt fluoreszcens festékekhez összeállítva lehet kapni.

2.3.4. VI/2.3.4. Polarizációs mikroszkóp

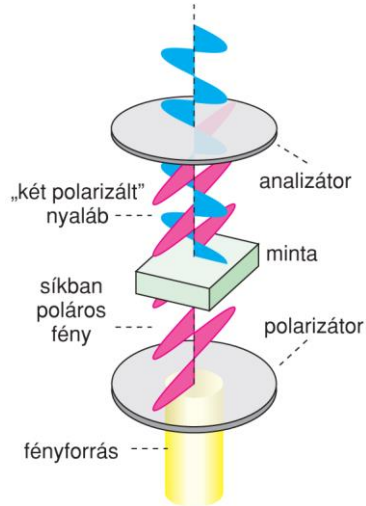
A polarizációs mikroszkópot kettősen törő anyagok vizsgálatára használjuk (lásd II/2.1.7. rész). Kettős törést olyan anyagok mutatnak, amelyekben a fényre vonatkozó törésmutató (ill. terjedési sebesség) különböző irányokban különböző. Ezt a tulajdonságot nevezzük optikai anizotrópiának. Az iránytól függő törésmutató mindig bizonyos rendezettséget mutató belső szerkezet következménye. Kettős törést mutat a kristályok nagy része, a folyadékkristályos struktúrák (például a sejtmembrán, harántcsíktolt izmok, idegsejtek mielinhüvelye), vagy például áramoltatással rendezett fonalszerű makromolekulák (áramoltatási kettőstörés).

A polarizációs mikroszkóp felépítése látható a VI.14. ábrán. A megvilágító fényt egy polarizátor segítségével polarizáljuk. Ez a lineárisan poláros fény jut a tárgyra. A tárgyasztal forgatható, ennek forgatásával állítható be a legkedvezőbb helyzet, amikor a polarizációs sík és a tárgy optikai tengelye által bezárt szög 45° . Legyen a tárgyunk egy kettősen törő részletet tartalmazó, másutt izotrop tárgy. Az izotrop részekben áthaladó fény polarizációja nem változik, az anizotrop (kettősen törő) részen áthaladva viszont cirkulárisan (általánosabban elliptikusan) poláros fényre alakul (lásd II/2.1.7. rész). Ez jut az objektívbe. Az objektív és az okulár között van egy másik polarizátor, amelyet analizátornak nevezünk, mert ezzel analizáljuk a tárgyon átjutott fényt. Az analizátor is forgatható, általában a polarizátor síkjára merőlegesen állítjuk be. Ilyen beállításnál az izotrop részekben áthaladó fény nem jut át az analizátoron, viszont a kettősen törő részen cirkulárisan polárossá vált fény az analizátor állásától függetlenül mindig átjut. (Elliptikusan poláros esetben az analizátor állásától függően jut át több vagy kevesebb fény.) Így az okulárba csak az anizotrop tárgy részletről érkező fénysugarak jutnak, tehát a mikroszkópba tekintve csak a kettősen törő tárgy részletet látjuk.

A valóságban a mikroszkópba tekintve a kettősen törő részleteket színesnek látjuk. Ennek magyarázata az, hogy az anizotrop tárgy részleteken áthaladó fény valójában elliptikusan poláros, és az ellipszis két tengelyének iránya és aránya a hullámhossztól is függ. Előfordul, hogy egy adott hullámhosszon az ellipszis tengelye 0, azaz a kilépő fény lineárisan poláros, a polarizáció iránya pedig az analizátor polarizációs irányára merőleges. Emiatt

az analízátor kioltja a fényt az adott hullámhosszon. Így az adott tárgy részlet színeként a kioltott sugarak kiegészítő színét látjuk.

Gyakran vizsgálunk polarizációs mikroszkóppal kristályokat, illetve polimereket. Példaként DNS-molekulák koncentrált (c nagyobb, mint 300 mg/ml), már folyadékkristályos szerkezettel rendelkező oldatának képét mutatjuk be polarizációs mikroszkóppal készült felvételen (VI.15. ábra).



VI.14. ábra. Polarizációs mikroszkóp felépítése



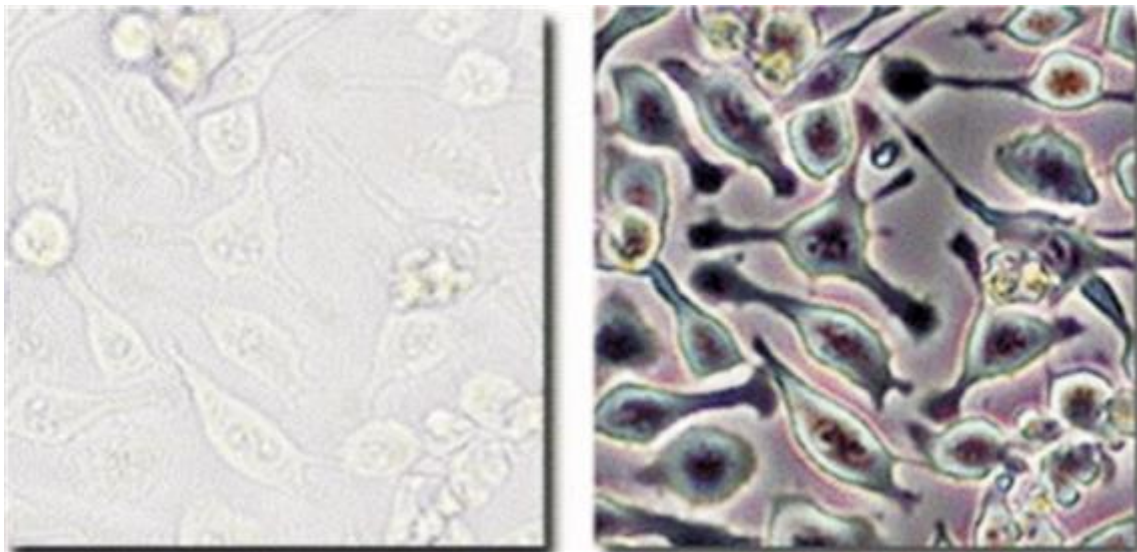
VI.15. ábra. Kettősen törő folyadékkristály fázisú pálcikaszerű DNS-molekulák nagy koncentrációban. Polarizációs mikroszkópban készült felvétel

2.3.5. VI/2.3.5. Fáziskontraszt-mikroszkóp

A fáziskontraszt-eljárást először Frits Zernike (1888–1966) holland fizikus írta le 1934-ben. Fáziskontraszt-eljárással a kontrasztot lehet növelni az egyébként átlátszó biológiai mintákban, például a sejtekben, szövetekben, mikroorganizmusokban (VI.16. ábra). Ez az optikai módszer a fény fázisában jelentkező, a szemünk számára láthatatlan különbségeket amplitúdóbeli, intenzitásbeli különbségekké alakítja (lásd „A fáziskontraszt-eljárás lényege” című keretezett részt). Az eljárásnak az a nagy előnye, hogy a sejtek megfigyeléséhez nincs szükség fixálásra és festésre, így időbeli folyamatok is vizsgálhatók.



Frits Zernike (1888–1966). A fáziskontraszt eljárás kidolgozásáért 1953-ban kapott Nobel-díjat.



VI.16. ábra. Fénymikroszkópban a) és fáziskontraszt mikroszkópban b) készült felvételek. Emberi glia agysejtek egyrétegű sejt-kultúrában. A sejtenyésző médium aminosavakat, vitaminokat, ásványi sókat és szérumot tartalmaz

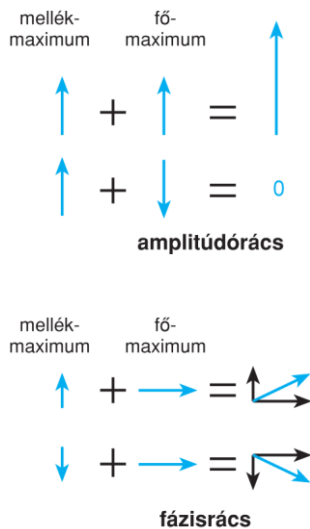
A fáziskontraszt-eljárás lényege

A VI/2.2.2. részben a felbontóképesség tárgyalásánál már említettük azt, hogy az optikai rács (amplitúdórács) leképezésekor az objektív fókusz síkjában megjelenő **nulladrendű, főmaximumhoz tartozó nyaláb** nem hordoz a tárgyról információt, és emiatt **kitüntetett** a többi magasabb rendű mellékmaximumhoz tartozó nyalábbal szemben. Ettől függetlenül a képalkotásban fontos szerepet játszik. Ha ugyanis azt az ideális esetet tételezzük fel, hogy az összes magasabb rendű mellékmaximumhoz tartozó nyaláb részt vesz a képalkotásban, de valamilyen módon a nulladrendűt ebben meggátoljuk (például egyszerűen kitakarjuk), akkor ugyanúgy nem kapunk képet, mint abban az esetben, amikor csak a nulladrendűt engedjük be az objektívba. A mellékmaximumokból kiinduló hullámok interferenciájának eredményeképpen ugyanis a közbülső képsíkban a hullámok eredő amplitúdója (aminek négyzetével arányos a fényintenzitás) a képpont x koordinátájának függvényében 0 körül, $-A_{\max}$ és $+A_{\max}$ között ugráló (négyzetű) függvény. Amennyiben ehhez nem adjuk hozzá a főmaximumból érkező minden x koordinátában A_{\max} amplitúdóval rendelkező hullámot, akkor a fényintenzitás $J \sim (A_{\max})^2 = = (-A_{\max})^2 =$ állandó értékű lesz. A főmaximumból érkező hullám tehát éppen azt eredményezi, hogy az eredetileg $-A_{\max}$ és $+A_{\max}$ között ugráló függvényt 0 és $2A_{\max}$ közé tolja. Ennek eredményeként a kép intenzitás-eloszlását az $J_1 \sim 0^2 = 0$ (sötét) és $J_2 \sim (2A_{\max})^2 = 4A_{\max}^2$ (világos) helyek váltakozása adja meg.

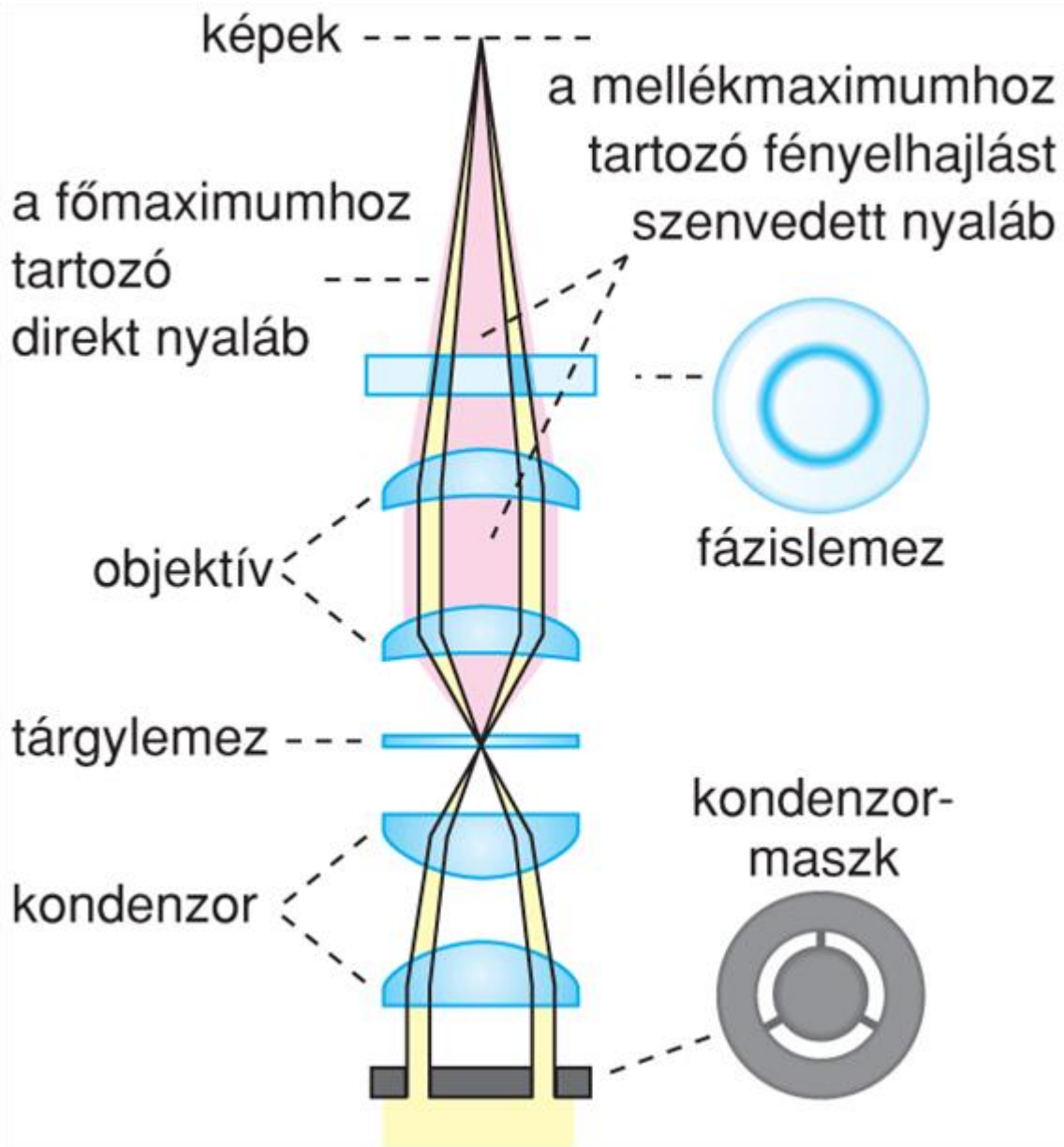
Fázisrács esetén hasonló a helyzet, de ott a mellékmaximumokból kiinduló hullámok eredőjének fázisa éppen 90° -kal eltér a nulladrendűek fázisától (ráadásul a nulladrendű sokkal nagyobb amplitúdójú is), így hiába adjuk össze őket, az eredő hullám amplitúdója továbbra is változatlan marad, csak a fázis változik a képpont x koordinátájának függvényében (lásd 1. ábra).

A fáziskontraszt-eljárás lényege az, hogy a direkt nyaláb amplitúdóját is lecsökkentik, a fázisát pedig késleltetik, vagy siettetik 90° -kal.

A kondenzor alaplencséje alatt átlátszó gyűrűt tartalmazó üveglapot helyeznek el (lásd 2. ábra), amely a fényforrás képét gyűrű alakúra alakítja, vagyis egy világító kúppalástot kapunk. Egy fázistárgyat ilyen kondenzorral világítva meg az objektív hátsó gyújtósíkjában gyűrű alakú diffrakciós maximumokat látnánk. Az objektív hátsó gyújtósíkjába (felületére) gyűrű alakban olyan réteget párologtatnak (fázislemez), amely egyrészt elnyeli a direkt fény egy részét, másrészt 90° -os (negatív, világos kontraszt) vagy -90° -os (pozitív, sötét kontraszt) fáziseltolást okoz. Sötét kontraszt esetén jelentősen csökken a nagyobb törésmutatójú pontok intenzitása a környezetükkel azonos törésmutatójú pontokéhoz képest. A környezetüknél kisebb törésmutatójú pontokon fázissietés következik be, amelyet a fázisgyűrű kompenzál, így az ott áthaladó hullámok a szórt hullámokkal körülbelül azonos fázisban érkeznek, interferenciájuk erősítést eredményez, ezért ezen pontok képe a legvilágosabb. Világos kontraszt esetén a nagyobb törésmutatójú objektumok képe a környezetüknél világosabb lesz, míg a kisebb törésmutatójú pontok képe az átlagos törésmutatójúakéhoz képest sötétebb lesz.



1. ábra. Az amplitúdóvektor iránya és nagysága a képsíkban amplitúdórács és fázisrács esetében. **Amplitúdórács:** a tárgy periodikusan átereszt, illetve nem ereszt át a fényt. Az amplitúdórács a nagy és kicsi abszorpciójú struktúrákat váltakozva tartalmazó mikroszkópos tárgy modellje. **Fázisrács:** a tárgy részletei egymástól periodikusan vastagságban, vagy törésmutatóban különbözhetnek, ami a kilépő fénynek csak a fázisát befolyásolja, így a tárgy mindenhol „egyformán” átereszt a fényt. A fázisrács jól modellezi az élő sejteket, ahol az egyes sejtalkotók abszorpciója nem tér el lényegesen de törésmutatójuk igen. (Szemünk a fázisváltozásokat nem érzékeli.)



2. ábra. Fáziskontraszt-mikroszkóp szerkezete sematikusan ábrázolva

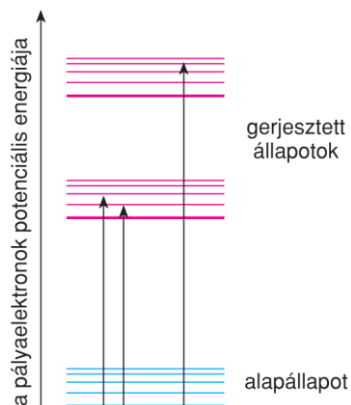
3. VI/3. Optikai spektroszkópiai módszerek

Mint azt az előzőekben tárgyaltuk (I/1. fejezet), az atomok és molekulák elektronjai különböző, jól meghatározott (kvantált) energiájú állapotokban létezhetnek. Több atomból álló molekulák esetén az elektronoknak a kvantumszámokkal jellemezhető energiaállapotait kismértékben megváltoztatják a molekula rezgési és forgási állapotai. A VI.17. ábrán látható nívók a molekula leglazábban kötött – külső – elektronjainak lehetséges állapotait szemléltetik, a legalacsonyabb energiájú **alapállapotnak**, ill. a betölthető – **gerjesztett** – további állapotoknak megfelelően. Az elektronpopuláció e szintek közötti eloszlását (adott energiaszinten tartózkodó elektronok relatív gyakoriságát) a Boltzmann-eloszlás írja le (I/3.1. fejezet).

A leírtaknak megfelelően azt várjuk, hogy ha az alapállapot valamely szintjén található elektronnal pontosan akkora energiát közlünk, ami megfelel valamely magasabb kötött állapot energiaszintje és az adott alapszint energiája közötti különbségnek, akkor az elektron gerjesztett (magasabb energiájú) állapotba kerül (lásd felfelé mutató nyilak az ábrán). A molekulák elektronjainak energiaszintjeit, és így a gerjesztéshez szükséges fotonok hullámhosszát is a molekula szerkezete határozza meg. Ennek megfelelően, ha egy molekuláris rendszert az energiarendszerének megfelelő energiájú (hullámhosszú) fényel világítunk meg, a rendszer képes bizonyos

energiájú fotonokat abszorbeálni, amelyek energiája révén az elektronok magasabb diszkrét energiájú kötött állapotba, gerjesztett állapotbakerülnek.

A gerjesztett állapot az eredeti energiaállapothoz képest magasabb energiaszintet képvisel, így a gerjesztés után a rendszer (különböző kölcsönhatások révén) a többlet energiáját igyekszik leadni és visszakerülni az alapállapotba. Ez a folyamat a legtöbb esetben a 10^{-12} szekundumos időskálán lejátszódik, és sok kis lépésben hőleadást jelent a környezetének. Kivételesen előfordulhat, hogy a gerjesztési energia (nagy része) a két diszkrét energiaállapot energiakülönbségének megfelelő energiájú fényemisszióval egy lépésben kerül leadásra. Ez a **lumineszcencia** jelensége (II/2.2.4. rész).



VI.17 ábra. A pályaelektronok diszkrét energiaállapotai a legkülső betöltött nívótól mint alapállapotból kiindulva

3.1. VI/3.1. Abszorpciós spektroszkópia az UV– és a látható tartományban

Az abszorpciós spektroszkópia a fényabszorpció jelenségét használja fel híg oldatok minőségi és mennyiségi vizsgálatára.

3.1.1. VI/3.1.1. Fényelnyelés híg oldatokban

Tekintve hogy az atomi és a molekuláris rendszerek elektronjainak energia-term szerkezete (a lehetséges energiaértékek rendszere) az illető atom, illetve molekula jellemzője, a fény abszorpciójának mértéke, illetve hullámhosszfüggése mind kvalitatív, mind kvantitatív információt adhat az abszorbeáló rendszerről.

A fény intenzitásának gyengülése az abszorpció révén olyan jelenség, amelyre érvényes az intenzitásgyengülés általános törvénye (lásd II/1.1.3.),

$$J_E = J_{E_0} e^{-\mu x}, \quad (\text{VI.29})$$

ahol J_{E_0} a belépő, J_E az abszorpció révén gyengített intenzitás, x a rétegvastagság és μ az abszorpciós együttható. A törvénynek gyakorlati szempontból az a formája különösen érdekes, amely az oldatokban lejátszódó fényabszorpcióra érvényes. Analitikai alkalmazásokban (labor diagnosztikai, biokémiai módszerek) ugyanis a vizsgálandó anyagok általában oldat formájában fordulnak elő. Amennyiben az oldat híg oldatnak tekinthető, azaz az oldószerben oldott részecskék egymástól függetlenek (egymás elektronállapotait nem befolyásolják), a μ abszorpciós együtthatónak az abszorbeáló közegben levő anyagmennyiségtől való függését a c moláris koncentrációval egyszerűen ki lehet fejezni:

$$\mu = c \cdot \varepsilon^*(\lambda), \quad (\text{VI.30})$$

Így az abszorbeáló részecskék mennyiségét a c -vel, és a minőségét az $\varepsilon^*(\lambda)$ -val, egy a λ -tól függő anyagra jellemző együtthatóval, szorzat formájában lehet tekintetbe venni. Ez utóbbi minőségi jellemző foglalja magában, hogy az adott λ hullámhossz (fotonenergia) illeszkedik-e a molekula elektronszerkezetéhez, azaz fel tudja-e használni az elektronrendszer gerjesztett állapot kialakítására. Az általános abszorpciós törvény híg oldatok fényabszorpciójára érvényes formáját:

$$J_E = J_{E0} e^{-c \cdot \epsilon^*(\lambda) \cdot l} \quad (\text{VI.31})$$

Lambert–Beer-törvénynek nevezzük. A kifejezésben $x = l$ az oldatot tartó négyszög alakú üvegküvetta által kialakított rétegvastagság (VI.18. ábra).

Gyakorlati célokra alkalmasabb formáját kapjuk a (VI.31) egyenletnek 10-es alapú exponenciális függvény formájában:

$$J_E = J_{E0} \cdot 10^{-\epsilon(\lambda) \cdot c \cdot l}$$

(VI.32)

ahol az $\epsilon(\lambda) = \lg e \epsilon^*(\lambda)$ a dekadikus **moláris extinkciós együttható** (röviden csak moláris extinkciós együttható), dimenziója $\text{l mol}^{-1} \text{m}^{-1}$.

A fény abszorpciójának mértékét kifejező paraméter lehet a **transzmittancia** vagy **áteresztőképesség** (T), ami az áthaladó és beeső fény intenzitásának hányadosa:

$$T = \frac{J}{J_{E0}} \quad (\text{VI.33})$$

Elterjedtebben használatos másik paraméter az optikai sűrűség (optikai denzitás: OD) vagy **abszorbancia** (A), ami az alábbi módon definiálható:

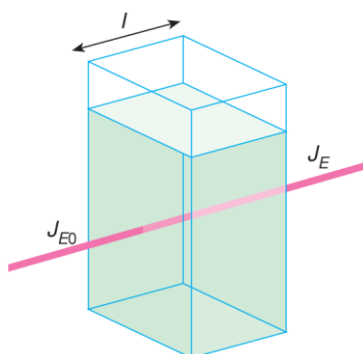
$$A = \log_{10} \left(\frac{J_{E0}}{J_E} \right) = \epsilon(\lambda) c l$$

(VI.34)

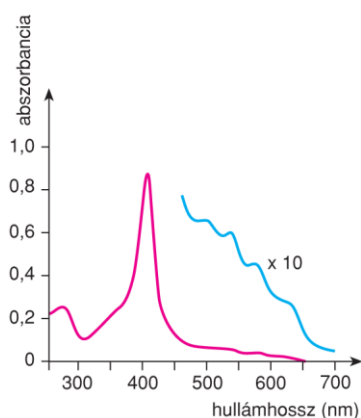
A transzmittancia és az abszorbancia a J és J_0 értékek meghatározásával közvetlenül mérhető mennyiségek. Az abszorbancia alkalmazása a gyakorlatban azonban jobban elterjedt, elsősorban azért, mert híg oldatokban egyenesen arányos a koncentrációval, ha a mérés hullámhossza és így az $\epsilon(\lambda)$ nem változik.

Láttuk, hogy az oldatok abszorbanciája függ a megvilágító fény hullámhosszától. Különböző hullámhosszú fényt alkalmazva tanulmányozható az abszorbancia hullámhosszfüggése, amit **abszorpciós spektrumnak** nevezünk. A spektrum értékes információt szolgáltat az atomi, molekuláris és szupramolekuláris rendszerek elektronszerkezetéről, annak változásairól. A hemoglobinmolekula vizes oldatának abszorpciós spektrumát a VI.19. ábra mutatja be. Azok a hullámhosszak (fotonenergiák), amelyeknél az abszorbancia nagy értékkel rendelkezik, egy-egy nagy valószínűséggel bekövetkező diszkrét elektronátmenetnek felelnek meg.

Az abszorpciós spektrum a közvetlenül mérhető abszorbancián keresztül az $\epsilon(\lambda)$ függvényre jellemző, abból ez a függvény a c és λ paraméterek ismeretében meghatározható. Ha olyan oldatot vizsgálunk, amelynek $\epsilon(\lambda)$ függvényét már előzőleg meghatároztuk, akkor az abszorbancia mérésével az oldat koncentrációját meg tudjuk határozni. Ha a mérést olyan hullámhossznál végezzük el, ahol $\epsilon(\lambda)$ nagy értékű (az abszorpciós spektrumnak maximuma van), akkor kis c érték mellett is mérhető abszorbanciát tapasztalunk. Különböző abszorpciós spektrumot mutató komponensek koncentrációja ezen az alapon a megfelelő mérési hullámhosszak megválasztásával szelektíven és nagy érzékenységgel meghatározható a komponensek szétválasztása nélkül.



VI.18. ábra. Intenzitásgyengülés oldatokban

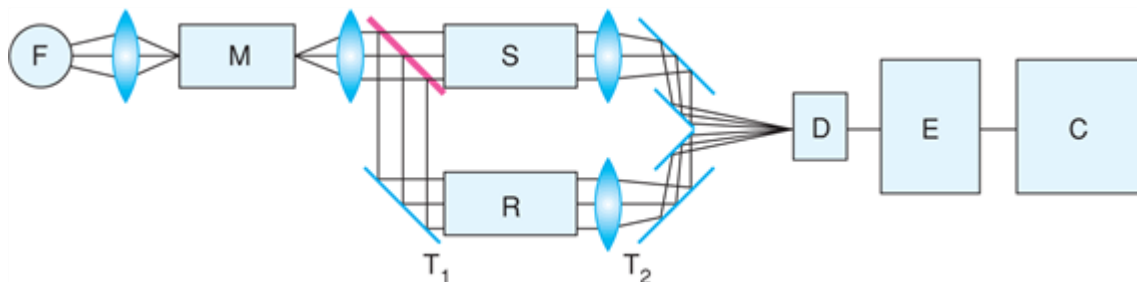


VI.19. ábra. A hemoglobin abszorpciós spektruma

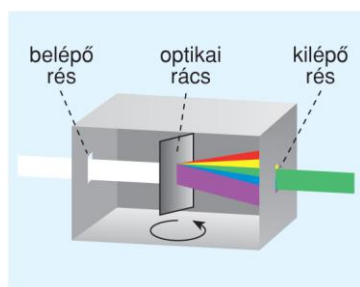
3.1.2. VI/3.1.2. Abszorpciós spektrofotométerek

Abszorpciós spektrumok meghatározására alkalmas eszközök az ún. spektrofotométerek. A készülék elrendezését tekintve megkülönböztetünk egysugaras, illetve kétsugaras készüléket, az utóbbi vázlata látható a VI.20. ábrán. Mindkét típusra jellemző, hogy a fényforrás fényét párhuzamosá kell tenni (kollimátor), s az így nyert nyalábot az ún. monokromátorba vezetni.

A monokromátor segítségével a fényforrás fényéből kiválaszthatunk egy szűk hullámhossztartományt, ami a monokromátorból a mintára jut, majd a mintán áthaladó fény intenzitását mérjük (általában fotoelektron-sokszorozó segítségével). A transzmittancia (T), illetve abszorbancia (A) definíciójából következik, hogy a beeső fény intenzitását is mérnünk kell e paraméterek meghatározásához. Ennek kivitelezése kétsugaras készülékek esetében egyszerű. Mint az ábra is mutatja, a monokromátorból kilépő fény egy mozgó tükör segítségével váltakozva világítja meg a mintát (S), illetve a referenciaoldatot (R) tartalmazó mintatartót. Egyszerű esetben a referencia az oldószer (amelynek esetleg van valamilyen elnyelése az adott hullámhosszon), míg a minta az oldat maga. A (VI.33) és a (VI.34) egyenlet segítségével belátható, hogy a beeső fényintenzitás meghatározása nélkül, a két úton (R és S) mért intenzitás hányadosának meghatározása segítségével megkapható a minta abszorbanciájának értéke. Ezt egysugaras készülékek esetében úgy érhetjük el, hogy előbb a referenciát, majd a mintát tesszük a készülékbe, s a két mérési eredményből az előbbihez hasonló módon meghatározható a minta abszorbanciája.



VI.20. ábra. A kétsugaras spektrofotométer sémája: (F fényforrás, M monokromátor, R referencia, S minta, D detektor, E elektronikus egység, C számítógép). T₁, illetve T₂ a megfelelő tükröket jelölik, amelyek a minta előtt elhelyezett mozgó tükörrel együtt lehetővé teszik, hogy a D detektor felváltva mérje a két (S, illetve R) fényúton a fényintenzitást



VI.2. megjegyzés. A *monokromátorok* olyan eszközök, amelyek a több hullámhosszú komponensből álló fényt (sugárzást) hullámhossza szerint térben elkülönülő nyalábokra bontják. Ilyen optikai elemek a prizma és a diffrakciós rács.

3.1.3. VI/3.1.3. Abszorpciós sávok a spektrumban

A fentiekben vázolt egyszerű gondolatmenet a fényabszorpció jelenségének értelmezésére nem ad választ arra, hogy mi az oka annak, hogy azonos típusú molekulák oldatainak abszorpciós spektruma nem az elméletnek megfelelő, diszkrét fotonenergiáknál/hullámhosszknál jelentkező éles maximumokból – vonalakkól – áll, hanem az abszorbanciamaximumok környezetében a spektrumot szélesebb hullámhossztartományra kiterjedő, Gauss-függvénnyel leírható, jelentősen kiszélesedett „sávok” alkotják (l. VI.19. ábra). A molekula populáció fényelnyelése a tapasztalat szerint tehát nemcsak egyetlen hullámhosszra korlátozódik, hanem az elméletileg várható energiánál kisebb és nagyobb energiájú fotonokat is – kisebb mértékben – abszorbeálhat.

Ez a jelenség azt mutatja, hogy az abszorpcióban szerepet játszó molekuláris elektronátmenet (gerjesztés) nem teljesen azonos energiakülönbségnek felel meg molekulánként, vagy valamilyen természeti törvény miatt az átmenetnek megfelelő spektrumvonal egy kiszélesedett függvény alakját veszi fel. Általában mindkét fajta jelenséget megtaláljuk. Napi rutinfeladatokban, a spektrofotometria analitikai jellegű alkalmazásaiban a mérések a szobahőmérséklet környezetében történnek, és a spektrummal jellemzett molekulák valamilyen oldószerben oldva vagy valamely oldatba vitt, ill. sejtalkotóként elhelyezkedő makromolekula komponenseként képzeldendők el. Ilyen esetben, amikor a molekulák nem vákuumban, hanem gyengébben-erősebben kölcsönható környezetben vannak, a spektrumban járulékot adó egyedi molekulák elektronenergia állapotait a mérés idején aktuális, környezettel való kölcsönhatások kismértékben megváltoztatják. Ez a hatás heterogén, így az átmeneti energiák egy eloszlással jellemezhetők. Emellett a spektrumvonalak elméleti leírása egyértelmű függvénykapcsolatokhoz vezet, amelyek azt mutatják, hogy egyetlen fajta átmenet esetén is, a hőmérséklet hatásának megfelelően kiszélesedett spektrumvonal lenne mérhető. A hőmérséklet emelése ugyanis lehetővé teszi, hogy a tiszta elektronátmenettel együtt a molekula környezetének sokféle, kis energiájú együttes mozgásai gerjeszthetők legyenek, ami a gerjeszthetőségnek megfelelő éles energiafeltételt egy eloszlásnak megfelelő tartománnyal helyettesíti. Az előző hatást **inhomogén**, a második hatást **homogén kiszélesedésnek** nevezzük.

Az abszorpciós fotometria gyakorlati problémái

Az abszorpciós fotometria fentiekben összefoglalt egyszerű elméleti alapjainak alkalmazása számos, a vizsgálati rendszer és a technikai adottság közös tulajdonságait magába foglaló problémát vet fel, amelyeket érdemes röviden sorra venni.

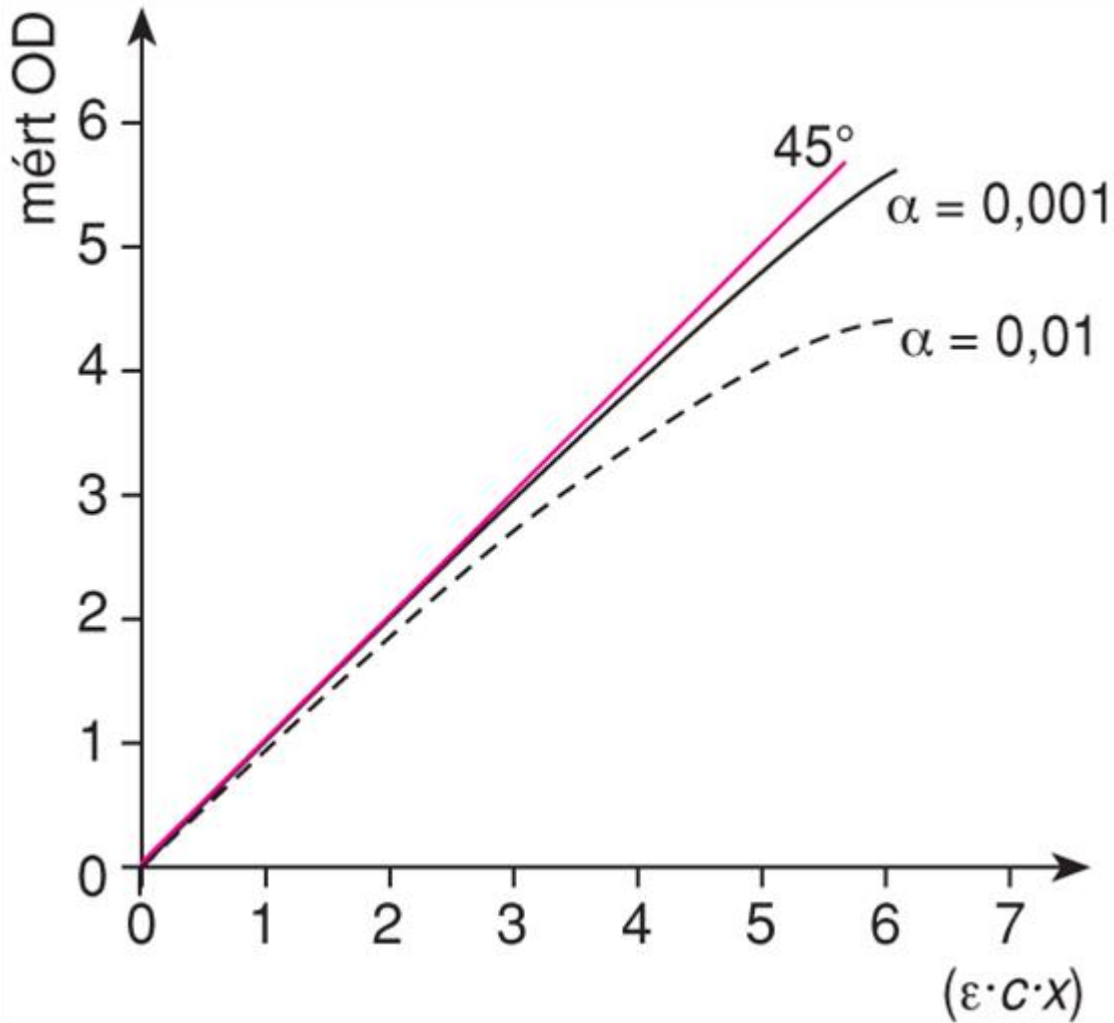
Kifehéredés. Bár a gyakorlatban használatos fényforrás intenzitása messze alul marad azon az értéken, ahol ez az effektus fellép, bonyolultabb kísérleti elrendezések esetében, ahol fényforrásként nagy teljesítményű lézert alkalmaznak, a kifehéredéssel mindenképpen számolni kell. A jelenség az indukált emisszió alapul (II/2.2.3. fejezet). Az indukált emisszió valószínűsége közel azonos az abszorpció valószínűségével. Ha a két valószínűséget azonosnak vesszük, kézenfekvő, hogy ha a közegbe lépő fény intenzitása akkora, hogy átlagosan az abszorpcióra képes molekulák fele gerjesztett állapotban tartózkodik, akkor az abszorbeált fotonok száma megegyezik az időegység alatt indukált emisszióval előálló fotonok számával. Minthogy az indukált emisszióval előálló fotonok terjedési iránya megegyezik a kiváltó fotonokéval, a rendszerből kilépő intenzitás megegyezik a belépő fényintenzitással.

Klasszikus fotometria esetében a fenti effektus inkább csak elméleti érdekesség, de meg kell jegyezni, hogy az abszorbancia és a koncentráció közötti lineáris összefüggés (VI.34) csak relatíve kis intenzitású megvilágítás mellett igaz, amikor is az abszorpcióra képes molekuláknak csak igen kis hányada (kb. 0,1%-a) van gerjesztett állapotban.

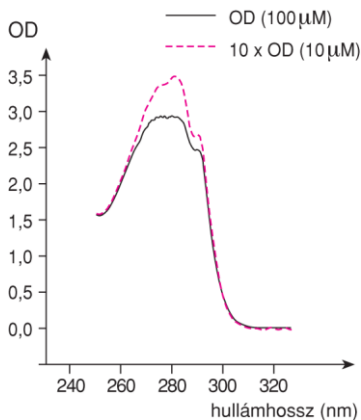
A spektrofotométer linearitása („stray light effect”). A (VI.34) egyenlet azt állítja, hogy egy oldott anyag esetében az abszorbancia lineáris függvénye a koncentrációnak. A spektrofotométerek leggyengébb pontja általában a monokromátor, ami rendszerint megszabja, hogy az adott készülék milyen abszorbancia tartományban lineáris, azaz milyen tartományban követi a mérési eredmény a (VI.34) egyenletet. A monokromátor arra szolgál, hogy a fényforrás spektrumából egy szűk (rendszerint a kísérletező által bizonyos tartományon belül meghatározható) $\lambda - \Delta\lambda$ és $\lambda + \Delta\lambda$ hullámhossztartományba eső fényt engedjen át a minta megvilágítására. Itt nem részletezett technikai okok miatt azonban – bár igen kis intenzitással – más hullámhossz tartományba eső fotonok is átjutnak, így például a kiválasztott hullámhossz felharmonikusai (pl. kétszeres, többszörös frekvenciájú). A monokromátor e tulajdonsága miatt a mintára eső fényintenzitást célszerű két részre bontva kezelni:

$$J_{E0} = (1 - \alpha)J_{E0} + \alpha J_{E0}$$

ahol a rendszerint több mint 99%-ot jelentő $(1 - \alpha)J_{E0}$ komponens a kiválasztott hullámhossz tartományba eső fényt, míg az αJ_{E0} a felharmonikus sávokba eső fotonokhoz tartozó intenzitást jelenti. A (VI.34) egyenlet a megfelelő hullámhosszú fotonokra vonatkozik (feltéve, hogy a minta nem nyeli el a felharmonikusokat), vagyis az $(1 - \alpha)J_{E0}$ intenzitás az abszorbeáló anyag koncentrációjának növelésével gyengül, míg az αJ_{E0} – bármilyen kicsi is az α értéke – állandó marad. Az α értékétől függően, az αJ_{E0} kezd összemérhető lenni az $(1 - \alpha)J_{E0}$ belépő intenzitásból megmaradt kilépő intenzitáshányaddal (VI.34), s ekkor a minta „világosabbnak” látszik, mintha az αJ_{E0} nem létezne, azaz a mért abszorbancia kisebb, mint a valóságos. Ezt szemlélteti az 1. ábra, ahol látható, hogy az α különböző értékei mellett milyen tartományban lineáris (használható) az illető spektrofotométer. Az α értéke a fotométer egyik kritikus paramétere, ami rendszerint 0,01 vagy annál kisebb érték. Az itt tárgyalt effektus spektrumtorzító hatását szemlélteti a 2. ábra, ahol látható, hogy – mivel a lineáris összefüggéstől való eltérés az abszorbancia függvénye – a spektrum torzulásának mértéke az abszorbancia növekedtével nő.



1. ábra. A spektrofotométer által érzékelt (mért) abszorbancia változása a minta abszorbanciájának függvényében az α különböző értékeinél



2. ábra. A spektrofotométer torzítása nagy abszorbanciaérték esetén. Az α -lizozim 10 μM-os oldatának tízzel megszorított abszorbanciaértékét (szaggatott vonal), illetve a 100 μM-os oldat abszorbanciáját (folytonos vonal) ábrázolja (ideális esetben a két spektrum egybeesne)

Speciális abszorpciós spektroszkópai módszerek

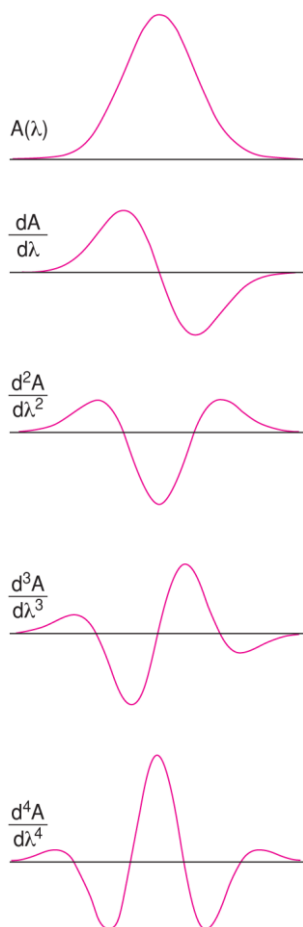
Derivatív spektroszkópia. Az optikai spektroszkópia alkalmazásaiban gyakori probléma, hogy nagy abszorbanciával rendelkező hordozó anyag jelenléte mellett kell kvalitatív és kvantitatív jellemzést adni kis mennyiségben jelen lévő hatóanyagról. Ilyen esetekre fejlesztették ki a derivatív spektroszkópia módszerét,

amikor az abszorpciós spektrum helyett annak deriváltjait vizsgálják. (A derivált függvény értelmezése: Pontonként az eredeti függvényhez húzott érintő iránytangense adja a függő változó értékét.) Az 1. ábra egyszerű abszorpciós spektrum különböző deriváltjait ábrázolja. A derivatív spektroszkópia előnye, hogy „kiemeli” a széles abszorpciós sávra szuperponálódó szűkebb abszorpciós sávot.

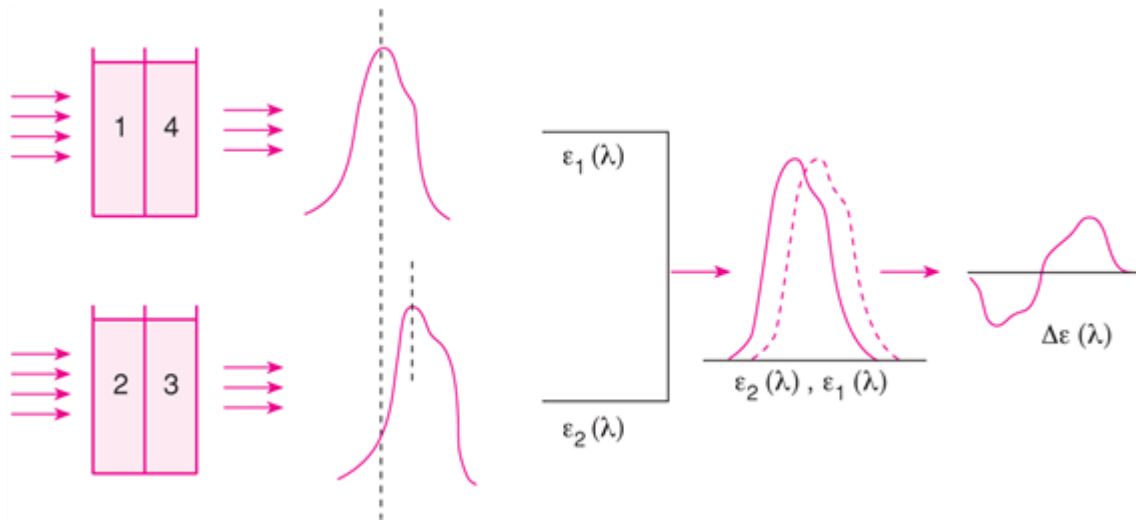
A derivált spektrum az egyes komponensek moláris abszorpciós koefficiensei helyett azok deriváltjaival arányos. Ennek megfelelően az éles, keskeny abszorpciós sávval rendelkező anyagok hozzájárulása a derivált spektrumban megnő a széles sávú – lassan változó – abszorpcióval jellemezhető anyagokéval szemben. A módszer leggyakoribb alkalmazási területe a gyógyszeripar, a kozmetikai ipar, de gyakran alkalmazható biokémiai mérések esetén is.

Differenciaspektroszkópia. A derivatív spektroszkópia analójaként is felfogható a differenciaspektroszkópia. Ez a módszer például jól alkalmazható egy reakció termékeinek és a kiindulási anyagoknak az elkülönítésére. A mérést a 2. ábra szemlélteti kétsugaras fotométer esetében (egysugaras fotométer alkalmazásával ezt egymás utáni mérések segítségével végezhetjük el). A végeredményt jelentő $\Delta\varepsilon(\lambda)$ spektrum jól jelzi a reakció létrejöttét kis spektrális változások esetén is.

Lyukégetéses (hole burning) spektroszkópiai mérések. Az abszorpciós módszereknek egy speciális változata az ún. lyukégetéses spektroszkópia. Ez a módszer azon alapszik, hogy határozott fotonenergiával (pl. lézerténnyel) kiváltott abszorpció során a kialakult gerjesztett állapotú molekulák irreverzibilis vagy időleges reakciókba, kölcsönhatásba léphetnek a környező molekulákkal, és emiatt spektrumváltozást szenvednek. Ha ezen időtartam alatt újabb spektrummérést végzünk az abszorpciós maximumnak megfelelő szélességű sávban, akkor a gerjesztési átmenetnek megfelelő éles fotonenergiánál (hullámhossznál) egy éles negatív spektrumvonalként jelentkezni fog az átalakult molekulák járulékának hiánya, „spektrális lyuk” keletkezik. A jelenség először az NMR-spektroszkópiában vált ismertté. Míg ott rádiófrekvenciás telítési jelenségnek nevezzük, ami időben relaxálódik, addig ennek optikai analógja hosszú ideig vagy akár permanensen is fennállhat, ha a mintát alacsony hőmérsékleten tartjuk. A módszer alkalmas egy nagyobb rendezett rendszerbe (pl. fehérjébe) ágyazott, fényelnyelésre képes molekula (funkcionális csoport) elektronrendszere és a beágyazó környezet kölcsönhatásának vizsgálatára a nagy felbontással meghatározott negatív spektrumvonal alapján.



1. ábra. Az abszorbanca hullámhosszfüggése és annak 1., 2., 3. és 4. deriváltja



2. ábra. A differencia-spektroszkópia elve. 1 és 4 az egyik, illetve másik vegyületet tartalmazó, 2 és 3 pedig a két vegyületet együttesen tartalmazó kűvetta

3.2. VI/3.2. Infravörös spektroszkópia

Az infravörös fény tartományát spektroszkópiai szempontból három részre osztjuk:

A látható fény hullámhossztartománya mellett közvetlenül ($\lambda = 800 \text{ nm} - 2,5 \mu\text{m}$) a közeli infravörös (NIR = near infrared), utána pedig ($\lambda = 2,5 - 50 \mu\text{m}$) a közép infravörös (MIR vagy MID-IR = mid infrared) tartomány helyezkedik el. Ez utóbbi lesz a legérdekesebb számunkra. Az ebbe a tartományba eső fény gerjesztheti azokat a molekularezgéseket, melyek segítségével vegyületeket lehet azonosítani, illetve e rezgési frekvenciák változásai tudósítanak a molekuláris környezet változásairól. A harmadik infravörös tartomány a távoli (FIR = far infrared) régió ($\lambda = 50 - 1000 \mu\text{m}$), mely főleg a molekulák forgásáról szolgáltat információkat.

Egyszerű példa: kétatomos molekula rezgései

Vegyünk egy egyszerű kétatomos molekulát, amely egy m_1 és egy m_2 tömegű atomból áll (mint például a CO-molekula). Az atomok közti kovalens kötés mechanikai szempontból egy rugóval közelíthető, ahol az egyensúlyi kötéstávolság a rugó hossza. Az atomok közelítése vagy eltávolítása (az egyensúlyi magtávolsághoz képest) energiát igényel, ugyanúgy, mint a rugó összenyomása vagy megnyújtása. Az ideális rugó energiája $E_{\text{rugó}} = 1/2 D \cdot x^2$ alakba írható, ahol D a rugóállandó, x pedig az egyensúlyi helyzettől való távolság. Az $E_{\text{rugó}}(x)$ függvény egy parabolával ábrázolható. A kovalens kötésben levő atomok közti kölcsönhatási energia távolságfüggése is közelíthető parabolával az egyensúlyi magtávolság (a görbe minimuma) körüli kis tartományban (1. ábra). Amíg ez a közelítés érvényes, az atomok közti erőt modellezhetjük egy rugó erejével. Ebben a modellben a rugó két végén egy-egy tömegpont van, ezek a molekulánkat alkotó atomok. Pontosabban az atom kötőelektronjai tulajdonképpen a rugót alkotják, azonban az atom tömegét döntően az atommag határozza meg, az elektronok a tömeg szempontjából elhanyagolhatók. Ugyanígy a rugót is tömeg nélkülinek tekintjük.

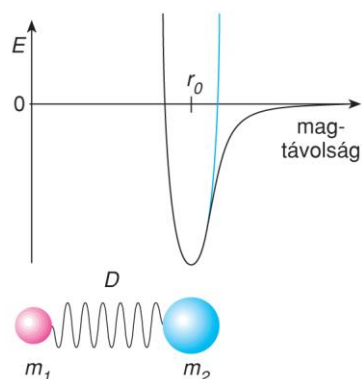
Határozzuk most meg a rugóval összekötött tömegpontok rezgésének saját frekvenciáját! A rendszer a tömegközéppontja körül fog rezegni, ami a nehezebb atomhoz van közelebb. Így a rezgési amplitúdók sem lesznek azonosak, a könnyebb atom nagyobb kitéréssel rezeg, mint a nehezebb. A tömegközéppont helyben marad, ezért a rugót ebben a pontban akár rögzíthetjük is. Ez után elég az egyik test mozgását analizálnunk, hogy megkapjuk a rezgési frekvenciát. Így visszavezethetjük a problémát a középiskolából jól ismert esetre, a rugóra rögzített tömegpont rezgésére. Ennek a rendszernek a saját frekvenciája:

$$t = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D_2}{m_2}}$$

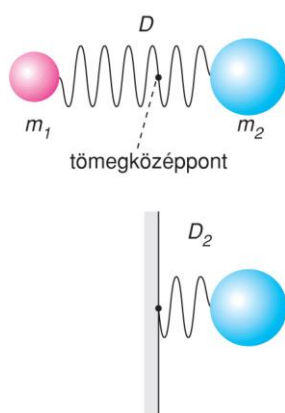
ahol D_2 a tömegközéppontot az m_2 tömeggel összekötő rugószakasz rugóállandója. Könnyen belátható, hogy $D_2 = D \cdot m_1 / (m_1 + m_2)$. Így a kétatomos molekulamodellünk rezgési frekvenciája, az ún. saját frekvencia:

$$t = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D_2}{m_2}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{D \frac{m_1 + m_2}{m_1 \cdot m_2}}$$

A szén- és oxigénatom tömegét ($m_c = 2,0 \cdot 10^{-26}$ kg, $m_o = 2,7 \cdot 10^{-26}$ kg) behelyettesítve, valamint a kovalens kötés rugóállandóját $D \gg 10^3$ N/m-rel közelítve a CO-molekula esetén $4,7 \cdot 10^{13}$ Hz-es frekvenciát kapunk. Elektromágneses sugárzás esetén ennek a $6,4 \mu\text{m}$ -es hullámhossz felel meg, ami a középső infravörös tartományba esik.



1. ábra. A kétatomos molekula potenciális energiája a két atommag távolságának függvényében. A kék görbe mutatja a parabolával való közelítést az egyensúlyi magtávolság (r_0) közelében. Alul parabolikus energiaközelítéshez tartozó rugós modell



2. ábra. Egy kétatomos molekula klasszikus mechanikai modellje (fent). Alul látszik, hogyan lehet a számolást leegyszerűsíteni a tömegközéppont rögzítésével

3.2.1. VI/3.2.1. A molekularezgések

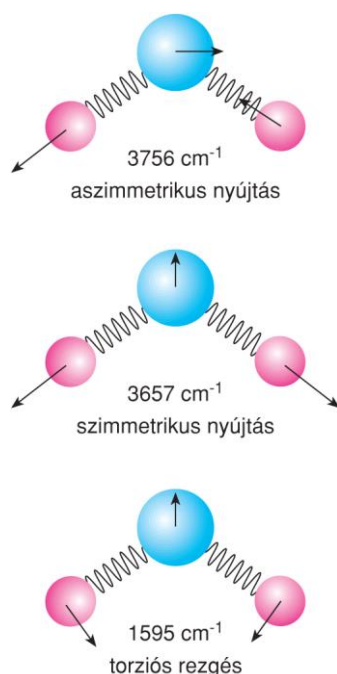
Amint azt az előző pontban láttuk, az infravörös fény számunkra legfontosabb spektroszkópiailag hasznosítható tulajdonsága az, hogy fotonenergiája a molekularezgések energiatartományába esik. Ennek megfelelően egy infravörös fény elnyelése általában a molekula rezgését okozza. A klasszikus fizikai szemlélettel ez úgy magyarázható, hogy a foton rezgési frekvenciája és a molekularezgés között rezonancia lép fel. A kvantummechanikai magyarázat szerint pedig a foton energiája megfelel a rezgési átmenethez szükséges energiának.

A megfelelő frekvenciájú infravörös sugárzás rezgésbe hozza a molekulát, és energiáját átadja, aminek következtében a sugárzás intenzitása gyengül. Az elektromágneses sugárzás azonban csak akkor tudja „megrezgetni” a molekulát, ha annak töltései a rezgés során átrendeződnek, azaz a molekula elektromos dipólmomentuma változik. Ezért nem minden lehetséges molekularezgés gerjeszhető a megfelelő frekvenciájú

infravörös sugárzással. Az infravörös sugárzással nem gerjeszthető rezgéseket **infravörösen inaktív** rezgéseknek nevezzük. Ilyen például a CO_2 -molekula szimmetrikus rezgése.

A kvantummechanikai leírás szerint a molekula nem végezhet akármilyen amplitúdójú, ill. energiájú rezgéseket, hanem csak meghatározott energiaszintű rezgési szinteken helyezkedhet el. A kvantummechanikai és klasszikus szemléletmód azonban ugyanarra az eredményre jut, mert a kvantummechanika által előírt rezgési szintek energiakülönbsége éppen annak a fotonnak az energiájával egyezik meg, amit a klasszikus fizikai megfontolással kiszámoltunk. A kvantummechanikai értelmezés szerint egy ilyen foton elnyelődésekor a molekularezgés gerjesztődik.

Természetesen nagyobb molekulák esetén többfajta rezgés lehetséges. Egy N atomból álló molekulának $3N$ szabadsági foka van, hiszen mindegyik atom a tér három irányában függetlenül elmozdítható. Ebből három az egész molekula translációs elmozdulását, három pedig ennek a három térbeli tengely körüli elfordulását írja le (kivéve a lineáris molekulákat, ahol csak két forgástengely van). Ezért $3N-6$ (lineáris molekuláknál $3N-5$) szabadsági fok marad a rezgésekre, azaz ennyifajta egymástól független rezgés létezik a molekulában. Az egymástól független rezgéseket hívják **normálrezgéseknek**. Ilyen normálrezgésekből a molekula bármilyen összetett rezgése előállítható. Kis molekulák esetén a normálrezgések általában a molekula egészére kiterjedő kollektív mozgásokat jelentenek. Egy ilyen normálrezgésben a részt vevő atomok ugyanazzal a frekvenciával, de különböző amplitúdóval rezegnek. A normál modust a sajátfrekvenciával, valamint az atomok kitérésének amplitúdóival lehet megadni. A víz három normálrezgését mutatja be a VI.21. ábra.



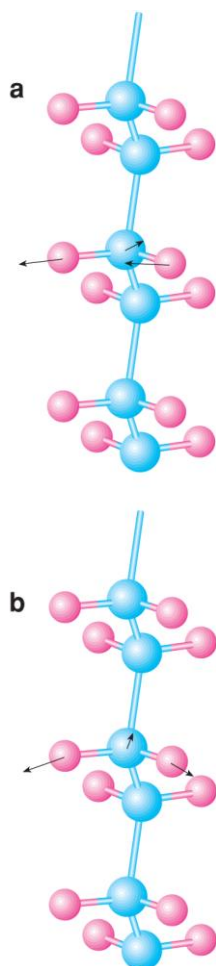
VI.21. ábra. A víz normálrezgései. A nyilak nagysága arányos a rezgés amplitúdójával, de a szemléletesség kedvéért sokkal hosszabbak, mint a rezgés valódi amplitúdója. A szokásosan cm^{-1} egységben kifejezett $1/\lambda$ értékek a rezgési frekvenciát jellemzik

Makromolekulák esetén a normálrezgések egy része a molekula egyes atomcsoportjaira lokalizált, és a molekula távolabb eső részei nem befolyásolják a rezgést. Erre példa a lipidmolekulák zsírsavláncaiban a CH_2 -csoportok szimmetrikus és aszimmetrikus rezgése (VI.22. ábra). Ezekben a rezgésekben csak egy szénatom és a hozzá tartozó két hidrogénatom vesz részt. A rezgési frekvenciát a közvetlen szomszédos szénatomokhoz való csatlakozás (trans vagy gauche állapot) még kissé befolyásolja, de a molekula távolabbi részei nincsenek hatással arra, így például nem függ a frekvencia attól sem, hogy milyen hosszú a lánc vagy milyen fejcsoport csatlakozik hozzá. Viszont a rezgési frekvenciából következtetni lehet a szénhidrogén láncok olvadt (sok gauche konformert tartalmazó) vagy merev (főleg trans konformert tartalmazó) állapotaira. Ugyanígy, a molekula konformációjára érzékeny normálrezgést találunk a fehérjéknél is (az ún. amid I rezgést), amelyet az alkalmazások alfejezetben tárgyalunk részletesen.

Elvileg a molekulát összetartó kötések rugóállandóinak ismeretében kiszámolható minden saját rezgés. Ezek numerikus meghatározása azonban még a számítógépek korában is jelentős feladat és nem mindig kivitelezhető

kellő pontossággal. A számítástechnika elterjedése előtt a normálkoordináták számolásánál elengedhetetlen volt a probléma egyszerűsítése, amit a molekula szimmetriatulajdonságainak felhasználásával végeztek. A kapott rezgéseket is a szimmetriatulajdonságaik alapján csoportosították.

A kovalens kötések tipikus rugóállandója 1000 N/m nagyságrendű. A biológiai makromolekulákat felépítő leggyakoribb atomok tömege $1,7 \cdot 10^{-27}$ kg (H) és $3 \cdot 10^{-26}$ kg (O) között mozog. Ebből következik, hogy a tipikus rezgési frekvenciák az 50-100 THz tartományba esnek (THz = 10^{12} Hz). Az ún. kollektív módusok esetén, amikor a molekula több atomja jön mozgásba, a frekvencia ennél alacsonyabb (10–50 THz). Annak a fotonnak a hullámhossza, amelyik ekkora energiával rendelkezik 3–30 μm körüli, ami a bevezetőben említett MIR (középső infravörös) tartományba esik.



VI.22. ábra. Példák lokalizált normál-rezgésekre: aszimmetrikus (a) és szimmetrikus (b) CH nyújtási módusok egy zsírsavban, ill. lipidmolekula zsírsavláncában

VI.3. megjegyzés. *A rezgés frekvenciájának megadása cm^{-1} -ben.* A molekularezgések vizsgálatára használt spektroszkópiai módszerekben a rezgés fotonenergiája helyett a frekvencia megadása szokásos. A mérés technikák általában a karakterisztikus hullámhosszak megadását teszik közvetlenül lehetővé. A mérésből adódó elnyelési maximumok λ hullámhosszából a rezgési frekvencia az $f = c/\lambda$ összefüggésből adódik. Az egyszerűség kedvéért azonban a c fénysebességet mint állandót hagyva a frekvenciát egyszerűen a hullámhossz reciprokával jellemzik. Kényelmi okokból a nm^{-1} egység helyett a cm^{-1} egység terjedt el erre a célra. A skála elnevezése „hullámszám”.

3.2.2. VI/3.2.2. Vegyületek, molekulák azonosítása, az IR-spektroszkópia analitikai alkalmazásai

Példaként gyógyszerészeti, ill. molekuláris biofizikai vonatkozású alkalmazásokat mutatunk be.

Mint már említettük, bizonyos atomcsoportok jól meghatározott frekvenciájú, a molekula egy kis részére (nemritkán egy-két kovalens kötésre) lokalizált rezgéseket végeznek. Néhány ilyen tipikus rezgési frekvenciát mutat a VI.1. táblázat. Vannak azonban kollektív rezgések is, ahol a rezgésbe több atom is bevonódik, ezért ezek a rezgések érzékenyek a bennük részt vevő atomok kölcsönös orientációjára, azaz a molekula térszerkezetére. Az infravörös spektrum 1100–1700 cm⁻¹ tartományát ujjlenyomat tartománynak nevezik (fingerprint region), mert a molekulászerkezetre jellemző összetett rezgések tipikusan ebben a tartományban jelentkeznek. Ezek a spektrumvonalak – mint ahogy a tartomány elnevezése is mutatja – egyedien jellemzők az egyes molekulákra, és felhasználhatók az analitikában azonosításra.

A modern készülékek már a mérőszoftverbe beépített spektrumkönyvtárral rendelkeznek, amely több száz vagy ezer vegyület spektrumát tartalmazza. Ebből a könyvtárból a program kikeresi azt a spektrumot, amelyik az éppen mért minta spektrumával egyezik, vagy legalábbis közelíti azt. Így a spektrumkönyvtárban szereplő vegyületek azonosíthatók. A VI.23. ábra mutatja a metanol és az etanol spektrumát. Jól megfigyelhető a CH-rezgések sávja 2800 cm⁻¹ körül, valamint, hogy az etanol spektruma a fingerprint régióban jóval bonyolultabb, hiszen a nagyobb molekulában többféle rezgési kombináció fordulhat elő.

Az egyes abszorpciós vonalak nagysága természetesen mennyiségi meghatározásra is használható, mert a Lambert–Beer-törvény ugyanúgy érvényes az infravörös, mint a látható és UV-tartományban.

6.1. táblázat - VI.1. táblázat. Néhány tipikus rezgési frekvenciaérték

molekulatípus	kötés	hullámszám (cm ⁻¹)
alkánok	C–H	2850–3000
alkének	C–H	3080–3140
	C–H	1630–1670
alkohol	O–H	3400–3600
	C–O	1050–1200
aminosavak	C=O	1600–1700
	N–H	3500–3300

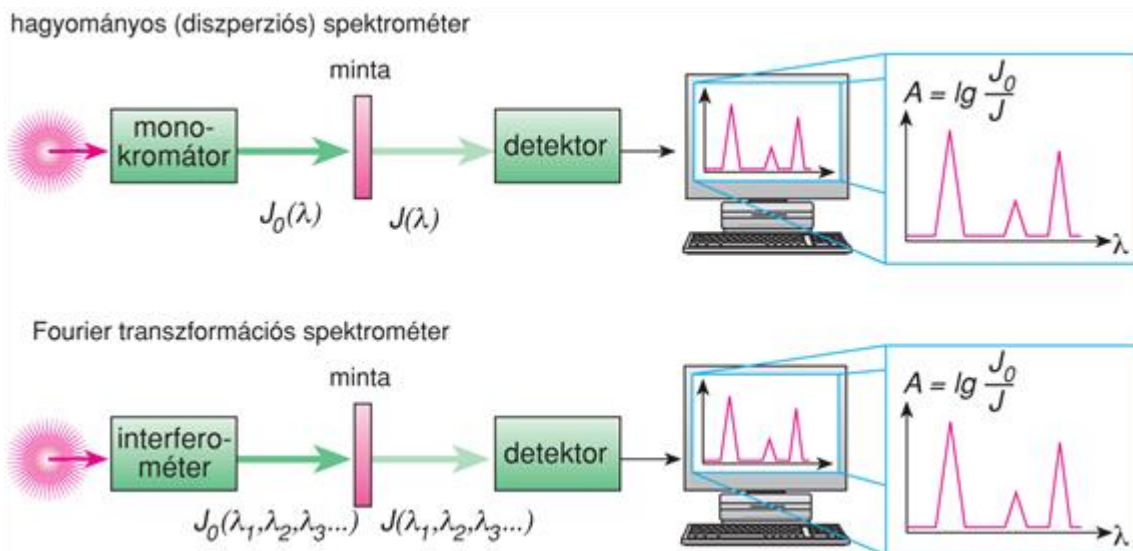
A modern Fourier transzformációs infravörös (FTIR) spektrométer felépítése és működése

A rezgési spektrumok méréséhez szükséges infravörös sugárzást legegyszerűbben hőmérsékleti sugárázóval (lásd II/2.2.1.) nyerhetjük. Az abszorpciós spektrum méréséhez a mintára eső és a mintán áthaladt sugárzás intenzitását kell mérnünk a hullámhossz függvényében. A spektrométer elvi elrendezése tehát ugyanaz lehetne, mint a látható tartományban működő abszorpciós spektrofotométeré. Az infravörös spektroszkópiában azonban manapság csak a Fourier-transzformáció elvén működő készülékek (FTIR) számítanak modernnek. Ennek a készüléknek az elvi elrendezését mutatja az 1. ábra. Összehasonlítva az ún. diszperziós spektrométerrel itt a monokromátor helyén egy Michelson-interferométer (2. ábra) található. A mozgó tükör helyzetétől függ, hogy a féligáteresztő tükörnél újra találkozó hullámok interferenciája során mely hullámhosszak esetén lesz kioltás és melyeknél erősítés. Kezdetben, amikor az *A* és *B* fényutak hossza megegyezik, minden hullámhosszon erősítés következik be. A mintára tehát a lámpa teljes fénye esik. A mozgó tükröt Δx -el elmozdítva csak azoknál a hullámhosszaknál lesz erősítés, amelyek egész számú többszöröse megegyezik az úthosszal: $\Delta x = k\lambda$. Ha egy λ_1 hullámhossz esetén erősítés lép fel, akkor $\lambda_2 = \lambda_1/2$, $\lambda_3 = \lambda_1/3$... hullámhosszakon is erősítést tapasztalunk. Az interferencia szabályai szerint, ha a fél hullámhossz páratlanszor fér rá a Δx úthosszra, kioltás következik be. Lesznek olyan hullámhosszak is, amelyek esetén részleges kioltás (intenzitáscsökkenés) következik be. Tehát nagyon leegyszerűsítve a dolgot, azt mondhatjuk, hogy az interferométer a monokromátorral ellentétben nem egy hullámhosszat választ ki, hanem egy sor hullámhosszat ($\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$), melyeken az abszorpció mérése szimultán történik a D detektorral. A detektorral mért intenzitás tehát közvetlenül egyik hullámhosszra sem jellemző, hanem a hullámhosszak egy sajátos kombinációjára. A mozgatható tükör további elmozdításával egy másik hullámhossz-kombinációt választhatunk ki. Azt a matematikai műveletet, amivel a fényút különbség függvényében (tehát különböző hullámhossz-kombinációknál) mért intenzitásokat átszámoljuk a hullámhossz

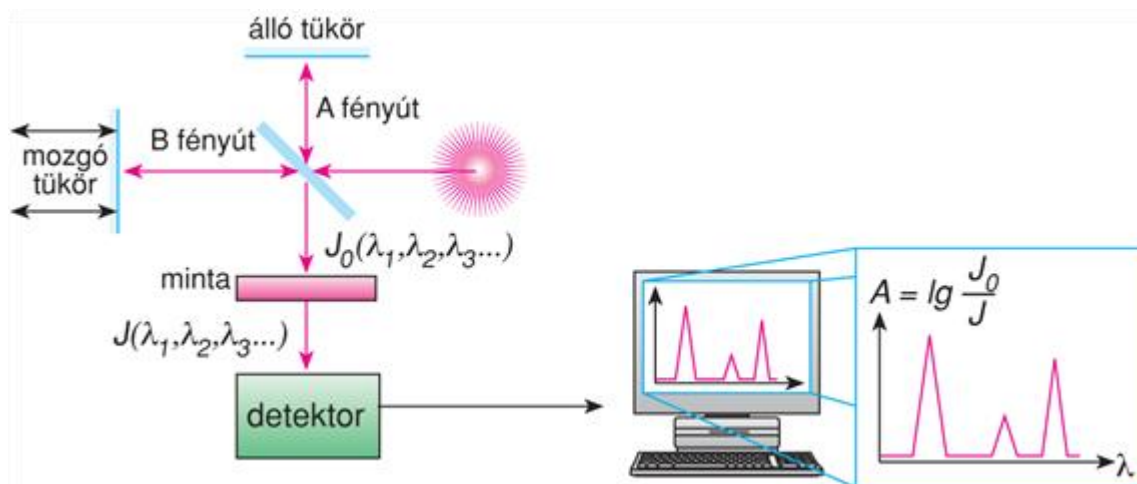
függvényében megadott fényintenzitásokká, Fourier-transzformációnak hívják. (A Fourier-transzformáció eredetileg egy függvénynek a szinuszos komponensekből való összeállítására vonatkozik, lásd VII/1.1.3. rész.) Az FTIR spektroszkóp tehát az intenzitást az interferométer tükör elmozdulásának (x) függvényében méri, és a kapott $J(x)$ függvényből Fourier transzformációval állítja elő az $J_E(\lambda)$ ill. $J_E(f)$ függvényt. A minta nélkül felvett $J_{E0}(f)$ referencia függvény és a mintával felvett $J_E(f)$ függvény felhasználásával az abszorpciós spektrum a már ismert módon számolható:

$$A(f) = \lg \frac{J_{E0}(f)}{J_E(f)}$$

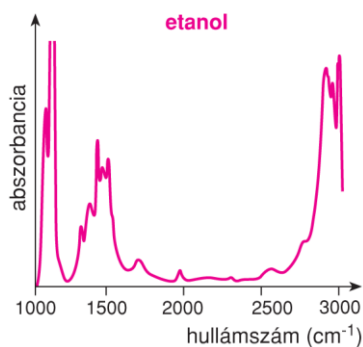
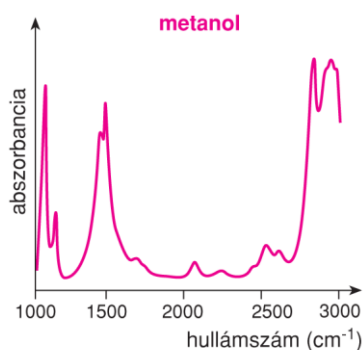
Egy spektrum felvétele esetén általában néhány ezer hullámszám értéknél határozzuk meg az $J_E(f)$ és ebből az $A(f)$ függvény értékét, tehát a Fourier transzformáció végrehajtása csak számítógéppel lehetséges, ezért az FTIR spektroszkópia kifejlesztéséhez és elterjedéséhez elengedhetetlenül szükség volt a számítástechnika mindennaposá válására. Az FTIR technika sajátossága, hogy az egész spektrum felvételére sor kerül, nem lehet csak egy hullámszám-tartományt kiválasztani, mint a monokromátorral működő (ún. diszperziós) spektrométerek esetén. Az FTIR spektrométerek számos előnyös tulajdonsággal rendelkeznek a diszperziós készülékekkel szemben. Az egyik ilyen előny, hogy egyszerre sok hullámhosszon történik a mérés, ezért a mért intenzitás is nagyobb, ami jobb jel/zaj arányt tesz lehetővé. A hullámhossz kalibráció is nagyon pontos, mert egy lézer fényét bocsátják át az interferométeren, és a mintavételt a lézerfény interferenciájához szinkronizálják, így a hullámhossz pontosság nagyságrendekkel jobb, mint a monokromátoros készülékeknél. Ezek az előnyök magyarázzák, hogy manapság az infravörös technikában kizárólag a Fourier transzformációs elven működő készülékek használatosak.



1. ábra. A hagyományos (diszperziós) és a Fourier-tanszformációs spektrométer összehasonlítása



2. ábra. Michelson-interferométer



VI.23. ábra. A metanol és az etanol infravörös spektruma

Az optikai átmenetek értelmezése során használt közelítések

Az egyik legfontosabb feltételezés az ún. **Born–Oppenheimer-közelítés**, amely szerint az egyes (elektron-, vibrációs és rotációs) állapotok egymástól függetlennek tekinthetők, a közöttük lévő csatolás elhanyagolható. A molekula egészének teljes energiája így additív módon tevődik össze az elektrongerjesztési energiából, a vibrációs energiából és a molekula egészének a különböző forgástengelyek körüli forgási energiáiból.

A másik egyszerűsítést az jelenti, hogy a különböző típusú állapotok energetikailag jól elkülöníthetők. A külső elektronelektronok átrendeződésével járó állapotváltozások az UV-, ill. látható spektrumtartományba eső fotonokkal gerjeszthetők. (Az alacsony főkvantumszámú belső pályák közötti átmenetek nagyobb fotonenergiákat jelentenek lásd I/1.3.1.) Ennél lényegesen kisebb energiát (l. IR-spektroszkópia, VI/3.2. alfejezet) igényel a molekuláris rezgések átrendeződése, és ennél is kisebbet a molekula lehetséges forgómozgásai közötti átmenet. Ezeket a megállapításokat foglalja össze az energiaszint-rendszer, amelyben az elektrongerjesztési energiaszintekre ülnek rá a rezgési energiaszintek sorozatai, és még nagyobb feloldást

használva az egyes vibrációs szintekre a rotációs nívók rendszere. A molekula egészére jellemző energiaszint-rendszer ezekből az egymásba skatulyázott nívó csoportokból áll.

3.3. VI/3.3. Lumineszcencia spektroszkópia

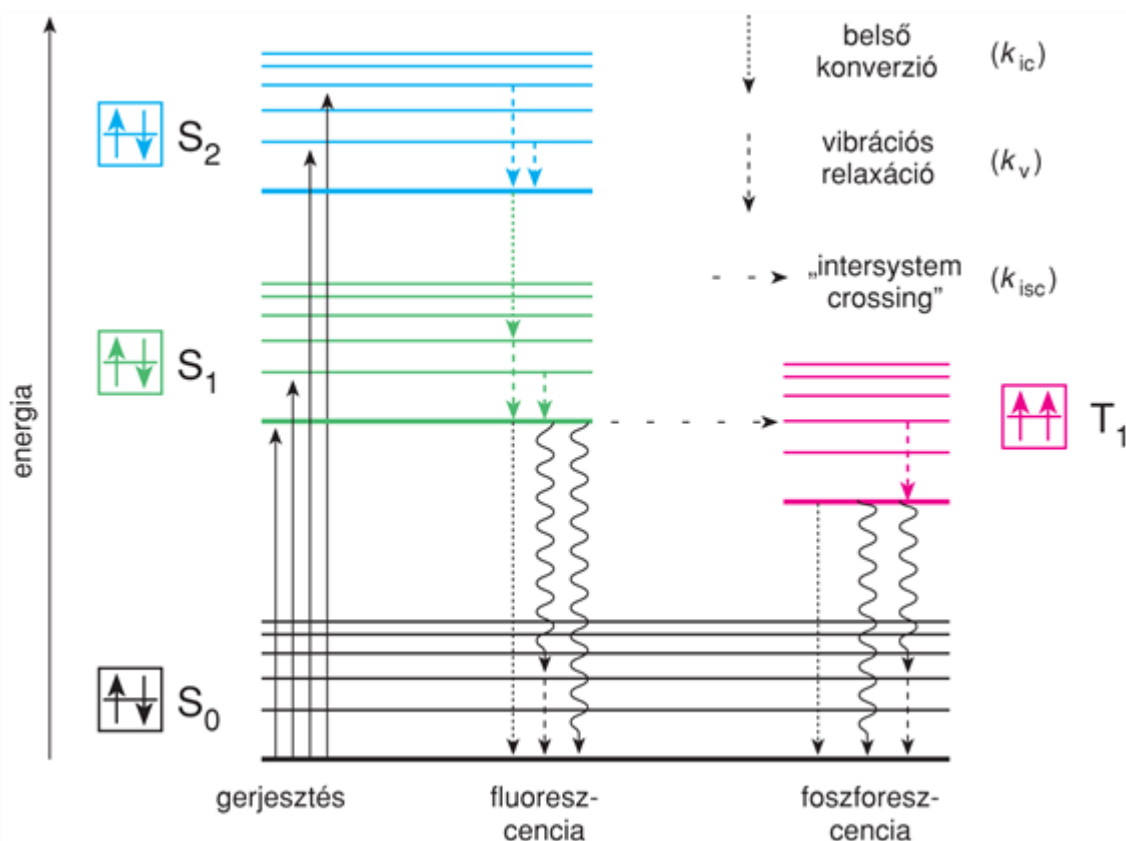
3.3.1. VI/3.3.1. A fényemisszió jelensége: fluoreszcencia és foszforeszcencia

A VI.24. ábrán foglaltuk össze azokat a folyamatokat, amelyek egy molekulában fényelnyelődés esetén és azt követően végbemehetnek. Foton elnyelésekor (abszorpciójakor) az elektroneloszlás a molekulában femtoszekundumnyi (10^{-15} s) idő alatt átrendeződik, és a molekula az első elektrongerjesztési állapotba jut, általában olyan vibrációs szintre, amely nem felel meg a környezettel való termikus egyensúlynak. Azt mondjuk, hogy a molekula „forró” állapotba került. Abszorpció révén az elektron spinállapota nem változik meg, tehát ha alapállapotban szingulett volt (S_0), akkor gerjesztett állapotban is szingulett lesz (S_1, S_2, \dots).

Az abszorpciónál lényegesen hosszabb idő alatt, de a hétköznapi időtartományhoz képest még mindig rendkívül gyorsan (pikoszekundumok – 10^{-12} s – alatt) bekövetkezik az ún. termikus relaxáció, vagyis a „forró” molekula és a környezet közötti hőcsere. Ennek eredményeképpen a molekula az első elektrongerjesztési állapotban a termikus energiának megfelelő vibrációs szintre kerül (ez közönséges hőmérsékleten gyakorlatilag a legalsó vibrációs szint). Az ábrán **vibrációs relaxációként** jelöltük ezt a folyamatot (k_v). Ugyancsak vibrációs relaxáció történik, ha az elektrongerjesztés egy magasabb energiájú állapotba (pl. S_2 -be) vezet. **Kasha** fogalmazta meg azt a **szabályt**, hogy a gerjesztett molekula (függetlenül attól, hogy melyik szingulett állapotba gerjesztettük) igen gyors átmenetekkel az S_1 elektronállapot alap vibrációs szintjére kerül, és a fotonemisszió mindig ebből az állapotból történik (Kasha-szabály) az alapállapot valamelyik vibrációs és rotációs szintjére. Ezt a szabályt támasztja alá a megfigyelés, miszerint bármilyen hullámhosszú foton elnyelésével kerül a rendszer gerjesztett állapotba, az emissziós spektrum alakja – lásd később – változatlan.

A gerjesztett állapot energetikai okokból nem stabil. Több lehetőség kínálkozik a megszűnésére (az S_0 alapállapotba történő visszatérésre), amelyek a molekulától és a környezettől függően különböző valószínűséggel következhetnek be. Amennyiben az elektron a termikus relaxáció után egy lépésben visszatér az alapállapot valamelyik vibrációs állapotába, és a különbségi energiát foton formájában kibocsátja, **fluoreszcenciáról** (k_f) beszélünk. A fluoreszcenciaemisszió lecsengése ns nagyságrendű időtartammal jellemezhető.

Egy másik lehetséges út az alapállapotba az ún. **belső konverzió**, amelynek révén a gerjesztési energia teljes egészében hővé alakul át („internal conversion” – k_{ic}). Egy másik lehetőséget a rendszerek közti átmenetnek („intersystem crossing” – k_{isc}) neveznek, amellyel arra utalnak, hogy az állapot jellege (külső kölcsönhatás révén) megváltozik, szingulett állapotból tripllett (eredő spinquantumszám = 1) állapotba megy át. Ezt a változást úgy is felfoghatjuk, hogy a gerjesztett elektron spinállapota átfordul. A VI.24 ábrán látható, hogy az S_1 állapotból így létrejött T_1 -gyel jelölt állapot energiacsökkenést jelent. Az ilyen termsémákat, amelyek a szinglett és tripllett állapotokat is energiahelyesen feltüntetik, **Jablonski-diagramnak** nevezzük.



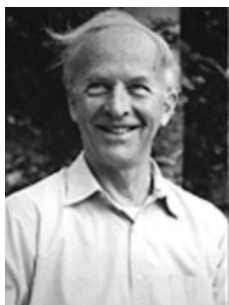
VI.24. ábra. A Jablonski-diagram (a vibrációs szintekre szuperponálódó rotációs szintek nincsenek feltüntetve). A kis nyilak a négyzetekben a spinek állapotát mutatják

Ha a molekula triplett állapotából történik sugárzásos átmenet az alapállapotba, akkor **foszforeszcenciáról** (k_{ph}) beszélünk. A fluoreszcenciát és a foszforeszcenciát vagy spektrumuk vagy időbeli lecsengésük különbözősége alapján lehet elkülöníteni. A molekula termsémájából nyilvánvaló, hogy a foszforeszcencia fotonjának energiája kisebb, mint a fluoreszcenciáé, vagyis a spektrum a fluoreszcencia-spektrumhoz képest a nagyobb hullámhosszak (a spektrum vörös oldala) felé tolódik. Míg a gerjesztett szingulett állapot élettartama nanoszekundumos (10^{-9} s) nagyságrendű, a triplett állapotból a szingulett alapállapotba történő átmenet tiltott (kis valószínűségű), mert a spin átfordulását kívánja meg. Emiatt a foszforeszcencia élettartama lényegesen (tipikusan legalább 5-6 nagyságrenddel) nagyobb, mint a fluoreszcenciáé: 10^{-6} – 10 s. Élő rendszerekben gyakran előfordul olyan eset is, amikor a szingulett gerjesztési nívóról valamilyen nem sugárzásos formában elvándorló energia másutt raktározódik, majd később visszatér az eredeti szingulett gerjesztési szintre, és fluoreszcencia formájában innen kisugárzódik. Ezt az emissziót **késleltetett fluoreszcenciának** hívjuk. A gerjesztett elektronállapotból származó fényemissziót, a fluoreszcenciát és a foszforeszcenciát **gyűjtőnéven lumineszcenciának** nevezzük (lásd II/2.2.4. fejezet).

VI.4. megjegyzés. Szingulett (S) és triplett (T) energiaállapotok

Az elnevezések a spinállapothoz rendelt mágneses momentumnak a mágneses tér irányához képest lehetséges orientációs állapotai számára utalnak. Amennyiben egy elektronállapotban az atom/molekula összes elektronjának eredő spinkvantumszáma $S = 0$ (pl. minden nívó két ellentétes spinű elektronnal van betöltve), akkor mágneses térben az orientációs állapotok száma $2S + 1 = 1$. Ezt nevezzük **szingulett** állapotoknak.

Ha azonban a nívókon pl. két azonos spinállapotú elektron található, és a többi elektron spinállapota kompenzálja egymást, az eredő spinkvantumszám $S = 1$. Ebben az esetben mágneses térben 3-féle orientációs állapot lehetséges. Az ilyen állapotot **triplett** állapotoknak nevezzük.



Michael Kasha (1920–) amerikai fizikus

3.3.2. VI/3.3.2. A lumineszcencia jellemzése

A lumineszkáló anyagot jellemzi: az abszorpció, a fluoreszcencia, illetve foszforeszcencia **emissziós és gerjesztési spektruma**, és emellett további, a molekula környezetére különösen is érzékeny paraméterek mint a sugárzás **kvantumhatásfoka**, a **gerjesztett állapot élettartama** és az emisszió **polarizációfoka** (anizotrópiája).

VI.5. megjegyzés. *Abszorpció spektrum – lumineszcencia gerjesztési spektrum*

A gerjesztési spektrumot úgy határozhatjuk meg, hogy egy adott hullámhosszon mérjük a kibocsátott lumineszcenciafény intenzitását, miközben változtatjuk a gerjesztő fény hullámhosszát.

A kétféle spektrum, az abszorpció és a gerjesztési, nem teljesen azonos. Érdemes figyelni arra, hogy a gerjesztési spektrum közvetlenül nem alkalmas mennyiségi jellemzésre, hiszen a mérés során nem a VI.33. összefüggés szerinti abszorbcanciát határozzuk meg, hanem egy azzal arányos mennyiséget.

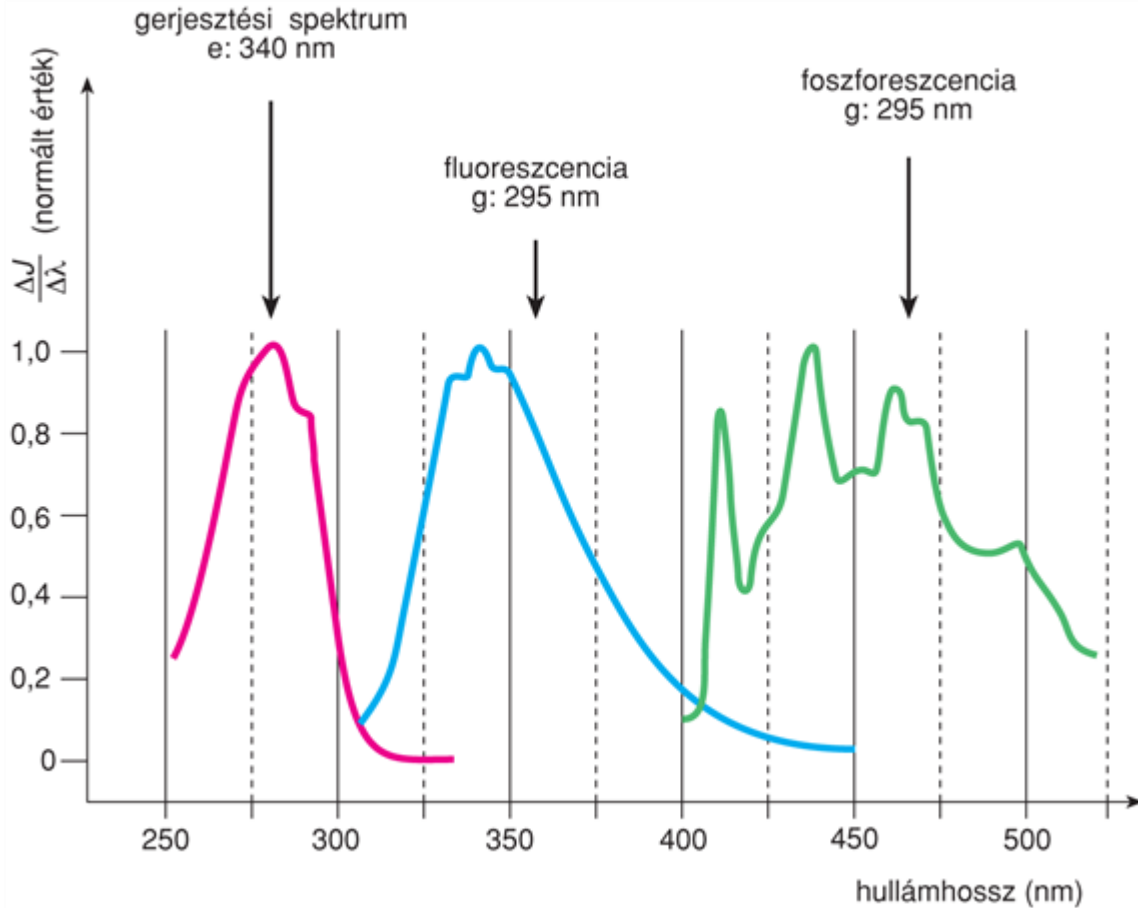
Emissziós és gerjesztési spektrumok

Az **emissziós spektrum** a kisugárzott fény teljesítménysűrűségének ($\Delta J_E/\Delta\lambda$) hullámhossztól való függését kifejező függvény. A $\Delta J_E/\Delta\lambda(\lambda)$ azt a sugárzási intenzitást jelöli, amely egy adott hullámhossz $\Delta\lambda$ környezetében mérhető. A $\Delta\lambda$ intervallumot a detektor előtti blende („rés”) szélessége állítja be, és ez a mérés teljes hullámhossztartományában állandó érték. A fluoreszcencia az első gerjesztett szingulett energianívó legalsó vibrációs szintjéről az alapállapot valamelyik vibrációs szintjére való sugárzásos átmenet során keletkezik, ezért a fluoreszcencia spektruma az alapállapot vibrációs szintrendszerét is reprezentálja. A **fluoreszcenciaspektrum** ezért általában egyetlen sávból áll, amely kevésbé strukturált, és az abszorpció sávhoz viszonyítva (az energiavesztés miatt) eltolódik a nagyobb hullámhosszak irányába. Ez a **Stokes-féle eltolódás**.

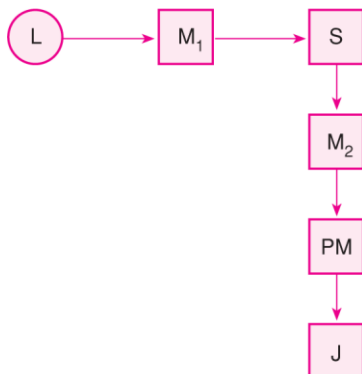
A foszforeszcencia az első tripllett gerjesztett állapotból a szingulett alapállapotba való sugárzásos átmenet. Foszforeszcencia szobahőmérsékleten általában csak kristályos anyagokon figyelhető meg, mivel oldatban – a hosszú élettartam miatt – a különböző kioltók, mint például az O_2 , diffúzió révén kioltják a foszforeszcenciát (a gerjesztett állapotú molekulával ütközve átveszik a gerjesztési energiát, amelyet vagy reakciók során, vagy hő formájában később leadnak). Speciális körülmények között (pl. oxigénmentes oldatban) azonban előfordulhat, hogy a kioltás gátolt, és a foszforeszcencia biológiai mintákon is mérhető. A **foszforeszcenciaspektrum** a (fényrel való) gerjesztés hatására kibocsátott foszforeszcencia intenzitásának ($\Delta J_E/\Delta\lambda$) a hullámhossztól való függését ábrázolja. A foszforeszcencia spektrum – hasonlóan a fluoreszcenciához – kevésbé strukturált, és általában egyetlen, a fluoreszcencia sávhoz képest a vörös felé eltolódott széles sávból áll. A gerjesztési (lásd később), a fluoreszcencia- és a foszforeszcenciaspektrumok tipikus alakját és egymáshoz viszonyított elhelyezkedésüket a triptofán spektrumaival mutatjuk be (VI.25. ábra). Érdemes megfigyelni az ábrán a Stokes-féle eltolódást, valamint a gerjesztési és a fluoreszcencia-színképek tükörszimmetriáját. A Stokes-féle eltolódás a gerjesztési és az emissziós spektrum maximuma közötti különbség, ami a Kasha-szabály következménye.

A gerjesztési és az emissziós (fluoreszcencia vagy foszforeszcencia) spektrum detektálására alkalmas készülék blokkdiagrammját szemlélteti a VI.26. ábra. A készülék – a spektrofotométerrel szemben – általában a gerjesztő fény irányához képest 90° -os szögben detektál, hogy az emittált fényt a megvilágító nyalábtól elválasztva lehessen detektálni. A lumineszcenciaintenzitás a legtöbb esetben kicsi (különösen foszforeszcencia esetén), azonban fény detektálására igen érzékeny detektorok léteznek, így alacsony háttérintenzitás mellett jó jel/zaj viszonyt lehet elérni.

Ha a gerjesztési oldalon egy monokromátor (és nem csak bizonyos hullámhosszakot kiválasztó szűrő) segítségével állítjuk be a kiválasztott gerjesztési hullámhosszat, ez az elrendezés lehetőséget ad egy másféle spektrum, az ún. **gerjesztési spektrum** felvételére is. Ebben a üzemmódban egy rögzített emissziós hullámhosszon detektálunk, és az intenzitást a gerjesztési hullámhossz függvényében mérjük. A gerjesztési spektrum függvényalakja azonos az adott anyag abszorpciós spektrum alakjával, és csupán arra a komponensre vonatkozik, amely a kiválasztott hullámhosszon emittál. Így egy összetett mintából szelektíven meghatározható egy-egy kiválasztott, lumineszcencia emisszióval rendelkező komponens abszorpciós spektruma. Abszorpciós spektroszkópiai mérésekben az összetett rendszer összes komponensének járuléka összeadódna.



VI.25. ábra. A HIV1 proteázenzim dimer szerkezetű 2-2 triptofánjának lumineszcencia spektrumai. A gerjesztési spektrumnál a mérésnél alkalmazott emissziós, a kétféle emissziós spektrumnál a gerjesztési hullámhosszat tüntettük fel. A spektrumok maximumát 1-re normáltuk. A foszforeszcencia spektrum 77K hőmérsékleten készült, ezért vibrációs állapotokra felbomlott. A legrövidebb hullámhossznál látható éles maximum a T_1 nívó és az S_0 nívó legalacsonyabb energiájú vibrációs állapota közötti fotonenergiának felel meg. A többi maximum az alapállapot magasabb energiájú vibrációs állapotaiba vezető átmeneteknek felel meg. A fluoreszcencia gerjesztési és emissziós spektrumokban ezek a részletek elmosódtak



VI.26. ábra. A „steady-state” spektrofluoriméter bloksémája. L: lámpa (Xe- vagy Hg-lámpa, lézer); M1: gerjesztési monokromátor; S: minta (küvetében); M2: emissziós monokromátor; PM: fotoelektron-sokszorozó, fotodetektor; J: jelfeldolgozó egység (rekorder, számítógép)

Anti-stokesi emisszió. Itt kell megemlíteni az ún. anti-stokesi emisszió jelenségét is, ami azt jelenti, hogy – bár kis valószínűséggel – előfordulhat, hogy az emittált foton energiája meghaladja az abszorbeált foton energiáját. Ez a jelenség jól értelmezhető a Jablonski-diagram alapján. Ugyanis az alapállapot valamely magasabb vibrációs-rotációs szintjéről történik a gerjesztés (egy, az abszorpciós spektrum kis energiatartományába eső „vörös” fotonja által) és a fluoreszcencia átmenet az alapállapot egy alacsonyabb szintjére történik, az emittált foton energiája – az elektronrendszer hőenergiája rovására – meghaladja az abszorbeált foton energiáját. A jelenség látszólag ellentmond a termodinamika második főtételének, de meg kell jegyezni, hogy valójában nincs ellentmondás, minthogy a törvény statisztikus sokaságra igaz. Az anti-stokesi sugárzás valószínűsége igen kicsiny, a törvény így nem sérül.

A kvantumhatásfok

A (teljes térszögben kibocsátott) lumineszcencia sugárzás energiája egyenesen arányos a lumineszcenciát kiváltó gerjesztő fényből elnyelt energiával, az arányossági tényező a lumineszcencia (energia) hatásfoka.

Ha az energia helyett az elnyelt, illetve kibocsátott fotonok számát vesszük tekintetbe, akkor a lumineszcencia kvantumhatásfokát kapjuk: a fluoreszcencia során emittált és az abszorbeált kvantumok hányadosát a fluoreszcencia kvantumhatásfokának nevezik (Q_F). Az elnyelt fotonok száma arányos a ΔE intenzitáscsökkenéssel, amelyet a $\Delta E = \epsilon c l J_{E_0}$ formulával is megadhatunk a $\Delta x = l$ közelítéssel (lásd II/1.1.3. és VI/3.1.1. rész). Az elnyelt fotonszámot azonosnak vehetjük a gerjesztett elektronok számával, amit a kvantumhatásfokkal megszorozva az emittált fotonok számát kapjuk. Ez arányos a mért emissziós intenzitással, J_{EF} -vel

$$J_{EF} = C \cdot J_{E0} c \cdot \epsilon(\lambda) \cdot l Q_F$$

(VI.35)

ahol J_{E_0} a mintára eső fény intenzitása, $\epsilon(\lambda)$ a moláris extinkciós koefficiens, l az optikai úthossz (Δx), c a fluorofór koncentrációja, C egy, a készülékre jellemző együttható és Q_F a kvantumhatásfok. Emlékeztetünk arra, hogy a Kasha-szabály értelmében a fényemisszió az S_1 állapotok alap vibrációs szintjéről történik, tehát a Q_F kvantumhatásfok ennek a nívónak a „legerjesztését” eredményező átmenetek átmeneti valószínűségeivel is kifejezhető (lásd VI.24. ábra):

$$Q_F = \frac{k_f}{k_f + k_{nr}}, \quad (\text{VI.36})$$

ahol k_f az emisszió valószínűsége, k_{nr} ($nr = \text{non-radiative} = \text{sugárzás nélküli}$) sugárzással nem járó átmenetek együttes reakciósebessége. Az utóbbi magába foglalja mind a belső konverzió, mind az intersystem crossing és egyéb, az ábrán fel nem tüntetett folyamatok valószínűségét.

A fluoreszcenciára képes molekulák vagy fluorofórok (festékek) kvantumhatásfoka széles tartományban változhat, jól világító festékek esetén (meghatározott spektrumtartományban) megközelítheti a maximális (1, illetve százalékban kifejezve 100 %) értéket is. Fluoreszcenciás jelzőanyagként használt festéknél a nagy kvantumhatásfok fontos követelmény. A természetes kromofórok többsége azonban kis hatásfokkal fluoreszkál, ezért lumineszcenciájukat csak elektronikus úton (jelerősítéssel) lehet detektálni.

A fluoreszcenciához hasonlóan a foszforeszcencia (phosphorescence) esetén is definiálhatunk emissziós kvantumhatásfokot (Q_{ph}) oly módon, hogy a formulában tekintetbe vesszük az $S_1 \rightarrow T_1$ átmenet valószínűségét jellemző kvantumhatásfokot (Q_{ST}) is.

$$Q_{ST} = \frac{k_{isc}}{k_f + k_{nr}} \quad \text{és} \quad Q_{ph} = Q_{ST} \frac{k_{ph}}{k_{ph} + k_{nr,ph}},$$

(VI.37)

ahol k_{isc} az intersystem crossing, k_{ph} foszforeszcencia, $k_{nr,ph}$ pedig a sugárzás nélküli $T_1 \rightarrow S_0$ átmenet sebességi állandója.

A gerjesztett állapot élettartama

Ha a molekulák gerjesztését megszakítjuk, az emisszió intenzitása fokozatosan szűnik meg. Ha valamely időpontban N számú gerjesztett állapotban található molekula van, és Δt idő alatt ΔN számú elektron kerül vissza alapállapotba fotonemisszióval, akkor a kísérletek eredményei szerint a fluoreszcenciára felírható, hogy a Δt időtartam alatt relaxált molekulák száma ΔN :

$$\Delta N = -(k_f + k_{nr}) \cdot N \cdot \Delta t$$

(VI.38)

A ΔN és N között arányosság áll fenn, és a változás az időtartammal (Δt) is arányos. Ez a differenciális összefüggés matematikai szempontból azonos az intenzitás-gyengülést vagy a radioaktív atomok számának időbeli változását leíró egyenletekkel (lásd II/1.1.3. és II/3.2.2. rész).

Ennek analógiájára várható, hogy az $N(t)$ függvény az említett függvényekhez hasonlóan szintén exponenciális:

$$N = N_0 e^{-(k_f + k_{nr})t}, \quad (\text{VI.39})$$

ahol N_0 a $t = 0$ időpontban gerjesztett állapotban levő elektronok (molekulák) száma.

Ennek megfelelően a **fluoreszcencia-élettartam**, vagyis az az idő, amely alatt a gerjesztett állapotban található molekulák száma e-ed részére csökken:

$$\tau = \frac{1}{k_f + k_{nr}}. \quad (\text{VI.40})$$

Így a VI.36 és VI.40 összefüggés alapján felírható a fluoreszcencia kvantumhatásfokára, hogy

$$Q_F = k_f \tau. \quad (\text{VI.41})$$

A (VI.35) és (VI.41) összevetéséből az is kitűnik, hogy a fluoreszcencia intenzitás egyenesen arányos a gerjesztett állapot (átlagos) élettartamával.

A foszforeszcencia lecsengés élettartamát hasonlóan értelmezhetjük:

$$\tau_{ph} = \frac{1}{k_{ph} + k_{nr,ph}}; \quad Q_{ph} = Q_{ST} \cdot k_{ph} \cdot \tau_{ph}$$

(VI.42)

Mivel a foszforeszcenciaátmenet tiltott (spinátfordulást igényel), az átmeneti reakciósebesség/valószínűség kicsi, az élettartam pedig hosszú.

A gerjesztett állapot élettartama a többi lumineszcencia jellemző között különösen érzékeny indikátora a molekula belső szerkezetének és környezettel való kölcsönhatásainak.

VI.6. megjegyzés. *Kromofórok – fluorofórok*

Egy nagyobb molekuláris komplex/makromolekula azon atomcsoportja/molekulája, amely a többitől elkülöníthető optikai spektrummal rendelkezik.

Fotoszelekció, az emisszió polarizációfoka

A fény transzverzális hullám, azaz az elektromos, illetve a mágneses térerősség vektora a terjedési irányra merőleges rezgő mozgást végez. Ha a térerősség iránya a fény terjedése során nem változik, síkban vagy lineárisan poláros fényről beszélünk (lásd II/2.1.7.). Fényabszorpció esetén a gerjesztett elektron állapotváltozásakor – a kvantumkémia szabályai szerint – az eltérés egy dipólusvektorral jellemezhető. Ezt a vektort abszorpciós „**átmeneti momentumnak**” nevezzük. A gerjesztett állapotbeli vibrációs relaxációk miatt a két pálya egymáshoz viszonyított töltéseloszlása az emisszió időpillanatában eltérhet a gerjesztés folyamatára jellemző helyzettől. (Fluorofórok esetén a két vektor vagy egybeesik, vagy nagyon kicsiny szöveget zár be egymással, a foszforeszcenciánál ez a szög jóval nagyobb is lehet.) Egy adott molekulánál a két vektor egyértelmű kapcsolatban áll egymással. Az emisszióban tapasztalható polarizációs irány az emissziós átmeneti momentummal azonos. Mivel az elektronpályák térbeli szimmetriája a molekulaszervezethez egyértelmű következménye, az átmeneti momentumok a molekulaszervezethez rendelhetőek. A VI.27. ábrán az indolmolekula abszorpciós átmeneti momentumait mutatjuk be.

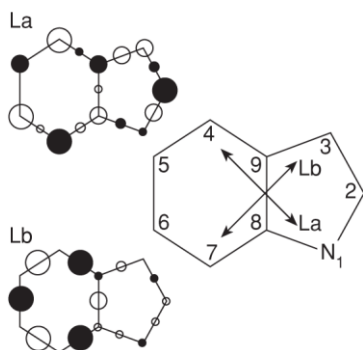
Lineárisan poláros fényrel gerjesztve a molekulát, azok a molekulák gerjesztődnek a mintában, amelyek abszorpciós átmeneti momentum iránya megegyezik (ill. közel van) a fény elektromos térerősség-vektorának irányával. Ezáltal a fluorofórok rendszertelen orientációjú populációjából kiválasztódik egy meghatározott irányú gerjesztett állapotú alpopuláció. Ezt a jelenséget **fotoszelekciónak** hívják (l. VI.28. ábra).

A fotoszelekció jelenségét felhasználva információt nyerhetünk a fluorofórok mozgási szabadságáról, azaz a beágyazó környezetet tudjuk jellemezni (sejtmembránba ültetett fluoreszcens festékek esetén a membrán fluiditásáról nyerhetünk információt). Ugyanis, ha lineárisan poláros gerjesztő fényrel kiválasztottunk egy adott orientációjú molekulapopulációt, akkor az emittált fény is lineárisan poláros lesz az emissziós átmeneti momentumnak megfelelő térerősség-vektor iránnyal jellemezhető módon. Ha az emittált fény mégsem poláros, vagy polarizációfoka kicsi, annak az az oka, hogy a gerjesztett állapot élettartama alatt a molekula elfordult a gerjesztésnek megfelelő orientációhoz képest. Az emisszió polarizációfoka tehát a molekula ns időtartományon belüli mozgására jellemző. A **polarizációfokot** a következőképpen definiálják:

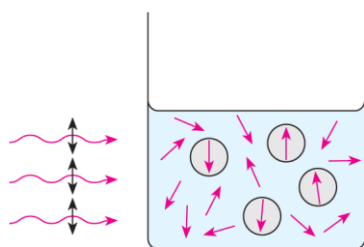
$$p = \frac{J_{E, VV} - J_{E, VH}}{J_{E, VV} + J_{E, VH}}$$

(VI.43)

ahol az emissziós intenzitások első indexe a vertikális polarizációjú gerjesztő fényre, a második index az emissziós intenzitás mérésekor használt polarizátor állás vertikális, ill. horizontális állására utal. (További részletek a X. fejezetben olvashatók a módszerről.)



VI.27. ábra. Az indolmolekula két legalacsonyabb energiájú elektrongerjesztéséhez tartozó átmeneti momentum iránya. La: 275 nm; Lb: 284 nm



VI.28. ábra. Fotoszelekció. A vertikálisan polarizált fényt csak a megfelelően orientált, körrel jelölt fluorofórok abszorbeálják

3.3.3. VI/3.3.3. A fluoreszcencia gyakorlati alkalmazásának területei

Fluoreszcens jelzés

Míg a molekulák, atomcsoportok elektronjai általában gerjeszthetők a látható UV-tartomány fotonenergiáival, a gerjesztett állapot megszűnése fotonemisszióval igen ritka jelenség. Az előző fejezetben tárgyalt intramolekuláris nem-sugárzásos relaxációs jelenségeken kívül az energia leadása a külső környezet molekulái felé is lehetséges sugárzás nélküli módon. Így a kvantumhatásfok kifejezésében (VI.36) a nevezőben még többféle reakciósebesség jelenik meg, ami a Q_F értékét tovább csökkenti. Ha egy sejtet fénnel megvilágítanak, az igen nagyszámú, sokféle molekula, atomcsoport az elnyelt fényfotonok energiájából valószínűleg észrevehetetlen számú fotont fog emittálni. A felvett energia nagyobb része hővé alakul. A VI.2. táblázatban néhány alapvető sejtalkotó molekula fluoreszcencia paramétereit tüntettük fel. Látható, hogy a kvantumhatásfok tekintetében kiemelkednek az aromás aminosavak és a NADH. Az élő szöveteknek az a tulajdonsága, hogy a bennük levő molekuláris komponensek gyakorlatilag nem fluoreszkálnak, adott lehetőséget a fluoreszcens jelzéstechnikák állandóan fejlődő, szélesedő skálájának kialakulására, amely a modern fénymikroszkópiai módszerekkel kombinálva hallatlan távlatokat nyitott a molekuláris és sejt diagnosztika és általában a molekuláris biológiai kutatások irányába.

A fluoreszcens jelzés hasonlít a radioaktív jelzéstechnikához, hiszen itt is egy, a környezetétől elkülöníthető speciális jelet – fényemissziót – szolgáltató molekula specifikus kötéséről van szó, és sok esetben csupán a kötési hely lokalizációjára vonatkozó információt használják fel, mint a radioaktív jelzésnél. A fluoreszcens jelzés által nyerhető információ azonban ennél gazdagabb, és az újabb és újabb technikák és szintetizált jelző családok révén többféle kérdésre is választ kaphatunk az emittált fény hullámhosszának, polarizációfokának, élettartamának mérésével a lokalizáció mellett. A fluoreszcens jelzés mellett különleges diagnosztikai lehetőségeket jelent, ha a kimutatandó komponens saját fluoreszcenciával rendelkezik, vagy ha kémiai reakciók révén fluoreszcenciára alkalmassá tehető a molekula.

6.2. táblázat - VI.2. táblázat. Néhány sejtalkotó molekula fluoreszcencia paramétere

Molekula	Környezet	Abszorpció		Fluoreszcencia		Érzékenység	
		λ_{\max} (nm)	ϵ_{\max}	λ_{\max} (nm)	Q F	τ (nsec)	$\epsilon_{\max} Q_F$

VI. rész – A molekuláris és
sejtdiagnosztika fizikai módszerei

			(1/Mcm)				
Triptofán	H ₂ O, pH 7	280	5,600	348	0,20	2,6	11
Tirozin	H ₂ O, pH 7	274	1400	303	0,14	3,6	200
Fenilalanin	H ₂ O, pH 7	257	200	282	0,04	6,4	8
Y bázis	élesztő tRNA ^{Phe}	320	1300	460	0,07	0,0637	91
Adenin	H ₂ O, pH 7	260	13400	321	2,6·10 ⁻⁴	<0,02	3,2
Guanin	H ₂ O, pH 7	275	8100	329	3,0·10 ⁻⁴	<0,02	2,4
Citozin	H ₂ O, pH 7	267	6100	313	0,8·10 ⁻⁴	<0,02	0,5
Uracil	H ₂ O, pH 7	260	9500	308	0,4·10 ⁻⁴	<0,02	0,4
NADH	H ₂ O, pH 7	260, 340	62	470	0,019	0,40	1,2

Fluoreszcencia-módszerek a rutin klinikai diagnosztikában

A fluoreszcencia analízis rutinmódszer bizonyos vegyületek kimutatásában, azonosításában, kvantitatív meghatározásában. A mennyiségi analízishez a kérdéses vegyületet extrahálni kell a vizsgálati anyagból, amelyet alkalmas oldószerben való feloldás követ. A módszer rendkívül érzékeny, a kimutathatósági határ (a készülékektől függően) tipikusan 1 és 100 ng/ml érték között változik. A mennyiségi meghatározáshoz szükség van a kérdéses anyag ismert koncentrációival előzetesen felvett kalibrációs görbéjére. Fontos kiemelni, hogy csak nagyon híg oldatok esetében várható lineáris összefüggés a fluoreszcencia intenzitása és a fluoreszkáló anyag koncentrációja között.

A nukleinsavak fluoreszcenciás vizsgálata

Míg a fehérjék fluoreszcenciás vizsgálata közel fél évszázados múltra tekint vissza, addig a nukleinsavak hasonló jellegű vizsgálata viszonylag újabb keletű. Ennek az az oka, hogy a nukleinsavak saját fluoreszcenciája nagyon gyenge, ezért csak alkalmas „festékek” felhasználásával végezhető rajtuk fluoreszcenciás vizsgálatok.

A legelterjedtebben az ún. interkaláló festékeket (például etidium-bromid, propidium-jodid) használják, amelyek a nukleinsavak kettős hélixének nagyobb réseibe nem kovalens módon bekötődnek. A kötődéskor fluoreszcenciájuk kvantumhatásfoka legtöbbször igen jelentősen megemelkedik. Például vizes oldatban az etidium-bromid fluoreszcenciájának kvantumhatásfoka csupán 5%, ami közel 100%-ra emelkedik, ha a festék nukleinsav kettős helikális szerkezetébe interkalálódik. Mivel emiatt a nem kötött festék fluoreszcenciája gyakorlatilag nem zavaró, e festékeket széles körben használják nukleinsavak mennyiségi mérésére, illetve a kettős hélix tartalom megállapítására. Összetettebb analízissel (például az egyes csoportok közötti elektron gerjesztési energia átadásának mérésével) a nukleinsavak struktúrájának dinamikus intra- és extracelluláris változásaira is lehet következtetni.

Membránpotenciál mérése

Biológiai kutatásokban gyakran tanulmányozzák a sejtek membránpotenciálját. Ilyen célra alkalmasak a nettó negatív töltéssel rendelkező oxonol, illetve a nettó pozitív töltéssel bíró karbocianin festékek. Ezek a festékek eléggé hidrofób jellegűek ahhoz, hogy a citoplazmamembránon átjussanak, és néhány perces inkubáció után az intracelluláris és extracelluláris tér közötti megoszlásuk a Nernst-egyenletnek megfelelően alakuljon ki. Amennyiben a sejteket pl. áramlási citométerben vizsgáljuk a detektált fluoreszcenciás jelek kizárólag a sejtekhez kötött festék mennyiségre utalnak (az extracelluláris térben található festék fluoreszcenciája a sejtekből származó emissziós intenzitáshoz képest elhanyagolható). A karbocianin vagy az oxonol emissziós intenzitás növekedése vagy csökkenése a membránpotenciál megváltozására utal.

Ionspecifikus festékek

A legutóbbi évek során kifejlesztettek olyan fluoreszcens sajtáságokkal rendelkező kelátképző molekulákat, amelyek specifikusan képesek a K^+ , a Na^+ és a Ca^{2+} megkötésére. Ezek a hidrophil karakterű festékek nem lipidoldékonyak, és ezért nem képesek a citoplazma-membránon áthatolni. A molekulák acetoximetil-észter származékai viszont már képesek a citoplazma membránon átjutni, és a sejten belül – az észterázok segített hidrolízis következtében – hidrophil, az ionok megkötésére képes molekulákká alakulni. Az ilyen módon a sejtekbe juttatott fluoreszcens és ionkötő sajtásággal rendelkező molekulák már ismét hidrophil jellegűek, ezért a feltöltött sejtekből lassan jutnak ki.

A fluoreszcens jelzők egy csoportja a rendszer pH-jára, ill. ennek megváltozására érzékeny. Ilyen pl. a BCECF (biszkarboxietil-karboxifluoreszcein), amelynek fluoreszcens kvantumhatásfoka a környezet pH-jától függ (1. táblázat).

6.3. táblázat - 1. táblázat. Néhány pH-érzékeny festék spektrális tulajdonsága

festék	gerjesztés (nm)	emisszió (nm)
SNARF-1	488	575
BCECF	488	525/620
	440/488	525

A Ca-érzékeny indikátorok közül az indo1, quin2, fura2 és fluo3 festéket említjük meg (2. táblázat), Na-, illetve K-kötő fluoreszcens kelátor az SBFI (sodium binding fluorescence indicator), illetve PBFI (potassium binding fluorescence indicator). A felsorolt festékeknek vagy a gerjesztési vagy az emissziós spektrális jellemzői (vagy mindkettő) változnak meg az ionokkal való komplexképzés eredményeképpen. A szabad ion koncentrációkat általában a két különböző gerjesztési és/vagy emissziós hullámhossznál mért fluoreszcenciás intenzitások arányából lehet meghatározni. A két mért intenzitás hányadosának képzésével a mért eredményeket függetleníteni lehet a sejtek méretétől, valamint a sejten belüli fluorofór mennyiségétől. (Néhány kalcium- és pH-érzékeny indikátor spektrális sajtáságait az 1. és 2. táblázatban foglaltuk össze.)

6.4. táblázat - 2. táblázat. Néhány kalciumérzékeny festék spektrális tulajdonsága

festék	gerjesztés (nm)	emisszió (nm)
INDO-1	350	405/480
QUIN-2	350	490
Fluo-3	488	525
Fura-2	330/360	510

A porfirinek meghatározása

A porphyrinopathiák felismerése és differenciálása a porfirinek meghatározását teszi szükségessé. A gyors diagnózishoz egyszerű kvalitatív tesztek is alkalmasak, ha ezek eredménye pozitív, akkor lehet szükség munkaiányesebb kvantitatív meghatározásukra. Ilyenkor a vizsgálandó anyagból (vizeletből, székletből, vérből) ecetsavas savanyítással a porfirint oldószerral kivonják, majd sósavas oldatba viszik. Megvilágítva a porfirinek vörös színű fluoreszcenciát adnak.

Kortizol meghatározása emberi szérumból

A mellékvesekéreg által termelt egyik nélkülözhetetlen hormon a kortizol. A vér kortizolszintjéből a mellékvesekéreg működésére lehet következtetni; általában abnormálisan magas a mellékvesekéreg túlzott működése esetén. A Cushing-szindrómában szenvedőkben a szérumkortizol jellegzetes napi ritmusa is elmarad, azaz az este 20 óra és hajnali 2 óra között vett vérben (normális körülmények között ekkor a legalacsonyabb) is

a reggeli értékhez hasonló, magas kortizolszintet észlelünk. A mellékvesekéreg csökkent működése és hypopituitarismus esetén a normálnál alacsonyabb a szérumban a kortizolszintje. Addison-kórban csökken ugyan a vért kortizolszint, de a napi ritmus alacsony értékekkel megmarad.

A szérumban a kortizol vizsgálatára kidolgozott fluorimetriás diagnosztikai módszer egyszerűségénél és érzékenységénél fogva ma már széles körben elterjedt. A meghatározás fluorimetriás színreakción alapul. Ennek lényege, hogy a szabad 11-hidroxi-kortikoszteroidok kénsavas közegben, 470 nm-nél gerjesztve intenzíven fluoreszkálnak, s az emittált fluoreszcencia intenzitása 530 nm-en spektrofluoriméterrel jól mérhető. A mennyiségi meghatározáshoz standard kortizol oldatokból készített kalibrációs görbe előzetes felvétele szükséges.

Ösztrogénhormonok kimutatása

Az ösztrogének etanolos oldatban saját fluoreszcenciájuk alapján mérhetők. A legfontosabb ösztrogének közül a 285 nm-nél gerjesztett 17-ösztadiolnak 333 nm-nél van a fluoreszcencia maximuma, míg az ösztroon és az ösztroliol 325 nm-nél. A szennyeződések azonban könnyen kioltják a fluoreszcenciát.

A lumineszcens immunoesszé módszerek (Luminescent Immunoassay, LIA)

Ezeket az eljárásokat egyre elterjedtebben használják az alapvető kutatásban, a gyógyszerfejlesztésben, illetve a diagnosztikában egyaránt. A népszerűségüket annak köszönhetik, hogy egyszerűbb, gyorsabb, nagyobb érzékenységű és pontosabb méréseket tesznek lehetővé, mint legtöbb más analitikai módszer. Sok biomolekula fiziológiai és patológiai szerepének a megértésében kulcsfontosságúak ezen módszereknek. Emellett igen nagy szerephez jutottak a klinikai kutatásban, és hozzájárultak több betegség molekuláris részleteinek a megértéséhez, valamint új diagnosztikai tesztek kifejlesztéséhez is. A gyógyszeripar szintén előszeretettel használja ezeket a módszereket, mivel hatékonyan alkalmazhatóak metabolikus-, illetve toxikológiai vizsgálatoknál és új hatóanyagok kifejlesztésénél. A széles érdeklődésre válaszolva, többszáz biológiai szempontból érdekes vegyületre fejlesztettek ki a kereskedelemben is kapható immunoesszét, amelyek a diagnosztikában jutnak fontos szerephez. Sok labor saját fejlesztésű (kereskedelemben nem kapható) immunanyagokat és esszéket használ, főleg az alapvető kutatás területén.

A lumineszcens immunoesszé módszerek gyakorlati megvalósítása igen sokféle. Mindegyik módszer közös vonása, hogy antitesteket használ a detektálni kívánt antigén kimutatására és mennyiségi analízisére. Ehhez szükséges, hogy rendelkezésre álljon a vizsgálat tárgyát képező analit molekulát antigénként felismerő antitest. A legtöbb módszer esetében fontos, hogy az antigén-antitest komplexeket el tudjuk választani a szabad antitesttől, illetve antigéntől. A specifikus antigén-antitest kötődés révén az analit molekula detektálásának feladata az antitest kimutatásának problémájává alakul át. Az elmúlt évtizedekben a spektroszkópiának legtöbb ága igen látványos fejlődésen ment keresztül, ezért a legtöbb mérési eljárás érzékenységét és pontosságát nagymértékben megnöveli, ha a mérési feladatot sikerül spektroszkópiai módszerekkel elérhetővé alakítani. A többi spektroszkópiai ágazathoz képest is kiemelkedik a látható fény előállítását és detektálását lehetővé tevő technikák kifinomultsága. A lumineszcens immunoesszéknél használt antitesteket úgy állítják elő, hogy valamilyen lumineszcens technikával mérhető jelölést hordozzanak, ami lehet fluoreszcencia, kemolumineszcencia vagy biolumineszcencia. Az analit molekula kimutatása az antitest által kibocsátott lumineszcencia intenzitásának mérésén keresztül történik. A mennyiségi analízist is megkövetelő tesztekben fontos a kísérleti körülmények precíz optimalizálása és kalibrálása.

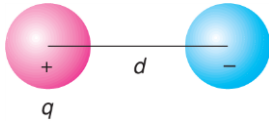
A legnagyobb érzékenységű lumineszcens immunoesszé módszerek az ún. enzim immunoesszék (**Enzyme Immunoassay, EIA**), amelyek egy erősítési lépést is tartalmaznak. Ezekben az antitest nem önmaga jelölt lumineszcensen, hanem egy olyan enzimet hordoz jelölőként, amely valamilyen lumineszcens módon detektálható termék létrejöttét katalizálja. Mivel egyetlen enzim molekula több millió termékmolekulát hoz létre, az ilyen módszerek már néhány ng/ml koncentrációjú analit molekulát képesek detektálni.

3.4. VI/3.4. Fényszóráson alapuló eljárások

A II/2.3.1. részben tárgyaltuk a fényszóródás jelenségét. Mivel a fény szóródása, mint ott kifejtettük függ a részecskék számától, méretétől, így alkalmas lehet megfelelő mérési módszer kidolgozása után a jellemzők meghatározására. A mérések céljára történő felhasználáshoz azonban megfelelő összefüggéseket kell találni a szórt fény jellemzői, és a meghatározni kívánt mennyiségek között. A fényszórást, mint jelenséget már korábban tárgyaltuk és néhány szemléletes megnyilvánulását megbeszéltük (lásd II/2.3.1.). Most megpróbáljuk matematikai összefüggésekkel leírni a jelenséget, hogy a megfelelő jellemzők meghatározhatóak legyenek.

A szórt fényt jellemző mennyiség a hullámhossz és az intenzitás. Ebben a részben csak azzal az esettel foglalkozunk, amikor a **fény hullámhossza**, azaz fotonenergiája **nem változik meg (rugalmas szóródás)**.

Annak megértéséhez, hogy mitől függ a szórt fény intenzitása, legyen a részecske egy homogén közegben. A beérkező fény, mint elektromágneses hullám kölcsönhatásba lép a részecskével. Az elektromos tér változása időlegesen töltéseltolódást hoz létre benne, így egy dipólus keletkezik (VI.29. ábra). Mivel az elektromos térerősség periodikusan változik, egy oszcilláló dipólus keletkezik. Az oszcilláló dipólusok pedig másodlagos sugárzóvá válnak, és elektromágneses sugárzást emittálnak. Ezt a másodlagos sugárzást észleljük, mint szórt fényt. A részecskék a polarizálhatóságuk révén befolyásolják a jelenséget (l. VI.7. Megjegyzés).



VI.29. ábra. A dipólmomentum jelentése

A szórt fény intenzitása a polarizálhatóságon kívül függ a megfigyelés szögétől is. Ebben az esetben gyakorlatilag csak a beeső fény elektromos terére merőleges síkban történő megfigyelésről van szó, mivel ebben a síkban a legnagyobb az intenzitás, ezért a gyakorlatban polarizált fényforrást használnak. A **szórt fény intenzitása** jelentős mértékben **függ a fény hullámhosszától**. Ezek indokolják, hogy a mérőeszközökben nagyon monokromatikus és poláros lézer fényforrásokat használnak.

A II. fejezetben megállapítottak szerint, és figyelembe véve a polarizálhatóság anyagi minőségétől való függését, a következő összefüggést kapjuk:

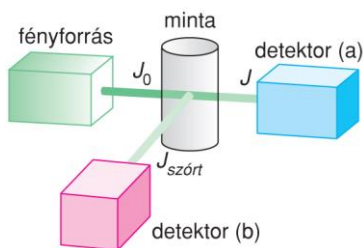
$$J_{E, \text{szórt}} = J_{E0} \frac{8\pi^4 N \alpha^2}{\lambda^4 R^2} (1 + \cos^2 \Theta)$$

(VI.44)

ahol $J_{E, \text{szórt}}$ a szórt fény intenzitása, J_{E0} a beeső intenzitás, N a szóró részecskék száma, α a polarizálhatóság, λ a fény hullámhossza, R a megfigyelő, vagy a mérőeszköz távolsága a szóró térfogattól, Θ pedig a szórás szöge.

Ez az összefüggés abban az esetben érvényes, ha teljesülnek a II. fejezetben megadott feltételek, vagyis a részecskék mérete jóval kisebb, mint a fény hullámhossza. Ilyenkor ún. **Rayleigh-szórásról** beszélünk. Ha a részecskék mérete nagyobb a hullámhossznál, a VI.44. összefüggés még közelítő jelleggel sem használható.

A fényszórás jelenségét több mérési módszerben is felhasználják. A legegyszerűbb, a klinikai laboratóriumokban éppen ezért igen gyakran használt módszerek a megvilágító fény irányában a fényszórás miatt bekövetkező intenzitás csökkenés, illetve a szórt fény intenzitás mérésén alapszanak. Méréstechnikai okok miatt a nagy intenzitású kismértékű megváltozása nem mérhető elegendő pontossággal, ezért attól függően, hogy a mért minta milyen mértékben szórja a fényt, kétféle eljárás alakult ki (VI.30. ábra).



VI.30. ábra. A fényszóráson alapuló klinikai laboratóriumi eljárások vázlata. Az intenzitásmérő elhelyezése: detektor a) – turbidimetria, detektor b) – nefelometria

Nefelometriáról beszélünk akkor, amikor a minta csak kismértékben szórja fényt. Ebben az esetben a szórt fény intenzitását mérik, ami a koncentrációval egyenesen arányosnak tekinthető, feltéve, hogy a részecskék mérete nem változik (VI.31. ábra).

A **turbidimetriát** a nagyobb szórt intenzitások esetében használják gyakrabban. Ilyenkor az eredeti irányba továbbhaladó fény intenzitását mérjük. Mérőeszközként igen gyakran egy egyszerű spektrofotométer is megfelelő. Az intenzitáscsökkenésből adódó látszólagos abszorbanciát határozhatjuk meg így. Viszonylag kis abszorbanciatarományok esetében – a Lambert–Beer-törvényhez (lásd VI/3.1.1.) hasonlóan – a módszer alkalmas koncentráció meghatározásra.

Az orvosi gyakorlatban a két módszer előnye a viszonylag egyszerű eljárás és a gyors eredmény. Gyakran alkalmazzák immunoglobulinok és egyéb fehérjék koncentrációjának meghatározására, megfelelő előkészítés után (pl. kicsapás). Megfelelő kémiai reakciók után a módszer alkalmas szerves anyagok, ill. kisebb szerves molekulák kimutatására is a vizeletben.



VI.31. ábra. Egy klinikai laboratóriumban használható nefelométer

VI.7. Megjegyzés. Polarizálhatóság

A fényszórás értelmezése szempontjából fontos tulajdonsága a részecskének, hogy egy külső elektromos tér mekkora dipólust képes kelteni benne. Ennek jellemzésére használjuk a polarizálhatóság (α) fogalmát, ami az egységnyi elektromos térerősség által létrehozott dipólus nagyságával egyezik meg.

$$\vec{d} = \alpha \cdot \vec{E}$$

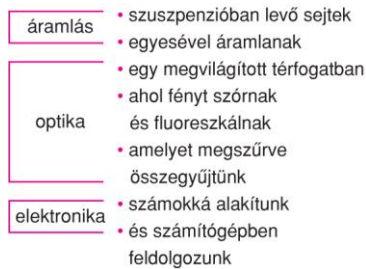
Mint látható, a d dipólmomentum vektormennyiség. A VI.29. ábra alapján a dipólmomentum nagysága a töltések és a köztük levő távolság függvénye:

$$|\vec{d}| = d \cdot q$$

iránya megegyezik a töltések távolságvektorával.

4. VI/4. Áramlási citometria és sejtszeparálás

Az áramlási citometria és sejtszeparálás ma már több évtizedes múltra tekint vissza, és napjainkban a sejtbiológiai, sejt-biofizikai és immunológiai kutatások nélkülözhetetlen eszköze. Mintegy tíz éve magas színvonalú rutin klinikai laboratórium sem képzelhető el áramlási citométer nélkül. Az alkalmazások tág köre a módszer precizitásával, valamint a kapott adatok kiváló statisztikájával kapcsolatos (VI.32. ábra). A módszer a fluoreszcens jelzéstechnikák és a fényszórásmérés rutin klinikai alkalmazására is példa.



VI.32. ábra. Az áramlási citometria alapjai

Történeti áttekintés: a módszer kialakulásának fontos állomásai

A sejt populációk kvantitatív jellemzése mindig is foglalkoztatta a sejtbiológusokat. Hagyományosan a mikroszkópia, valamilyen biokémiai vagy immunológiai technikával kombinálva nyújtott lehetőséget új sejt típusok vagy alpopulációk felismerésére. A mikroszkópia segítségével nagyon pontos morfológiai információhoz lehet jutni, és bizonyos keretek között a sejtek különböző tulajdonságainak mennyiségi meghatározása is lehetséges. Nagy hátránya ennek a megközelítésnek az, hogy a mérések időigényesek, és a statisztikai pontosság is limitált azáltal, hogy mikroszkópiával csak kisszámú sejt vizsgálható belátható időn belül. A ritka sejt típusokat sok esetben nem lehet detektálni. A kvantitatív mikroszkópia hátrányait nagymértékben lehet csökkenteni a mintavételezés automatizálásával. Az első nagy lépést ebbe az irányba Caspersson tette, aki megoldotta a sejtek DNS-tartalmának automatizált mérését mikroszkóp tárgylemezeken. Az ő kísérletei indították el a nagy feloldású automatizált képanalízist, amely napjainkra az áramlási citometria egyik vetélytársává vált.

Az áramlási citometria olyan sok fizikai alapelveket és technikai megoldást hasznosít, hogy ezek pusztán felsorolása messze meghaladná a könyv kereteit, ezért csak a legfontosabbak említésére szorítkozunk. A James Coulter által megszerkesztett részecskeszámláló és -analizátor mindenképpen az áramlási citométer közvetlen elődjének tekinthető. Ebben a szerkezetben a sejtek vagy egyéb részecskék egy néhányszor 10 μm átmérőjű nyíláson haladnak keresztül egy elektrolit oldattal együtt, és az oldattal kitöltött kapilláris szakasz vezetőképességet mérjük. Amikor egy részecske áthalad a kapillárison, részben kiszorítván az oldószert, az átáramló elektrolit keresztmetszete leszűkül és megváltoztatja a vezetőképességet. Az így kapott elektromos impulzusok száma arányos az áthaladt sejtek számával, míg az impulzusok nagysága (az impulzusok magassága, illetve az impulzusok alatti terület) arányos a részecskék térfogatával. Az aszimmetrikus sejtek relatív orientációja is csak kismértékben befolyásolja a csúcsok alatti területet, ezért az ún. Coulter-térfogat mind a mai napig a legjobb közelítést adja a sejtek térfogatára. Ilyen alapelven működő modern készülékek a döntő módon a Coulter testvérek által alapított cég által készített **hematológiai automaták**, amelyek a **fehér- és vörösvérsejt-koncentráció pontos mérésén** kívül a fehérvérsejtek egyes alosztályainak relatív gyakoriságát is megadják, valamint a vörösvérsejtek térfogatát és hemoglobintartalmát is képesek mérni.

A lamináris áramláson alapuló hidrodinamikai fókuszálás bevezetése, valamint az elektronikai fejlesztések nagymértékben hozzájárultak a Coulter-készülékek pontosságának növeléséhez. Mindezek fontos szerepet kaptak az optikai alapelveket hasznosító áramlási citométerek kifejlesztésében is. A másik lényeges hozzájárulás az optikai áramlási citométerek kifejlesztéséhez Kamentskyé, aki 1965-ben optikai módszerek segítségével szuszpenzióban lévő sejtek alkotóinak mérésére alkalmas berendezést konstruált. Egy sejtről egyidejűleg több paramétert is képes volt mérni, és bevezette a kétdimenziós adatmegjelenítést, valamint a számítógépeket az adattárolásban és az analízisben. Egy további fontos momentum Van Dilla nevéhez kapcsolható, aki először készített olyan készüléket, amelyben az áramló folyadék, a megvilágítás, valamint a detektorok egymáshoz képest merőlegesen helyezkedtek el. Később ez az elrendezés standarddá vált a kereskedelmi készülékekben. A terület fejlődéséhez valószínűleg Fulwyler hozzájárulása volt a leglényegesebb. 1965-ben leírt egy a részecskék szétválasztására alkalmas készüléket, amely egy Coulter-analizátorhoz kapcsolva képes volt sejteket, azok térfogata alapján szétválasztani. A használt alapelv nagyon hasonlatos a Sweet által kifejlesztett, és a tintasugaras nyomtatókban használt elvhez. Ez a technika számos módosítást követően a legtöbb készülék nélkülözhetetlen részévé vált.

Ezek az alapelvek képezik a mai készülékek vázát, amelyekhez több lézert és több detektort kapcsolva, megteremtették a multiparaméteres áramlási citometria alapjait. Ez a technika lehetővé teszi több fluoreszcens festék egyidejű alkalmazását, így egyetlen sejtről számos információ szerezhető egyidejűleg. Természetesen elengedhetetlen feltétel a nagy teljesítményű számítógépek alkalmazása.

4.1. VI/4.1. Az áramlási citométerek működésének általános elvei

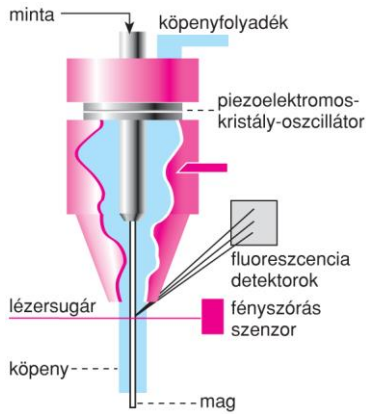
A legtöbb áramlási citométer működési elve, illetve felépítése nagy vonalakban hasonló. A mintát – ami szuszpenzióban lévő sejteket jelent – általában túlnyomás segítségével egy fejhez vagy egy áramlási cellához juttatják. Egy tipikus rendszerben a minta a fejet a középpontjában lévő nyílás közepén hagyja el, és folytatja útját egy folyadékoszlopban (VI.33. ábra). Mivel a direkt kontaktus a nyílással a sejteket károsítaná, és a sejtek precíz pozicionálása is fontos a pontos mérés végett, általában egy másik folyadékrendszer, ún. köpenyfolyadékot alkalmaznak, ami körülöleli a mintafolyadékot, koncentrikus hengereket képezve. Mindkét folyadékrendszer, illetve a fejen lévő nyílást úgy méretezik, valamint a nyomásviszonyokat is úgy alakítják, hogy az áramlás lamináris legyen, azaz a két rendszer egymással ne keveredjen (VI.34. ábra). Ezt nevezik **hidrodinamikai fókuszálásnak**. Mivel a sejtek szuszpenzióban vannak, a fejet a sejtek sorban egymás után hagyják el. Néhány milliméterrel a fej alatt a sejteket megvilágítják egy fókuszált fényforrás segítségével, amely vagy egy lézer, vagy valamilyen lámpa lehet. Minden egyes sejtről optikai jelek keletkeznek, részben fényszórás, illetve ha fluoreszcenciás festékekkel meg vannak jelölve, akkor fluoreszcencia jelek is. Ezeket az optikai jeleket megfelelő detektorok – fotodiódák vagy fotoelektron-sokszorozók – segítségével lehet mérni. A fényszórás detektor vagy a gerjesztő fénynyalábbal egy irányban, vagy arra merőlegesen helyezkedik el. Az előbbi esetben beszélünk előre irányuló fényszórásról (Forward Angle Light Scatter, FALS), míg az utóbbi esetben 90°-os, vagy oldal irányú fényszórásról. Az abszorpciós detektort természetesen mindig a gerjesztő nyaláb irányában helyezük el, bár meg kell jegyezni, hogy ennek használata visszaszorulóban van. A fluoreszcencia detektorokat általában a gerjesztő fénynyalábra merőlegesen kell elhelyezni, de néhány speciális kutatási feladat esetén a gerjesztő nyaláb irányában is helyeztek el fluoreszcencia detektorokat. A detektorokon keletkező jeleket először erősítik, majd analóg-digitális átalakítás segítségével számokká alakítják, így megoldható az adatok tárolása, analízise, illetve megjelenítése. Ez lehetséges egyparaméteres relatív gyakoriság hisztogram formájában, ahol az x tengely arányos a jel – és ezen keresztül a mérni kívánt sejtparaméter – nagyságával, míg az y tengelyen azon sejtek száma szerepel, amelyek az adott tulajdonsággal rendelkeznek. Az adatok további feldolgozása is lehetséges.

Mivel a megvilágítás időtartama néhány mikroszekundum, a készülékek segítségével nagysebességű analízis érhető el. Az adatgyűjtés sebessége elérheti a néhány tízezer vagy akár százezer sejt/másodpercet is. A minta sejtkoncentrációját 10^5 és $1-2 \cdot 10^6$ sejt/ml közötti értékre kell beállítani.

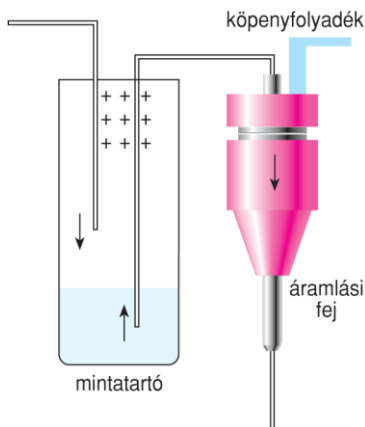
Az áramlási citometriában mérhető fényszórás és fluoreszcenciás jelek igen sok információt hordoznak. Az előre irányban mért fényszórás a sejteknek a méretét jellemzi, ugyanakkor a sejt törésmutatójától is függ. Tekintettel arra, hogy az élő sejtek törésmutatója a citoplazmamembrán áteresztőképességének növekedésével párhuzamosan jelentős mértékben lecsökken, az előre irányban mért szórt fény intenzitása lehetőséget ad az élő és az élettelen sejtek megkülönböztetésére, de a sejttörmelékek is felismerhetők. Hasonlóképpen megkülönböztethetők az azonos alakú, de különböző méretű sejtek is. Az aszimmetrikus sejtek többféle orientációt vehetnek fel a detektorhoz képest, ezért a keletkező heterogén jelek azt a hamis látszatot kelthetik, hogy a sejtpopuláció inhomogén. Például a fánk alakú vörösvértestek bár egyformák, mégis két csúcsból álló hisztogramot eredményeznek. Az ilyen műtermékek kiszűrése érdekében fontos, hogy gyanú esetén a sejteket szeparáljuk, és mikroszkópban is megvizsgáljuk.

Az előre irányú fényszórás jellel ellentétben a 90° alatt szórt fény intenzitása érzékenyen változik az intracelluláris strukturáltsággal. Ennek alapján lehetőség nyílik, egyebek között, különböző leukocita szubpopulációk egymástól való elválasztására.

A fluoreszcenciás mérések során feltételezik, hogy **a mért emissziós intenzitás arányos a sejtekhez kötött fluorofór mennyiségével**. Ezt az elvet nevezik az áramlási citometria „**centrális dogmájának**”. Ez általában teljesedik, de mindig figyelni kell a lehetséges hibákra.



VI.33. ábra. A hidrodinamikai rendszer



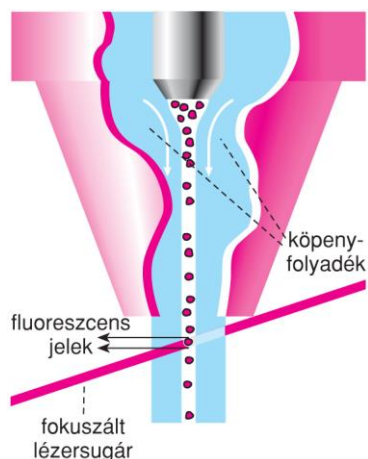
VI.34. ábra. Az áramlás biztosítása túlnyomással

Az áramlási sebesség szerepe

A megfelelő áramlási sebesség fontos a készülékek optimális működéséhez, mert mindkét végletet kerülni kell. Amikor túlnyomás segítségével szállítják a mintát a fejhez, akkor a túlnyomás érték általában a 0,5–2 kPa tartományba esik, míg a köpenyfolyadék nyomása mintegy 90 kPa. A mintafolyadék pozíciójának stabilitása nagyobb, ha az áramlási sebesség kisebb, mert ez vékonyabb mintafolyadék-átmérőt eredményez. Mivel a megvilágító fénynyaláb intenzitáseloszlása nem homogén, a nagyobb pontosságú mérések kis mintasebességet kívánnak. Meg kell jegyezni, hogy az igen kis mintasebességek túlnyomás segítségével rosszul szabályozhatók, ezért ha igen kis áramlási sebességeket kell biztosítani, azt speciálisan tervezett fecskendők segítségével érik el.

Az áramlási citométerek felépítése és fontos technikai paramétere

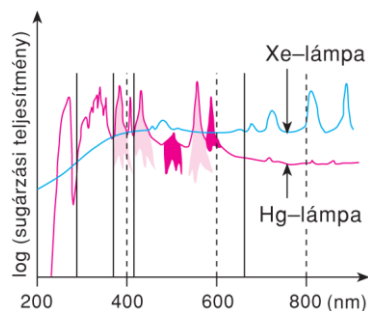
A fej és a köpenyfolyadék. A fej egy kónuszosan kiképzett folyadékkamra, amelybe mind a köpeny-, mind a mintafolyadékot bevezetik (1. ábra). A mintafolyadék centrálisan lép be, amelyet a köpenyfolyadék körülölel. A fej, a csövek méretezése olyan, hogy megfelelő nyomásviszonyok biztosításával az áramlás stabilan lamináris legyen. A mintafolyadék a köpenyfolyadék által körülveve a nyílás közepén hagyja el a fejet. A nyílás kerek, átmérője mintegy 50–200 μm . A mintafolyadék, azaz a sejtek sebessége tipikus esetben 10 m/s. A köpenyfolyadék lehet desztillált víz, de ha a sejteket szeparálni akarják, akkor valamilyen izotóniás pufferoldatot kell alkalmazni. Néhány speciális esetben, amikor igen nagy áramlási stabilitás kívánatos, akár kettős köpenyfolyadék-rendszert is lehet alkalmazni. Az újabb készülékek fejébe még egy cső csatlakozik, amelyet alacsonyabb nyomáson tartva a nem kívánatos sejtaggregátumok eltávolítására lehet használni.



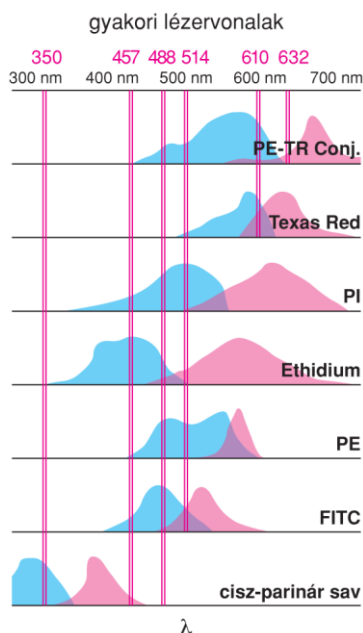
1. ábra. Az áramlási cella vázlatos képe

Fényforrások megválasztása a fluoreszcens jelzők tulajdonságai alapján. Az újabb áramlási citométerek fényforrása vagy lámpa (2. ábra), vagy lézer (3. ábra). Mindkettő számos előnnyel és hátránnyal rendelkezik, és a választás közülük alapvetően a használni kívánt alkalmazásoktól függ. A higanygőz- és xenonlámpák (lásd II/2.2.6.) azzal az előnnyel járnak, hogy nem kívánnak hűtést és speciális elektronika sem szükséges a működtetésükhöz, azaz lényegesen olcsóbbak, mint a lézerek. Mindkét lámpa számos emissziós csúcscsal rendelkezik, amelyek különösen hasznosak akkor, ha egybeesnek valamelyik fluoreszcens festék abszorpciós maximumával. A higanygőz lámpának 365 nm-nél egy igen erős emissziós maximuma van, ezért nagyon alkalmas a legtöbb DNS-specifikus festék gerjesztésére. A xenon lámpa spektruma széles tartományban folytonos, ezért számos fluoreszcens festék – elsősorban a leggyakrabban használt fluoreszcein alapú festékek – gerjesztésére jól használható. A lámpák használata speciális optikai konfigurációt kíván, és a fókuszálásuk is sok esetben körülményesebb, mint a lézereké. A legtöbb kereskedelmi áramlási citométer argonion lézert használ elsődleges fényforrásként. Speciális elektronikus visszacsatolási mechanizmusok segítségével biztosítható a fényintenzitás stabilan tartása is. Ebben az esetben a fényintenzitás hosszú távú változása sem haladja meg az 1%-ot, ami a legtöbb alkalmazás esetén kielégítő pontosságot eredményez. A lézersugár nagyon jól, gyakorlatilag csak a diffrakciós limit által behatároltan fókuszálható. Mindezek a tulajdonságai nagyon fontosak az áramlási citometriás felhasználásokban. Az argonion lézer számos hullámhossz kibocsátására képes a 457–528 nm tartományban (bizonyos fajtái a 353–362 nm-es UV-sávban is emittálnak). Az argonlézerek használhatók úgy is, hogy minden látható vonalat egyszerre bocsátanak ki, de az egyes vonalak egyenként is kinyerhetők belőlük. Néhány lézervonalat mutatunk a 3. ábrán egyes gyakran használt festékek gerjesztési spektrumaival együtt.

A sokparaméteres áramlási citométerekben egynél több fényforrás segítségével világítják meg a mintákat. Az első lézer általában egy argonionlézer 488 nm-es vonala, amelyet kombinálni lehet egy másik argonion lézer 514 vagy 528 nm-es vonalával. Egy másik lehetőség, hogy a második fényforrás egy festéklézer, amelyet egy másik argonionlézer pumpál vagy pedig egy vörösben emittáló kripton- vagy He-Ne lézer. A festéklézerek hangolhatók – a festékek cseréjével akár az egész látható spektrum átfogható –, bár a festékek cseréje nagyon körülményes és drága művelet. A kripton lézerek, bár hangolhatók, de a stabilitásuk sok kívánnivalót hagy maga után. A lézer fényforrások sokszor drágák és speciális elektromos és hűtési igényt támasztanak, mégis a legjobb fényforrásoknak tekinthetők az áramlási citométerekben.



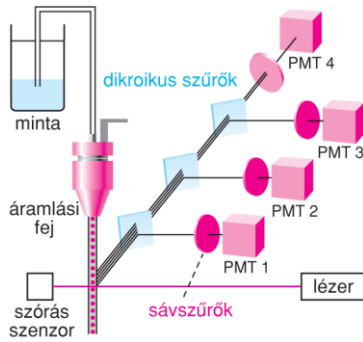
2. ábra. A higanygőz- és a xenonlámpák spektruma (figyeljük meg, hogy az ordináta logaritmikusan beosztású)



3. ábra. Az áramlási citometriában használt lézerek vonalai és néhány gyakrabban alkalmazott festék gerjesztési és emissziós színeképe

A megvilágítási pont. Bármilyen legyen is a fényforrás egy áramlási citométerben, azt arra a pontra kell fókuszálni, ahol a sejtek keresztezik a fénynyaláb útját. Legtöbbször ez a fej alatt néhány milliméterre van. Itt a sejtek egy hengeres folyadékoszlopban utaznak, amelynek a közepén a mintafolyadék van. Bár a mintafolyadék átmérője nagymértékben függ az áramlási sebességtől, az átmérő tipikusan 15–20 μm . A köpenyfolyadék átmérője nagyjából megegyezik a nyílás átmérőjével, azaz mintegy 50–200 μm . A megvilágító fénynyalábot a mintaoszlopra fókuszálják. A fókuszált nyaláb a vizsgálat céljának függvénye. Ha maximális érzékenység a cél – mint például sejt felszíni antigének vizsgálatakor –, akkor a lehető legnagyobb teljesítményt kell a mintára juttatni, azaz a kör alakú megvilágítás az előnyös. Ebben az esetben a megvilágító nyalábot gömbi lencsékkel fókuszálják, és a fénynyaláb átmérője összemérhető a folyadékoszlop átmérőjével. Az optikai jelek ilyenkor maximálisak, de mivel a fénynyaláb intenzitása Gauss-eloszlású, a legkisebb elmozdulás a mintanyaláb helyzetében nagymértékben befolyásolja a jel nagyságát, mert a széli részekben lényegesen kisebb a megvilágító fény intenzitása. Sokkal homogénebb megvilágítás szükséges, ha a nagy pontosság a cél. Olyan méréseknél van ennek jelentősége, amikor a mérendő jel viszonylag nagy, az érzékenység nem kritikus, de nagy pontosság kívánatos. Egy példa erre a sejtek DNS-tartalmának meghatározása. Ez úgy érhető el, hogy a hengeres és gömbi lencsék segítségével elliptikus keresztmetszetű fénynyalábot állítanak elő. Az ellipszis hossz tengelye mentén a középső részen a fényintenzitás gyakorlatilag állandó, így egyenletes megvilágítást lehet biztosítani. Ez az elrendezés nagyon pontos méréseket tesz lehetővé, bár az érzékenység kétséget kizáróan csökken (4. ábra).

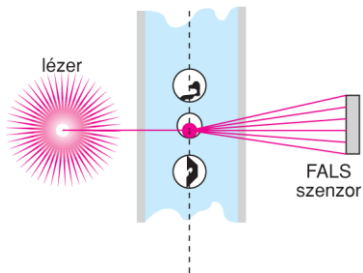
A megvilágítási pont nem mindig levegőben lévő folyadékoszlopon van. Olyan konstrukciók is ismeretesek, ahol a sejteket egy áramlási cellában világítják meg. A megvilágítási pont általában a cella közepén van. Ez az elrendezés nem olyan érzékeny a mechanikai hatásokra, mint a folyadékoszlopos rendszer. A megvilágítás optikai útja sokkal egyszerűbb, mivel a kamra falai párhuzamos üveglemezek, és a nem kívánt reflexiók is elkerülhetők. Az emittált fény gyűjtési határfoka is növelhető, mert ebben a konfigurációban homorú tükrökkel is körbe lehet venni a megvilágítási pontot. Ez a módosítás főleg a klinikai célú – egyszerűbb – áramlási citométerekben terjedt el, mert a jobb hatásfokú jelgyűjtés kisebb teljesítményű, sok esetben olcsóbb, léghűtéses lézerek használatát is lehetővé teszi. A sejtszeparálás azonban a kamrás elrendezésnél sokkal nehezebb és alacsonyabb sebességű.



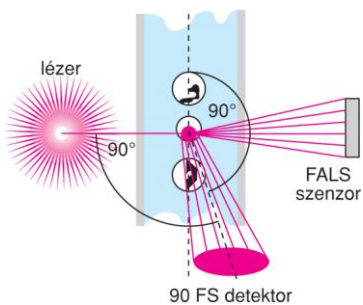
4. ábra. Tipikus áramlási citométer optikai elrendezése

Fényszórás. A jelöletlen sejtek vagy egyéb részecskék is szórják a megvilágító fényt. A fény minden irányba szóródik, ezért számos lehetőség van a detektálására. A legegyszerűbb lehetőség az érzékelő elhelyezésére a megvilágító nyaláb irányában van. Ezt nevezzük előreirányú fényszórásnak (FALS) (5. ábra). A megvilágítással párhuzamosan detektálható fény számos összetevőből áll, csak egy része a részecskéken szóródott fény. A fényforrásból jövő direkt fény intenzitása sokkal nagyobb, mint a szóródott nyalábé. Ezért speciális optikai és mechanikai elemekkel ki kell szűrni a nemkívánatos komponenseket. A fényszórás jelensége erősen irányfüggő. Kutatóműszerekben akár mozgatható fényszórás detektorokat is lehet használni, így a fényszórás szögfüggése is mérhető. Ennek pontos értelmezése nagyon bonyolult, mind a mai napig főleg a tapasztalatra kell szorítkoznunk.

A szórt fényt fókuszáló elemekkel gyűjtik össze. Mivel a mérendő intenzitások viszonylag nagyok, szürke szűrőket kell használni a jelek gyengítése céljából. Az apertúra átmérőjének állításával szabályozni lehet a jel gyűjtésének térszögét is. Maga a detektor általában fotodióda, amely jól tűri a nagyobb fényintenzitásokat is. Az újabb készülékekben a 90°-os fényszórás mérésére is van lehetőség. Itt a detektorok inkább a fluoreszcencia mérésére használt detektorokra hasonlítanak (6. ábra).



5. ábra. Az előre irányú fényszórás (Forward Angle Light Scattering, FALS) detektálása

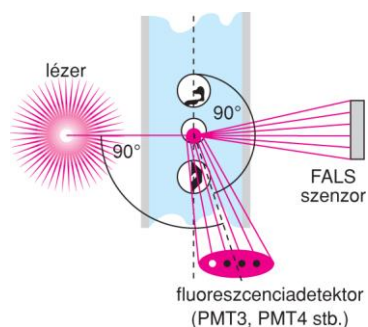


6. ábra. A 90°-os fényszórás detektálása

Fluoreszcencia detektorok. A fluoreszcencia detektorok elhelyezése függ az egész készülék optikai elrendezésétől. Amikor lézer a fényforrás, a detektorokat merőlegesen helyezik el mind a megvilágító nyalábhoz, mind a folyadékoszlophoz képest (7. ábra). Mivel a legtöbb rendszerrel a fluoreszcens spektrum több régiójának specifikus detektálását kívánják megoldani, az emittált fényt hullámhossz alapján szét kell osztani. Ezt speciális optikai elemekkel, dikroikus tükrökkel és optikai szűrőkkel lehet megoldani. Mind a dikroikus tükrök, mind a sávszűrők az interferencia jelenségét használják ki. Az üveg felületére változó vastagságú rétegeket gözölnek, amelyeken a fény részben áthatol, részben a közeghatárokon visszaverődik. Ezek a nyalábok egymással interferálnak, és a rétegek vastagságától függően meghatározott hullámhosszakot

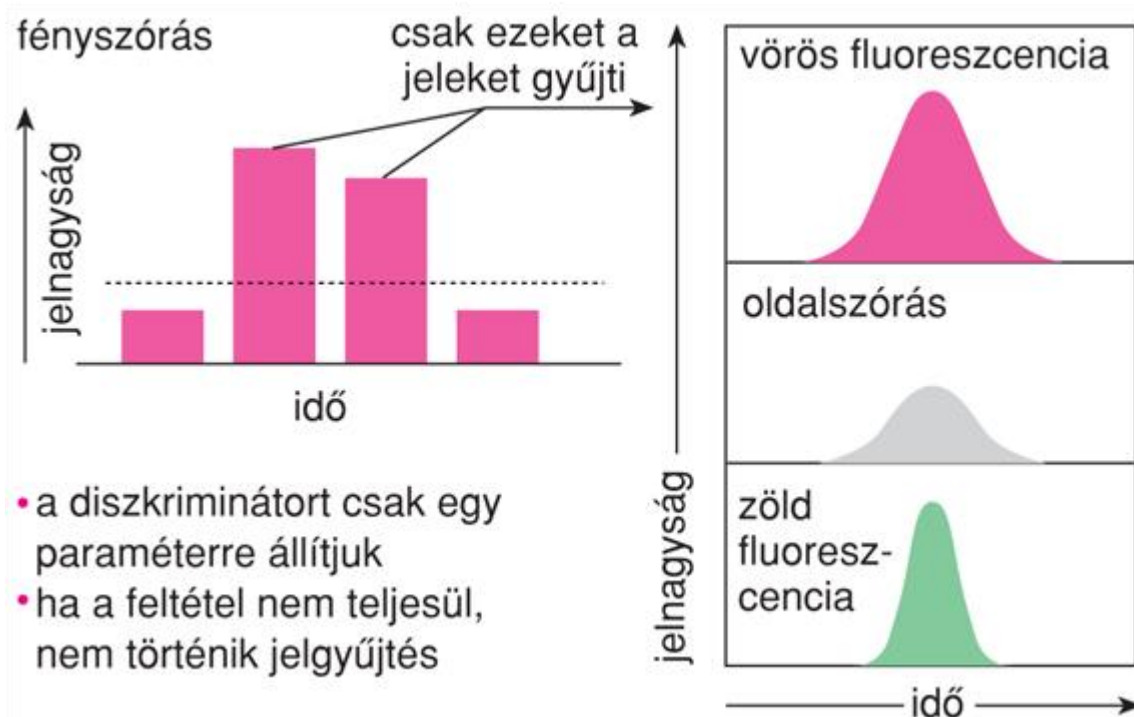
átengednek, bizonyosakat pedig visszavernek. A rétegek számának és vastagságának szabályozásával tetszőleges optikai karakterisztikájú szűrők állíthatók elő. A dikroikus tükröket a fénynyalábhoz képest 45° -ban kell elhelyezni, míg a sávszűrőket a nyalábra merőlegesen. Mivel a rétegek látszólagos vastagsága függ a szögtől, a pontos beállításnak jelentősége van. (A szögek kis változtatásával a szűrők „finom hangolása” is lehetséges. A dikroikus tükrök és a sávszűrők nagyon érzékeny optikai eszközök, óvatosan kell velük bánni.)

A fluoreszcens fény detektálására az ún. fotoelektron-sokszorozók (PMT, VIII/3.2. alfejezet) a legalkalmasabb eszközök. A fényelekromos jelenség alapján, a PMT-k érzékenysége függ a detektor anyagától. Újabbak vörösérzékeny fajtákat is kifejlesztettek, amelyeknek az áramlási citometriában nagy a jelentőségük, mivel több fluoreszcens festék együttes használatát is lehetővé teszik. A PMT fényérzékeny részét vagy a cső végén vagy az oldalán lehet elhelyezni.



7. ábra. A fluoreszcencia detektálása

Elektronika. Az áramlási citometriában a mérendő fényintenzitások nagyon különböznek. Emiatt az erősítőknek (lásd VII/1.3.) speciális követelményeknek kell megfelelniük: nagy tartományban lineárisnak kell lenniük viszonylag kis zaj mellett. A lineáris erősítők mellett ún. logaritmikus erősítőket is használnak, amelyek a jel logaritmikus átalakításával széles intenzitástartomány átfogására képesek (ennek a sejtfelszíni antigének mennyiségi meghatározásában van különös jelentősége). A fotodiódákról, illetve fotoelektron-sokszorozókról származó erősített jeleket analóg-digitális átalakítók (ADC) segítségével számokká alakítják. A detektorokról származó jelek a sejtek lefutásának megfelelő időfüggést mutatnak: így lehetőség van a jelek magasságának (maximális nagyságának), szélességének, illetve a jelek alatti terület nagyságának digitalizálására, sok esetben új paramétert szolgáltatva ezzel. Ha egy sejt szimmetrikus és a fluoreszcencia sejten belüli eloszlása egyenletes, akkor a fenti jelek arányosak egymással. Aszimmetrikus sejtek, illetve inhomogén fluoreszcenciaeloszlást mutató sejtek esetén a jel alatti terület arányos a teljes fluorofór mennyiséggel, míg a jel magassága a fluorofór maximális sűrűségét mutatja meg. A jel szélessége a sejt nagyságával arányos paraméter (8. ábra).

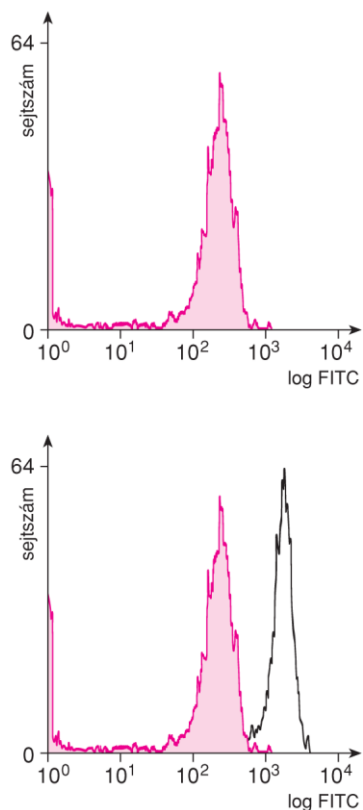


8. ábra. Az elektronika diszkrimináló funkciója. Csak egy bizonyos szintet meghaladó nagyságú jelet gyűjtünk (küszöbérték). A diszkriminátort csak egy paraméterre állítjuk. Ha a feltétel nem teljesedik, a jelet nem vizsgáljuk

4.2. VI/4.2. A mérési eredmények feldolgozása, adattárolás

Az adattárolás és megjelenítés legegyszerűbb esete az, amikor minden paramétert külön kezelünk, és mint egyparaméteres relatív gyakoriság hisztogramot tároljuk. Itt az abszcissza arányos a mért mennyiséggel, míg az ordináta az adott mennyiségi tulajdonsággal rendelkező sejtek számát adja meg (VI.35. ábra). Az eloszlásokat származtatott paraméterekkel, mint átlag, szórás, ferdeség, variációs koefficiens stb. is lehet jellemezni. Az ilyen típusú adattárolás előnye a kis helyigény, de több paraméter mérése esetén érdemes megvizsgálni az adatok közötti korrelációt is.

Ha például kis és nagy sejtjeink vannak, amelyek lehetnek „fényesek” és „halványak”, akkor az egyparaméteres hisztogramok összehasonlítása révén nem lehet tudni, hogy a kis sejtek vajon fényesek-e vagy halványak.

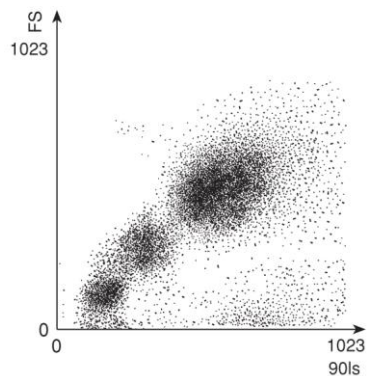


VI.35. ábra. A fluoreszcein-izotiocianát (FITC) fluoreszcens jelző intenzitásának eloszlása a sejtpopulációban. Lehetőség van két vagy több mérési eredmény egyidejű megjelenítésére is, vagy több-féle sejtpopuláció megkülönböztetésére

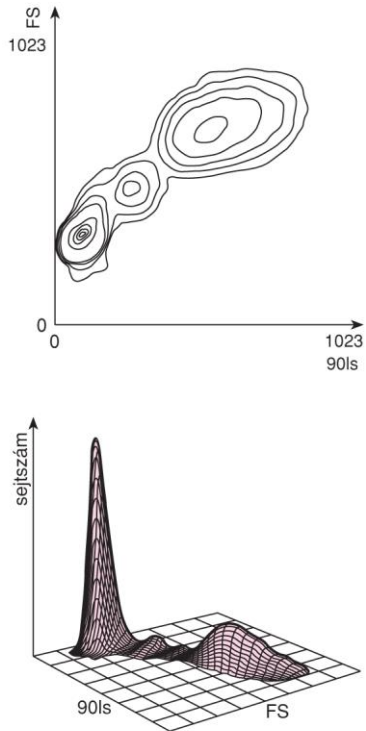
Korrelációs módszerek

Az ilyen jellegű információ megszerzése céljából az adatokat korreláltan kell gyűjteni és tárolni. Az ún. „**list mode**” (lista) fájlokban való adattárolás esetén ez egyes sejtek különböző tulajdonságait jellemző paramétereket sejtenként együtt tároljuk: a fájl egyes sorai egy-egy sejtnak felelnek meg, míg az oszlopok a különböző paramétereket jelentik. Az így tárolt adatok megjelenítésére számos lehetőség kínálkozik.

A kétparaméteres adatábrázolás tradicionális formája az ún. „**dot plot**”. A koordináta-rendszerben minden pont egy-egy sejtnak felel meg. A két tengelyen két különböző paramétert ábrázolunk úgy, hogy a pontok koordinátaértékei arányosak legyenek a mért paraméter értékével (1. ábra). A megjelenítésnek számos változata létezik: lehet színekkel kódolni a pontok sűrűségét, de kontúrplotként a szintvonalakkal analóg megoldás is használatos. Három dimenzióban – ahol a magasság a sejtek számával arányos – izometrikusan is lehet az adatokat ábrázolni (2. ábra).

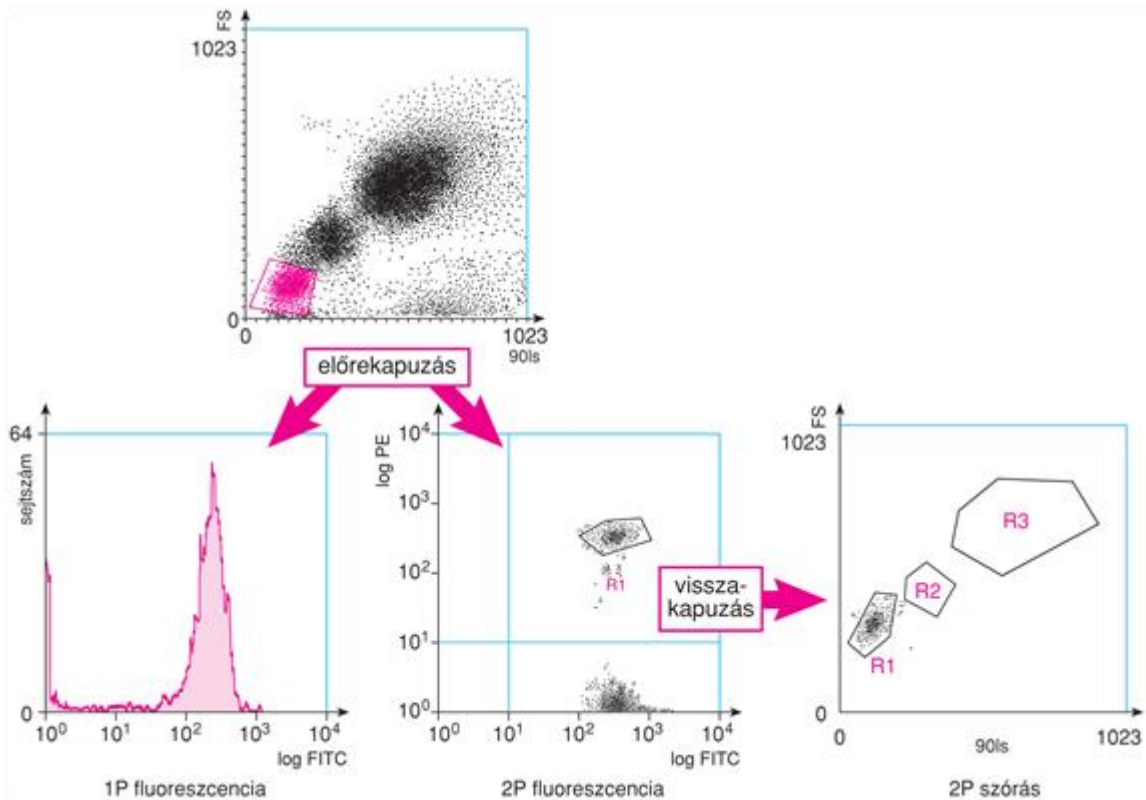


1. ábra. Kétparaméteres adatmegjelenítés, az ún. „dot-plot”



2. ábra. Kétparaméteres adatmegjelenítés. Felül a kontúrábrázolás, alul pedig az izometrikus megjelenítés látható

Sok esetben az adatanalízist a sejtek egy részére kell korlátozni. Például csak a monociták fluoreszcenciájára vagyunk kíváncsiak, és nem akarjuk az egyéb „szennyező” sejteket bevonni az adatok közé. Ilyenkor ún. kapuzás alkalmazásával egy vagy több két dimenziós ábrázolás segítségével definiálhatjuk a vizsgálni kívánt populációt, és az analízist csak az adott populációra nézve végezzük el. Ez a technika használatos a szeparálási üzemmódban is az elkülöníteni kívánt populáció definiálására (3. ábra).



3. ábra. A kapuzás elve. Az adatgyűjtést, illetve adatmegjelenítést tetszőleges feltételrendszert teljesítő sejtekre lehet korlátozni

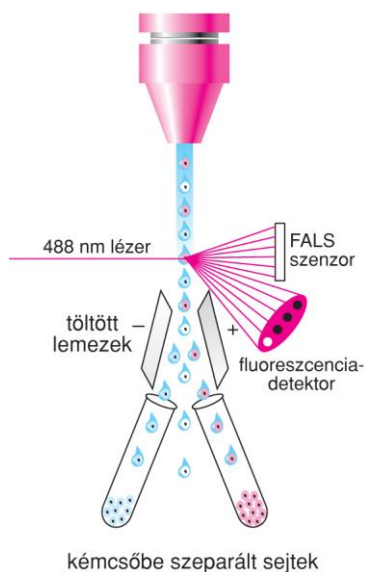
4.3. VI/4.3. Sejtszeparálás

A sejtszétválasztás nagyon vonzó lehetőség az áramlási citometriában. Lehetővé teszi, hogy a kívánt alpopulációt tovább vizsgálják: akár morfológiai, akár biokémiai analízist végezzenek, de ha a műveletet steril körülmények között végzik, akkor a sejtek tovább is tenyészthetők, sőt speciális berendezések még a klónozást is lehetővé teszik.

A szétválasztás alapelve a következő. A fejet egy piezoelektromos vibrátor segítségével nagy frekvenciával – általában 30-40 kHz – rázatják, ami ahhoz vezet, hogy a fejet elhagyó folyadékoszlop cseppecskékre bomlik (VI.36. ábra). Ha az áramlási sebességeket és a rázatási frekvenciát összehangoljuk, akkor a cseppképződés helye időben állandó lesz. Ez azt jelenti, hogy meghatározható az az idő, amely ahhoz szükséges, hogy egy sejt a megvilágítási ponttól a cseppképződés helyéhez eljusson. Ezt az időtartamot késleltetési időnek nevezzük. A sejtek megvilágítását követően a késleltetési időnél sokkal rövidebb idő alatt megállapíthatók a sejtek tulajdonságai. A kapuzás alapelveit alkalmazva a mért paraméterek tetszőleges kombinációját felhasználva alpopulációkat definiálhatunk, és döntést hozhatunk arról, hogy az adott sejt megfelel-e a kívánt feltételeknek, azaz külön kívánjuk-e választani. Ha a döntés igen, akkor amikor ez a sejt a cseppképződés helyére ér, az egész folyadékoszlopot elektromosan feltöltjük. Amikor a cseppcske leszakad, a töltést a csepp felszínén megtartja (az elektromos térerő a csepp belsejében nulla). Ezt követően a folyadékoszlopot földelni kell, hogy a következő cseppcske, amely üres vagy nemkívánatos sejtet tartalmazhat, ne töltődjek fel. A feltöltött cseppet elektromos téren – általában mintegy 5000 V/cm – átvezetve az eltérül, és külön kémcsőben felfogható. Attól függően, hogy pozitív vagy negatív töltést alkalmazunk, a sejtek jobbra vagy balra térülnek el, sőt különböző nagyságú töltésekkel akár négy alpopuláció is szétválasztható egyidejűleg (VI.37. ábra). A szeparálási sebesség mintegy 3000–5000 sejt/s. Ez a sebesség a legtöbb feladatra megfelelő, bár amikor nagy tömegű sejt szétválasztására van szükség, akkor célszerű más módszert választani.



VI.36. A „cseppképződés” elve. Ha folyadékot bocsátunk levegőbe, az cseppekre oszlik. Ha a forrást meghatározott frekvenciával rezgésbe hozzuk, a cseppek mérete és a tengely mentén elfoglalt helye nagy pontossággal kontrollálható



VI.37. ábra. A fluoreszcenciaaktivált sejtszétválasztás elve

4.4. VI/4.4. Az áramlási citometria néhány alkalmazása

Az áramlási citometria számos területen használható, amelyek részletes tárgyalása itt nem lehetséges: a továbbiakban röviden áttekintjük a leggyakrabban használt fluoreszcenciás jelölők néhány alkalmazási lehetőségét.

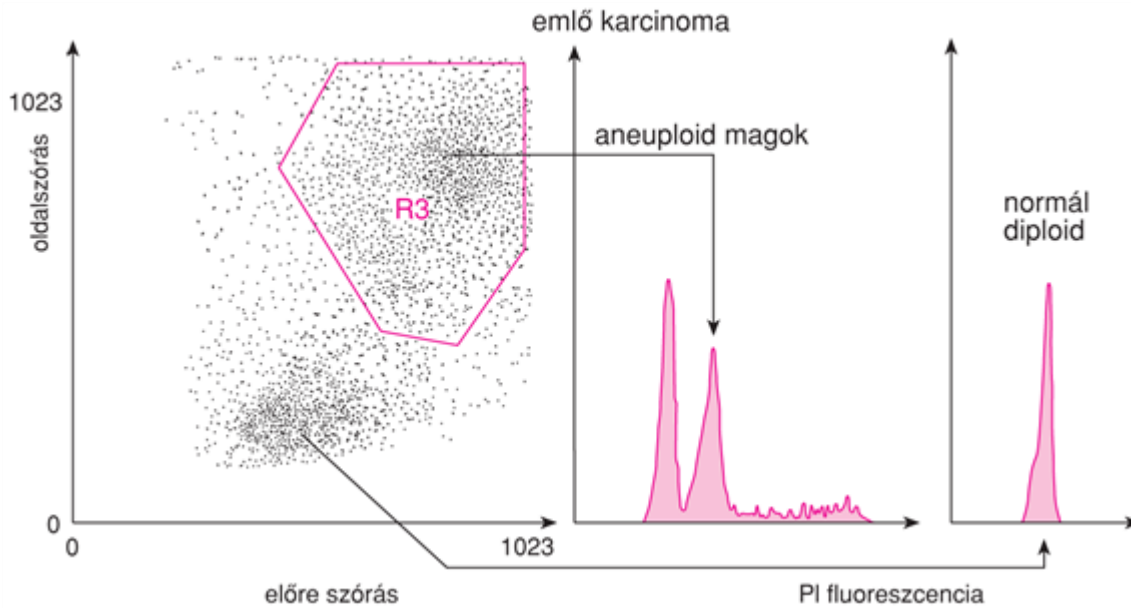
4.4.1. VI/4.4.1. DNS-tartalom-mérés

Az egyik leggyakrabban mért sejt paraméter a sejtek DNS-tartalma, amely nukleinsav-specifikus fluoreszcenciás jelzőkkel követhető. Ilyen festékek például: propidium jodid (PI), Hoechts 33342 és 33258 típusjelű festékek, mithramycin, chromomycin A3 stb. E festékek átjárhatóvá tett sejtek membránján könnyen átjutva nagy affinitással kötődnek a DNS-hez. A kötődés eredményeképpen a fluorofórok fluoreszcenciás kvantumhatásfoka nagymértékben megnövekszik. A bekötött festékek fluoreszcenciaintenzitása a DNS-tartalommal arányos. A nukleinsav-indikátorok egy nagy része az RNS-t is jelöli, ezért precíziós mérések esetén a méréseket RNS-emésztéssel kell kombinálni.

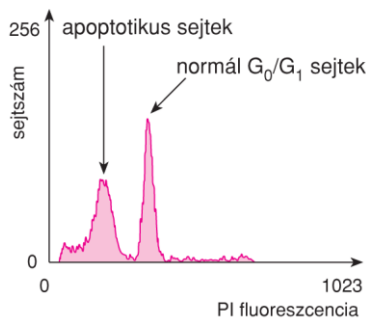
Újabb technikák lehetővé teszik azt is, hogy a paraffinba ágyazott szövetblokkokból egyedi sejtmagokat tartalmazó szuszpenziót készítsenek. Ezáltal a szövettani feldolgozáson átesett – és adott esetben már régóta tárolt – minták is vizsgálhatóvá válnak. Ez óriási perspektívát nyit a diagnosztikában és kutatásban, mert a minták újrvizsgálhatók akkor, amikor már ismert a beteg sorsa, azaz a feltételezett daganatról már biztos információval rendelkezünk. Az ilyen minták sokszor törmelékkel szennyezettek, ezért a fényszóráson alapuló kapuzás nagyon fontos, de a fényszórás jelek már utalhatnak a sejtek daganatos jellegére is. A VI.38. ábrán egy emlőcarcinomából származó minta analízisét látjuk. Látszik, hogy a minta heterogén: tartalmaz egy normál sejtekből álló alpopulációt, valamint egy daganatosat is.

A programozott sejthalál – apoptózis – során a sejtek DNS-tartalma megváltozik. Az áramlási citometria ennek a detektálására is kiválóan használható. A VI.39. ábra egy apoptózisban részes minták analízisének az eredményét mutatja. A csúcsok alatti területek összehasonlítása révén megállapítható az apoptotikus sejtek aránya.

A sejtciklus analízisben igen gyakran használják még az akridin-orange fluoreszcenciás festéket is, amellyel szelektív DNS-RNS jelölést lehet elérni. A festék a kettős-szálú nukleinsavakhoz kötődve zöld színű fluoreszcens fényt, egyszálú nukleinsavakhoz kötődve pedig vörös színű fluoreszcens fényt emittál.



VI.38. ábra. A DNS-tartalom eloszlása paraffinos blokkból szeparált emlőtumor mintában

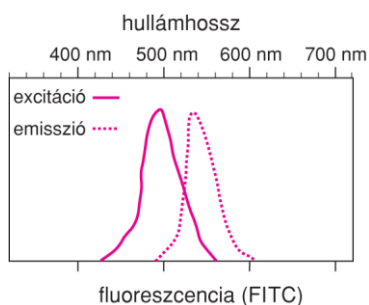


VI.39. ábra. Apoptotikus sejtek DNS-tartalom-eloszlása

4.4.2. VI/4.4.2. Immunofluoreszcencia

A sejtek sok különböző fehérjét fejeznek ki a felszínükön, amelyek a sejt fajtájára és funkcionális állapotára jellemzőek. A sejt felszíni antigének jelenlétének meghatározása, azok mennyiségének mérése, illetve egy adott tulajdonsággal rendelkező sejtpopuláció számosságának, relatív arányának megállapítása nagyon fontos a kutatásban, de a mindennapi klinikai rutin diagnosztikában is. Gondoljunk a leukémiák fenotipizálására, ahol a sejt fajta pontos ismerete döntően befolyásolja a terápiát, és ezen keresztül a beteg sorsát is. A különböző fajtájú T-limfociták előfordulási arányának ismerete az AIDS-diagnosztika nélkülözhetetlen része.

Fluoreszcens festékekkel jelölt monoklonális antitestek lehetőséget adnak a sejt felszíni antigének és receptorok vizsgálatára. Az antitestek nagy affinitással kötődnek a sejt felszíni antigénekhez, ezáltal azok nagyon specifikus megjelenítésére használhatók. Számos esetben a vizsgálat tárgyát képező antigének olyan kis mennyiségben fordulnak elő a sejtek felszínén, hogy azok fluoreszcenciás vizsgálata az alacsony jel/zaj viszony miatt igen nehéz. Ilyen esetekben indirekt immunofluoreszcenciás módszert alkalmaznak, amelynek során a specifikus antigénekhez kötött jelöletlen (első) antitestekhez fluoreszcenciásan jelölt (második), az első antitestre specifikus antitesteket használnak. Ilyen módon a vizsgálatok érzékenysége 3–10-szeresre növelhető. Az antitestek jelölésére leggyakrabban a fluoreszcein-, illetve tetrametil-rodamin-izotiocianátot használják, amely az antitestek lizin-oldalláncaihoz kovalensen kötődik anélkül, hogy az antitestek affinitása számottevő módon csökkenne. Mint az ábrán látható spektrumból is kitűnik, a fluoreszcein jól gerjeszthető 488 nm-en, azaz az argonion lézerekkel felszerelt készülékekben alkalmazható (VI.40. ábra).

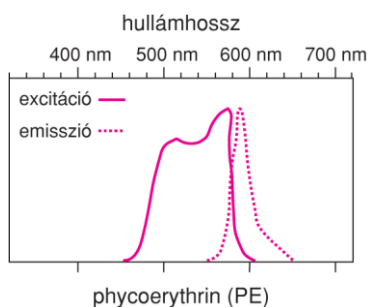


VI.40. ábra. A fluorescein gerjesztési és emissziós színeke

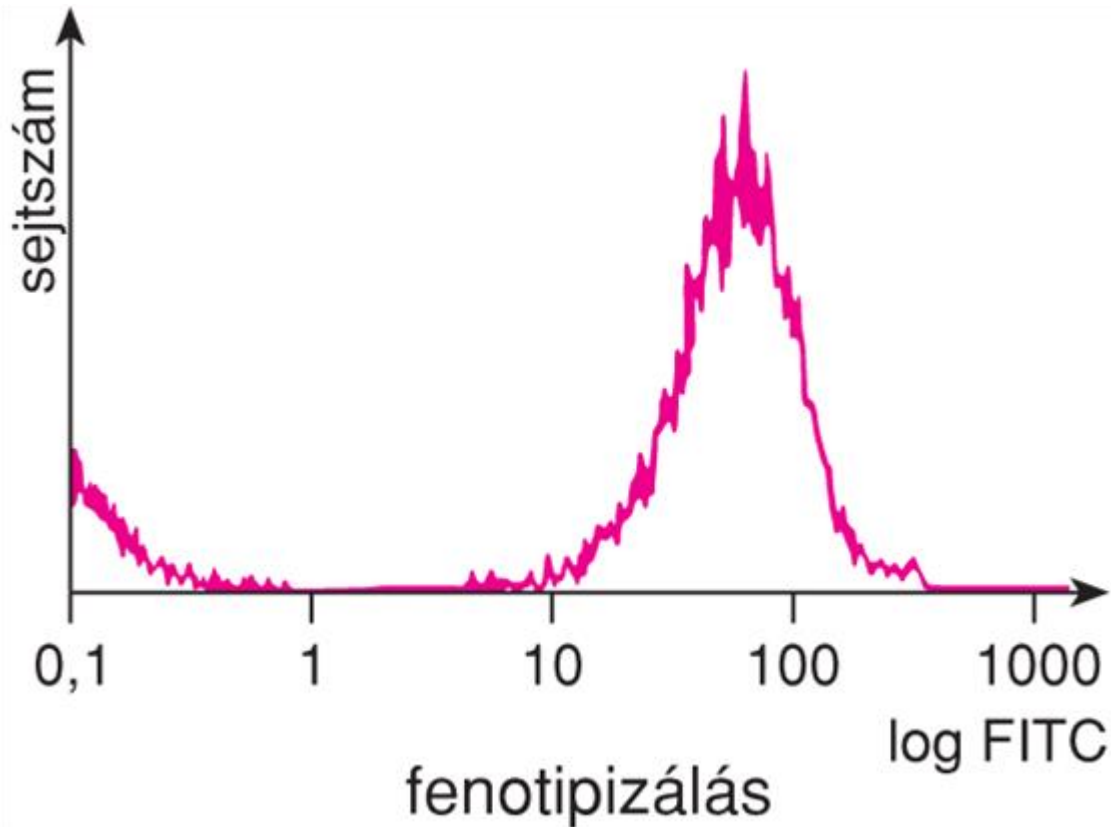
A vörös tartományban is használható új fluoreszcenciás festékek egy nagy családját néhány év óta ismerjük. A fikobiliproteinek cyanobacteriumok és vörös algák fehérjetermékei. A család legfontosabb képviselője a fikoeritrin, amelynek spektruma a VI.41. ábrán látható. Ezen fehérjék molekulatömege 100-200 kDa és moláris extinkciós koefficiensük általában nagyobb mint 1 millió $l/(mol \cdot m)$. A kvantumhatásfok is közelítőleg 1. Mint ahogy az ábrán is látható, a gerjesztési spektrumuk széles, és jelentős Stokes-eltolódással is rendelkeznek.

Számos további festék létezik, amely használható antitestek jelölésére. A VI.3. táblázatban néhány ilyen festék spektrális tulajdonságait foglaltuk össze. Ezek kombinált alkalmazásával egyidejűleg több sejtfelszíni antigén jelenléte tanulmányozható. Természetesen ilyenkor az adatanalízis sokkal komplexebbé válik, hiszen több paraméter egyidejű megjelenítése két dimenzióban nem lehetséges.

Az immunofluoreszcens fenotipizálás során vagy egydimenziós – általában logaritmikus skálázású – eloszlásokat használnak (VI.42 ábra), vagy ha egyidejűleg kettő vagy több antigénre nézve jelölték meg a sejtet, akkor kétdimenziós ábrázolást.



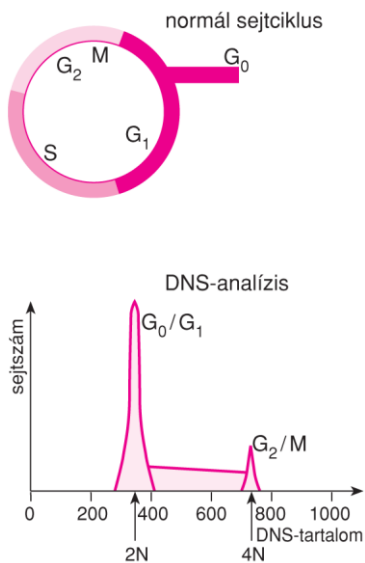
VI.41. ábra. A fikoeritrin gerjesztési és emissziós színeke



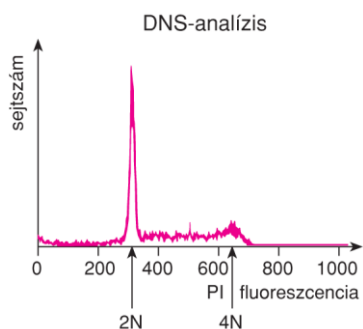
VI.42. ábra. Monoklonális antitesttel jelölt sejt felszíni fehérje fluoreszcencia intenzitás eloszlása

Példa DNS-tartalom mérésére

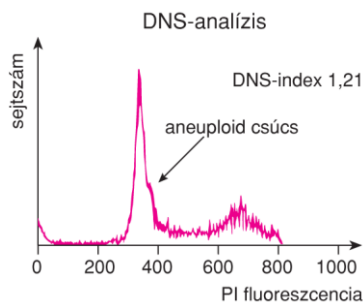
Ismert, hogy a sejtciklus során a sejtek DNS-tartalma változik, és a sejtciklus különböző fázisaiban található sejt hányad jellemzésére a DNS-eloszlás használható fel. Az 1. ábra hipotetikus DNS-eloszlást mutat be, vázlatosan jelezve a sejtciklus egyes részeihez tartozó csúcsokat. A 2. ábra egy propidium-jodiddal festett normál diploid sejt populáció DNS-hisztogramját mutatja, a 3. ábra pedig egy gyorsan növekvő tumorból származó sejtek DNS-eloszlását reprezentálja. A 3. ábra normálistól eltérő DNS-eloszlása a tumor aneuploiditására utal; a hisztogram első csúcsa a 2C DNS-tartalomnak felel meg, a második az aneuploid DNS-tartalomnak (az ún. DNS-index 1,21), a legnagyobb DNS-fluoreszcenciához tartozó csúcs pedig az aneuploid klón G₂/M fázisú sejtjeihez tartozik. A tumorok aneuploiditása sok esetben fontos prognosztikai tényező, illetve hasznos paraméter lehet a terápia követésében is.



1. ábra. A DNS-tartalom eloszlása normális esetben



2. ábra. A DNS-tartalom eloszlása normális sejtmintában



3. ábra. A DNS-tartalom eloszlása tumorosan transzformált sejtpopuláció

6.5. táblázat - VI.3. táblázat. Néhány fehérje jelölésére használt festék spektrális tulajdonsága

festék	gerjesztés (nm)	emisszió (nm)
FITC	488	525
PE	488	575
APC	630	650
PerCPTM	488	680
Cascade Blue	360	450
Coumarin-phalloidin	350	450
Texas Red TM	610	630
Tetrametilrodamin	550	575
CY3	540	575
CY5	640	670

7. fejezet - VII. rész – Elektromos jelek és módszerek az orvosi gyakorlatban

Az élő szervezet működése szempontjából alapvetően fontosak azok az elektromos jelenségek, amelyek az életfolyamatokat kísérik, illetve azoknak szerves részét képezik. Ezek az elektromos jelenségek lehetőséget adnak diagnosztikai célú mérésekre, valamint alapul szolgálhatnak terápiás célú elektromos beavatkozásoknál. Ebben a fejezetben tipikus elektromos jelformákat ismertetünk, amelyek alapján a jelforrás (ingerületi folyamat) tulajdonságai felismerhetők, ill. röviden tárgyaljuk a legalapvetőbb elektromos áramkört elemek funkcióját, működési elvét. A fejezetben ezen kívül ismertetjük a legelterjedtebb, elektromos jelenségeken alapuló diagnosztikai és terápiás módszereket.

1. VII/1. Elektromos jelek feldolgozása

A modern orvosi gyakorlatban használt terápiás és diagnosztikai módszerek elektromos egységeket tartalmaznak, és elektromos jelekké alakítva jelenítik meg az információt. Vannak esetek, amikor a szervezetről származó elektromos jeleket használjuk fel diagnosztikai céllal. Ebben a fejezetben röviden ismertetjük a legalapvetőbb elektromos egységeket, működésük alapelveit, valamint a legfontosabb elektromos jelek tulajdonságait. Természetesen nem lehet célunk a téma kimerítő ismertetése, hiszen az orvosi műszerek építése tervezése egy külön szakterület. Arra törekedtünk, hogy a témakör tárgyalását azokra az alapfogalmakra korlátozzuk, amelyek segítik a kommunikációt, a berendezések üzemeltetését, karbantartását, fejlesztését biztosító kollégákkal és segítőnek eligazodni, ha a használt készülék a várakozástól eltérő jelet szolgáltat.

1.1. VII/1.1. Az orvosi gyakorlatban előforduló jelek osztályozása, feldolgozása

Jelnek nevezünk minden fizikai mennyiséget, ill. annak megváltozását, ami információt közvetít. Az orvosi jelek nagy része nem elektromos jel, például a testhőmérséklet, a pulzusszám (nyomásváltozás), szívhangok stb. Diagnosztikus értékű jel lehet például a gammasugárzás intenzitása is egy izotópdiagnosztikai vizsgálat alkalmával. A nem elektromos jeleket az egyszerűbb feldolgozhatóság érdekében át kell alakítani elektromos jellé. Erre szolgálnak a különféle **érzékelők**, **detektorok**, ill. **jelátalakítók**, **transzducerek**. Van néhány diagnosztikai jel amely nem igényel transzducert, mert elektromos feszültségként egyszerű elektródákkal közvetlenül elvezethető. Ilyen elektromos jelek az EKG (elektrokardiográfia), EEG (elektroencefalográfia), EMG (elektromiográfia) során analizált jelek.

1.1.1. VII/1.1.1. A jelek osztályozása

A jelek többféle szempont szerint osztályozhatók.

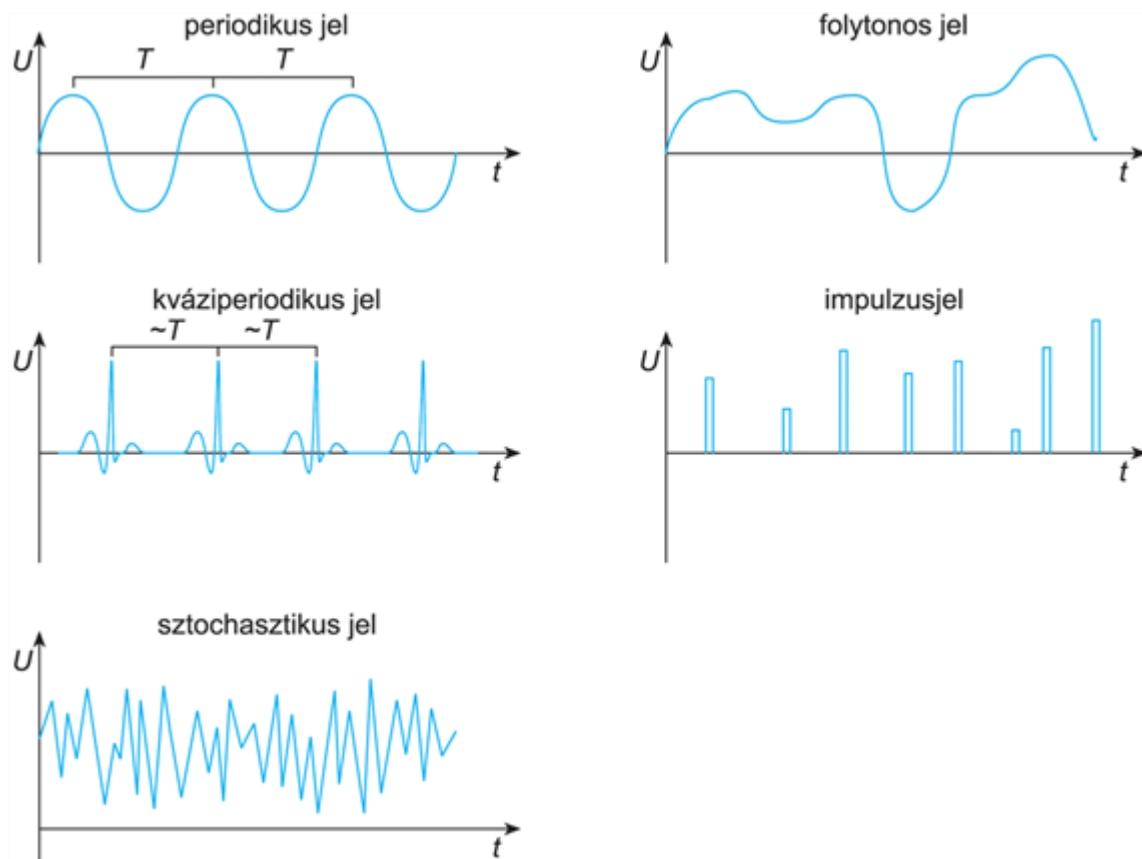
Időbeli ismétlődésük szerint lehetnek **periodikus**, **kváziperiodikus** (majdnem periodikus), **sztochasztikus** (véletlenszerű). Számunkra a legnagyobb jelentőségűek a kváziperiodikus jelek lesznek. Ilyen pl. az EKG jel, ami rövid távon (néhány másodperc) periodikusnak néz ki, de a szívritmus (akár az egészséges napi ciklussal, vagy kóros okkal összefüggő) változása hosszútávon (több óra vagy nap alatt) már nem szigorúan periodikus lefolyású jel. A periodicitást megtörhetik a szív ritmuszavaraira utaló impulzusok is (pl. extrasystole). A teljesen periodikus jel nagyon ritkán fordul elő, hiszen ez tulajdonképpen alig hordoz információt. Sztochasztikus jelek például az izotópdiagnosztikai vizsgálat közben detektált gamma fotonok. Ezek a fotonok véletlenszerűek abból a szempontból, hogy két gammafoton beérkezése közti időnek csak a valószínűségi eloszlását tudjuk megadni. Az információt ebben az esetben egy hosszabb idő alatt detektált fotonszám szolgáltatja.

Az információt hordozó **fizikai mennyiség változása szerint** megkülönböztetünk: **analóg és digitális jeleket**. A jelek nagy része analóg, azaz egy fizikai paraméter folytonosan változik az időben, tehát egy jellemző tartományon belül bármilyen értéket felvehet. A digitális jelek (ezek szinte kivétel nélkül elektromos jelek) alapvető jellemzője, hogy csak bizonyos tartományok (általában feszültségtartományok) vannak megengedve. Ezeket a tartományokat tiltott intervallumok választják el egymástól, ahol a jel értelmezése kérdéses. A legegyszerűbb esetben két feszültségtartomány van megengedve, az egyik a 0 V közelében. Ennek megfelelően egy feszültség két értéket kódolhat, amelyeket 0-val és 1-gyel szokás jelölni. Ily módon az egy feszültségjellel továbbítható információ elég korlátozott. Nagyobb mennyiségű gyors adattovábbítás több feszültség egyidejű változtatásával történhet, amelyek párhuzamos vezetékeken futnak.

A tiltott feszültségtartományok miatt a digitális jelek érzékenysége a zavaró hatásokra nagyon kicsi. Ezért például, a digitális CD-felvétel sokadik másolata is ugyanolyan jó minőségű mint az eredeti. Ezzel szemben a hagyományos magnetofonszalaggal készített másolat esetén már néhány másolás után észrevehető minőségromlás következik be. A digitális adatfeldolgozásnak az egyik nagy előnye, hogy a már digitalizált jel a „szállítás” és további feldolgozás során gyakorlatilag nem lesz zajosabb.

Az analóg jelek lehetnek **folytonos**, vagy **impulzusjelek**. Impulzusjeleknek nevezzük azokat a jeleket, ahol az információt az időnként bekövetkező, gyors lefolyású változások szolgáltatják, ami után visszaáll az alapállapot. Elektromos jelek közül ilyen például a szcintillációs számlálófej jele. Nem elektromos példa lehetne a köhögés, vagy csuklás.

A jelekről szóló fejezet végén meg kell említeni a jeleket általában kísérő zavaró jelenséget, a zajt. Zajnak nevezzük a mért (a jelinformációt szolgáltató) fizikai paraméternek olyan változásait, amelyek nem az általunk követni szándékozott jelenségből erednek, tehát számunkra nem hordoznak információt. Ettől még ez a zaj valamilyen más szempontból akár jel is lehet, bár nem ez a tipikus eset. Például a beteg köhögése megzavarhatja a pulzusának érzékelését, itt a köhögés zaj, de amikor a tüdejét hallgatjuk, akkor ez lehet a jel, amire kíváncsiak vagyunk.

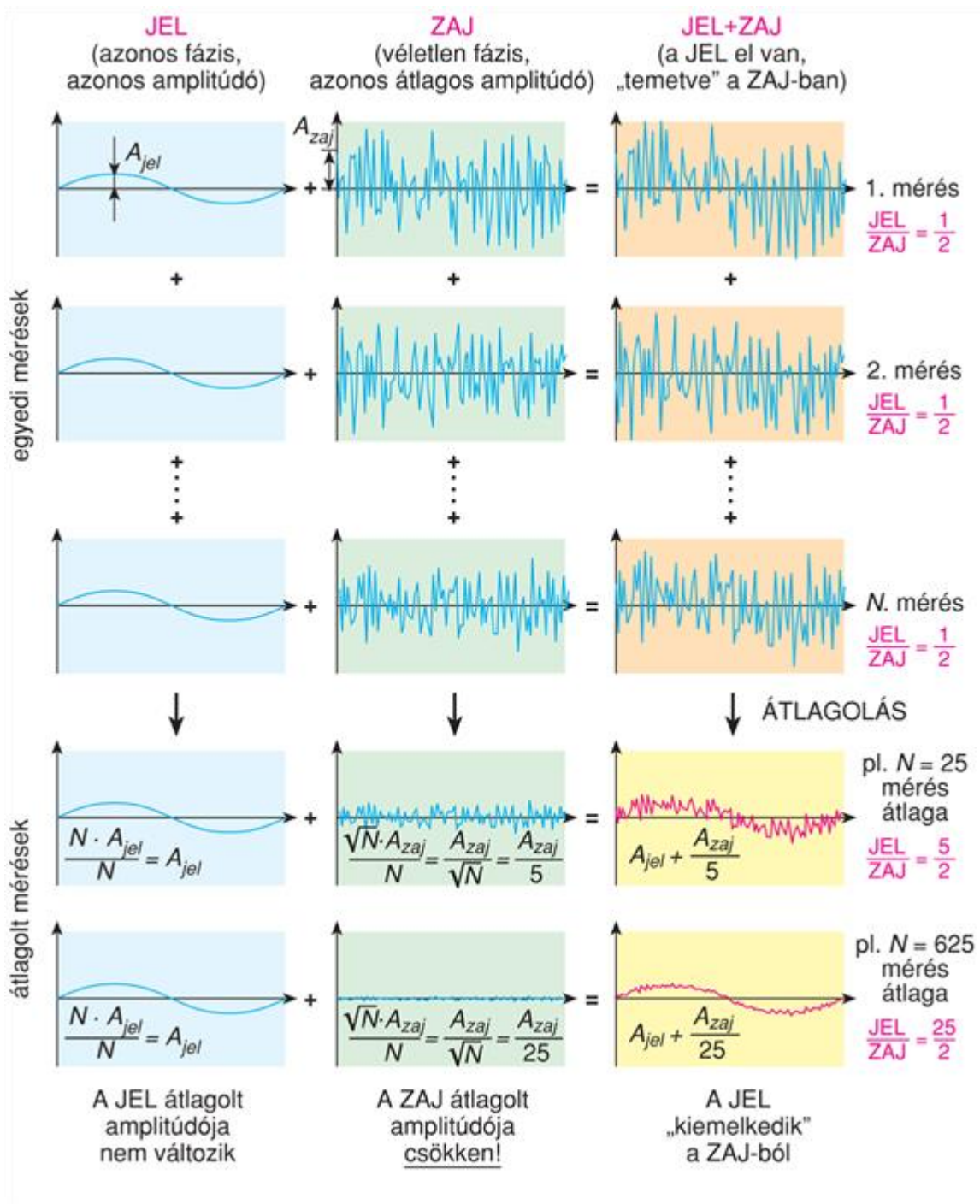


VII.1. ábra. Különböző jelalakok

1.1.2. VII/1.1.2. A zaj csökkentése átlagolással

A VII.2. ábrán mutatjuk be a jelátlagolás zajcsökkentő tulajdonságát. A kiváltott potenciált egy tiszta szinuszos jel (JEL) modellezi, amely mindig azonos fázisban indul. Ehhez a jelhez egy 2-szeres átlagos amplitúdójú zajt (ZAJ) adunk hozzá, és így egy a „zajban eltemetett” jelet (JEL+ZAJ) generálunk.

Ezután matematikai úton $N=25$, ill. $N=625$ db mintát átlagolunk. Az egyedi mérések jól mutatják, hogy a szinuszos jelek nem ismerhetők fel a nagyobb zaj jelenléte miatt. Néhány mérés átlagolásánál ($N=25$) már észrevehető, hogy a zaj átlagos amplitúdója csökken, míg az azonos fázisban jelentkező jelé állandó marad. A mérések számának drasztikus növelésével ($N=625$) a jel/zaj viszony jelentősen javul ($\sqrt{625} = 25$ -szöröse). A szinuszos jel szinte kinő a zajból, és az átlagolt kiváltott potenciál kiértékelhetővé válik. A jel/zaj viszony az átlagolt mérések számának négyzetgyökével arányosan növekszik.



VII.2. ábra. A kiváltott potenciálok átlagolása jelentős jel/zaj arány javulást eredményezhet

1.1.3. VII/1.1.3. Jelek Fourier-felbontása

A feldolgozandó jelek időbeli lefutása nagyon sokféle lehet. A jelfeldolgozásra használt berendezéseknek mindegyik jelformát torzításmentesen kell feldolgozni. Minden lehetséges jelre nem tudunk felkészülni, de segítségünkre van a **Fourier-tétel**. A Fourier-tétel szerint bármilyen jel felbontható szinuszosan változó jelek összegére. Ezt megfordítva azt mondhatjuk, hogy bármilyen jel összerakható szinuszos komponensekből. Periodikus jelek esetén a szinusz-komponensek frekvenciái a jel frekvenciájának egész számú többszörösei (felharmonikusok lásd IV. fejezet).

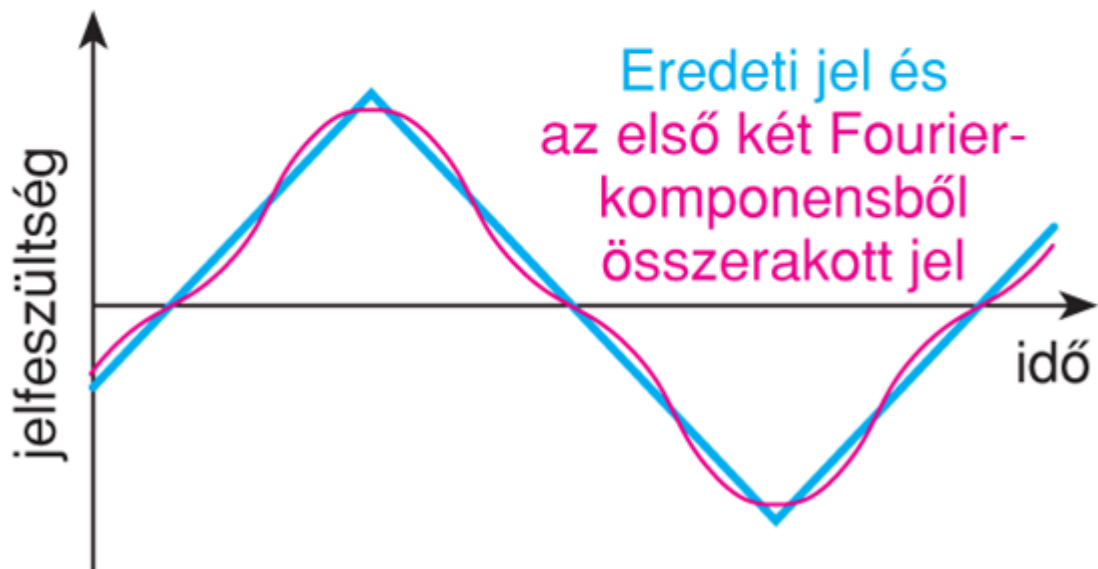
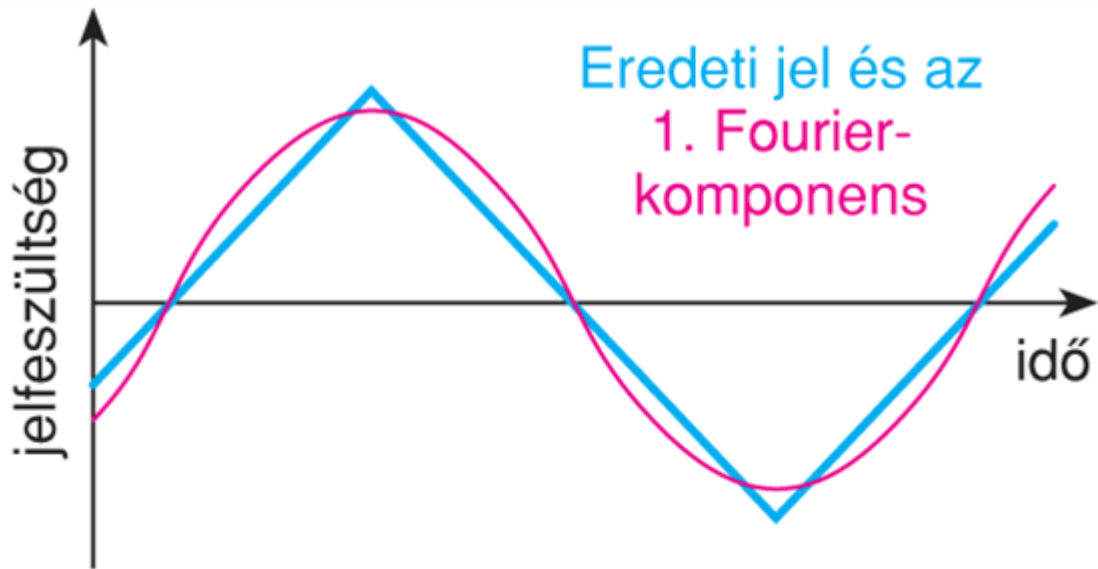
Hogy a szinuszjelek összegéből a kívánt jelalak álljon elő, az szükséges, hogy a szinuszok amplitúdóit megfelelően válasszuk meg. Előfordulhat, hogy egy jel teljesen hű visszaadásához végtelen számú szinuszkomponenst kellene felhasználni. A gyakorlatban azonban mindig köthetünk kompromisszumot, nincs

mindegyikre szükség a jel kielégítő előállítása érdekében. Ezt egy példával világítjuk meg. Az VII.3. ábra mutatja, hogy a háromszög alakú jelet elég jól megközelíthetjük már néhány szinusz (felharmonikus) összegével is, míg a gyors változást (R-hullám) tartalmazó EKG jel tökéletes visszaadásához még 64 komponens sem elég, ehhez akár száznál több felharmonikusra is szükség van. Ez logikus, ha arra gondolunk, hogy az R hullám csúcsának éles fordulójához olyan komponensre van szükség, amely ugyanilyen éles csúcsot tartalmaz. Az ilyen szinuszfüggvény frekvenciája sokszorosa az EKG-jel alap frekvenciájának. A gyakorlatban tehát minden jelhez hozzá lehet rendelni egy olyan véges frekvenciatartományt amelybe beletartozó komponensekből elég pontosan össze lehet állítani az eredeti jelet. Ilyen tipikus tartományokat mutat a VII.4. ábra.

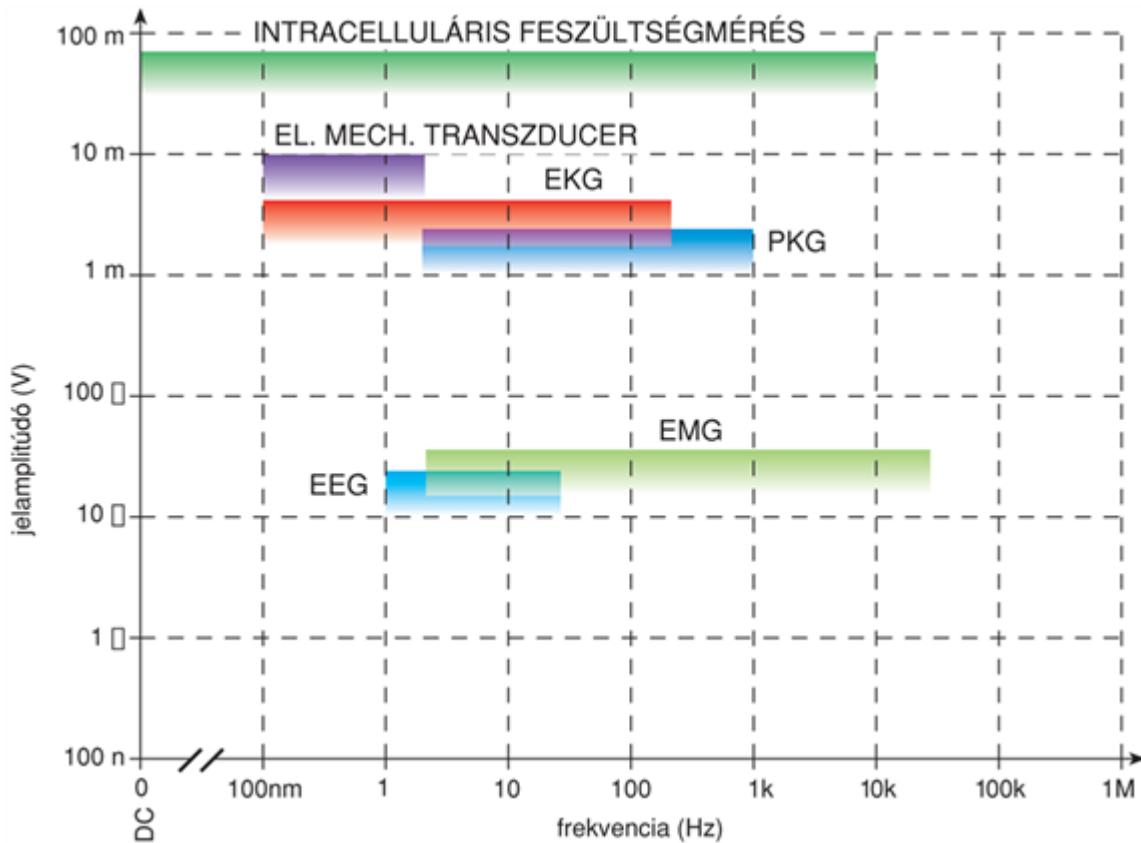
Az előző bekezdésben elmondottaknak két fontos következménye van:

1. A Fourier-felbontás szabálya miatt nem kell tetszőleges alakú jel szempontjából megvizsgálni a jelfeldolgozó berendezésünket, hanem elég lesz azt megnézni, hogy a szinuszjeleket hogyan továbbítja.
2. Ha ismerjük a feldolgozandó jel frekvenciatartományát, akkor a jelfeldolgozó láncnak, csak az ebbe a tartományba eső szinuszjeleket kell torzításmentesen továbbítani ahhoz, hogy a jel alakja ne torzuljon a feldolgozás során.

A jelfeldolgozó lánc elemeinek tárgyalásakor csak a szinuszjelek átvitelét tárgyaljuk, hiszen ezekből bármilyen más jel előállítható.



VII.3. ábra. Háromszögjel a) és EKG-jel b) előállításának szinuszjelek összegéből



VII.4. ábra. Orvosi jelek tipikus frekvenciatartományai

1.1.4. VII/1.1.4. Orvosi jelfeldolgozó lánc elvi felépítése

Amint már említettük, az orvost érdeklő jelek általában nem elektromos formában keletkeznek. Ezeket átalakítás, jelformálás után lehet feldolgozni. A hagyományos és a modern digitális jelfeldolgozó lánc blokkvázlatát mutatja a VII.5. ábra.

Amint az a diagramból is kiderül, a jelfeldolgozás első lépései azonosak mindkét típusú feldolgozó lánc esetén. A jel általában nem elektromos feszültség, hanem valamilyen más fizikai mennyiség változását jelenti (pl. vérnyomás, testhőmérséklet, szívhang, visszavert ultrahang, gammafoton jelenléte stb.). Ezt át kell alakítani elektromos feszültséggé, amit a detektor, vagy más néven transzducer (átalakító) végez. A detektor a lánc egyetlen specifikus eleme, azaz minden mérendő jelhez más típusú detektor szükséges. Detektorra példa lehet a piezoelektromos kristály, amely a nyomásváltozást alakítja át feszültséggé, így nyomást, hangot, ultrahangot lehet elektromos jellé alakítani. A szcintillációs kristályból és fotoelektron-sokszorozóból álló szcintillációs mérőfej a gamma-foton meglétét alakítja elektromos impulzussá. Egyes speciális esetekben már a jel maga elektromos (pl. EKG, EMG), ekkor a detektor helyett egyszerűen (a páciensre helyezett) elektródák vezetnek el az elektromos jeleket.

A detektor által szolgáltatott jel általában nagyon gyenge, ezért a feldolgozás előtt fel kell erősíteni. A felerősített jelhez képest a további feldolgozás során keletkező zajok már kisebbek, azaz a jel/zaj viszony a feldolgozás során jobb lesz. Természetesen azokat a zajokat, amelyek már az erősítendő jelben is ott voltak, az erősítő ugyanúgy felerősíti, mint a hasznos jelet, tehát az erősítő nem növeli a jel/zaj viszonyt, csak a jelet a további feldolgozás számára teszi zavarérzékletlenebbé. Az erősítő éppen a zajok minimalizálása érdekében sokszor egybe van építve a detektorral, így a detektort az erősítővel összekötő vezetékek nagyon rövidnek, így nem indukálódik bennük jelentős zaj. Az erősítővel a későbbiekben még részletesen foglalkozunk.

Esetenként a jelek formálására vagy szétválasztására is szükség van. A jelformáló lehet egy zajszűrő, amelyik az EKG-jelre ráakodott hálózati 50 Hz-es zavarjelet csökkenti. Impulzusjelek esetén inkább a jelszelektálás jellemző. Az impulzusokat az amplitúdójuk alapján szelektáljuk, a legegyszerűbb esetben csak azokat az

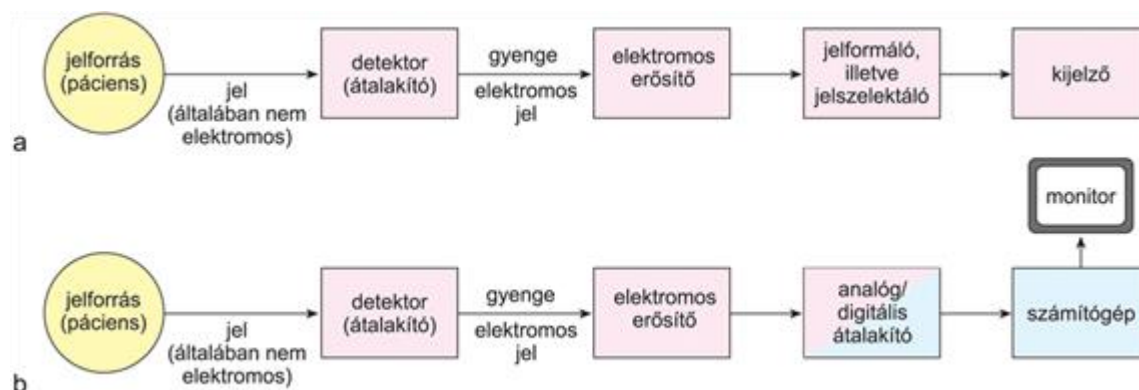
impulzusokat vezetjük tovább, amelyek egy adott szintet elérnek, mert a zavarimpulzusok gyakran kis amplitúdójúak. Ilyen feladatot lát el (kissé bonyolultabban) az integrál-diszkriminátor. A differenciáldiszkriminátorral viszont egy bizonyos feszültségtartományba (csatornába) eső impulzusokat választhatunk ki (lásd VII/1.4.3.).

Az analóg jelfeldolgozó lánc utolsó eleme a kijelző. Ez lehet egy mutatós műszer, vagy egy mechanikus író, ami az EKG-jelet papírra rögzíti, vagy egy oszcilloszkóp, amely ugyanezt a jelet a képernyőn rajzolja ki. Impulzusjelek esetén az impulzusszám, ill. az impulzusok gyakorisága ad információt, ezért kijelzőként egy digitális számláló számkijelzője található.

Digitális jelfeldolgozás esetén nincs szükség jelformálásra, mindenfajta manipuláció már a digitalizált jelen történik. Ezért a jelformálás helyett az analóg jel digitálissá való átalakítása az erősítést követő lépés. Az analóg-digitális átalakító bemenetére érkező feszültségből az A/D átalakító bizonyos időközönként mintát vesz, és ennek a feszültségnek megfelelő digitális jelet állít elő. A digitalizálásról és a mintavételezésről még később részletesen szólnunk.

A digitális jelek további feldolgozása és tárolása számítógéppel történik. A számítógépek hardverének és szoftvereinek fejlődése olyan rohamos, hogy egy ilyen könyv nem tudja ezt a változást naprakészen követni, ezért ezek részleteivel nem foglalkozunk.

A digitális feldolgozás előnye, hogy a digitalizált jelet könnyen lehet tárolni, ami az ismételt feldolgozást lehetővé teszi. Például a zajosan felvett EKG- jeltől később is meg lehet kísérelni a zaj kiszűrését. A megjelenítés paraméterei is változtathatók, így ugyanazokból a mérési adatokból különböző információ tehető láthatóvá (l. pl. ablakozás a CT-nél VIII/4.3.). A digitalizálás természetesen információvesztéssel is járhat, mivel a digitalizáláskor a feszültséget egy bizonyos számú kategóriába soroljuk, ezért a digitalizálás felbontóképessége véges. Ugyancsak adatvesztéshez vezethet, ha a mintavételezés sebessége nem megfelelő.



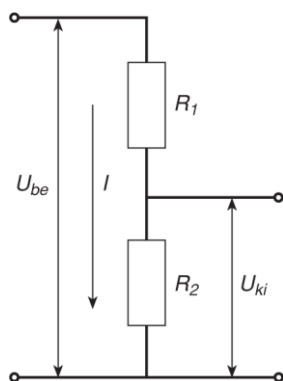
VII.5. ábra. Orvosi jelfeldolgozó lánc blokkvázlata a) hagyományos, b) digitális jelfeldolgozó lánc

1.2. VII/1.2. Analóg elektromos alapáramkörök

1.2.1. VII/1.2.1. Feszültségosztó

A legegyszerűbb alapáramkör a két sorosan kapcsolt ellenállásból felépülő feszültségosztó (lásd keretes rész). Az ellenállások aránya határozza meg, hogy a bemenő feszültségnek mekkora hányada jelenik meg a kimenő kapcsokon. Ilyen áramkört leginkább a méréshatár váltására használnak. Általában minden méréshatárhoz tartozik egy feszültségosztó, ami az adott méréshatárba eső feszültséget osztja le a következő fokozat (pl. egy digitalizáló áramkör) által elfogadható feszültségtartományba.

Feszültségosztó

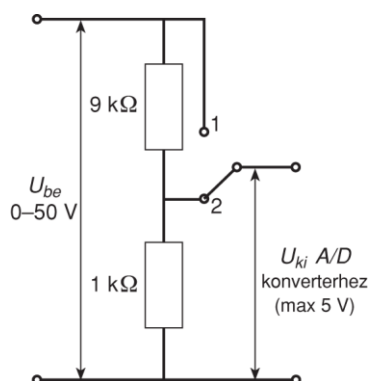


A bemeneti kapcsokra adott U_{be} feszültség az ellenállásokon
következtében az $I = \frac{U_{be}}{R_1 + R_2}$ áramot generál, aminek
a R_2 ellenálláson

$$U_{ki} = U_{be} \frac{R_2}{R_1 + R_2}$$

feszültség esik. A feszültségosztó tehát a bemenőfeszültséget $\frac{R_2}{R_1 + R_2}$ aránynak megfelelően csökkenti. Ez természetesen szigorúan csak akkor igaz, ha a kimenetet nem terheli semmilyen ellenállás. A gyakorlatban, ha a kimenetre csatlakozó áramkör bemenő ellenállása sokkal nagyobb, mint R_2 , akkor a fenti egyenletek jó közelítéssel érvényesek lesznek. Ellenkező esetben R_2 helyére R_2 és a következő áramkör bemenő ellenállásának párhuzamos eredőjét kell beírni.

Alkalmazási példa:



Az analóg-digitális konverter maximum 5 V-os feszültséget tud digitalizálni. Ha a bemenő jelünk a 0-50 V tartományba esik, le kell „osztanunk” 1/10 részére, hogy az A/D konverterre vezethessük. Ha élni akarunk azzal a lehetőséggel, hogy az 5V-nál kisebb jeleket a konverter eredeti érzékenységét felhasználva digitalizáljuk, ezt az ábrán látható kapcsoló (1-es állásba való át-) kapcsolásával tehetjük meg. Tehát az 1-es állásban a bemenő feszültség 0-5 V lehet, a 2-es állásban 0-50 V-os a mérés határ.

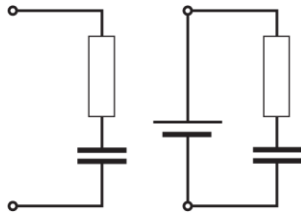
1.2.2. VII/1.2.2. RC-körök egyenáramú áramkörben

Ha az RC-kört egyenfeszültségre kapcsoljuk, akkor a körben nem folyik áram. Ezért az ellenálláson sem esik feszültség, vagyis az egész bemenő feszültség a kondenzátorra jut. Ez az „egyensúlyi állapot” azonban csak a bekapcsolás után elég hosszú idő elteltével áll be. Közvetlenül a bemenő egyenfeszültség bekapcsolása után úgynevezett „tranzienst” (átmeneti) jelenségek zajlanak le. Érdekes ezeket is röviden áttekinteni, hiszen a biológiai objektumok által mutatott egyes elektromos jelenségek értelmezésénél fel lehet használni az RC-köröket a folyamatok modellezésére.

Soros RC-kör feltöltése

A VII.6. ábrán egy soros RC-kört látunk. Alapállapotban a kondenzátoron töltetlen, feszültsége nulla. Az RC-kör feltöltéséhez kapcsoljunk a bemenetre egy U_T telepfeszültséget! (VII.6b ábra) Az áramkörre felírhatjuk Kirchhoff II. törvényét, azaz

$$U_T = U_R + U_C \quad (\text{VII.1})$$



VII.6. ábra. Soros RC-kör és feltöltése

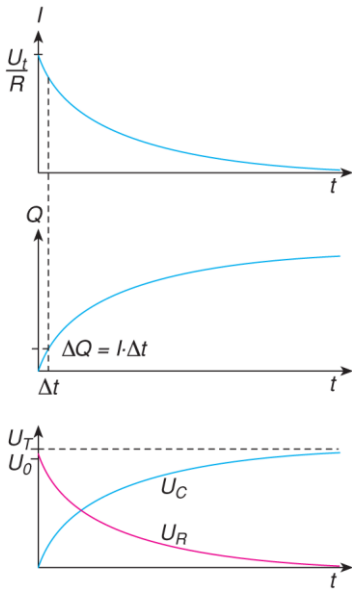
Mivel a kondenzátor kezdetben töltetlen, ekkor a feszültsége is nulla $U_{C_0}=0$, az egész U_T feszültség az ellenállásra esik $U_{R_0} = U_T$. Ez csak akkor lehet, ha az ellenálláson $I_0 = U_T/R$ áram folyik. Az első pillanatban: $I_0 = U_{R_0}/R$. Az ellenálláson átfolyó áram tölti a kondenzátort. Δt idő alatt $\Delta Q = I\Delta t$ töltés jelenik meg a kondenzátoron. A töltéssel egyenesen arányosan növekszik a kondenzátor feszültsége. (Emlékezzünk a kapacitás definíciójára a középiskolás tanulmányainkból: $C = Q/U_C$.) Ennek következtében az ellenállásra már csak kisebb feszültség jut., így csökken az áram. Az áram csökkenése azt jelenti, hogy a kondenzátor lassabban töltődik. Ez így folytatódik tovább, tehát a kondenzátor egyre lassuló sebességgel töltődik. Megmutatható, hogy a kondenzátor feszültsége aszimptotikusan közelíti az U_T telepfeszültséget. Egyidejűleg az áram és az ellenálláson eső feszültsége aszimptotikusan közelíti a nullát (VII.7 ábra).

Nézzük mindezt kvantitatív módon! A telep feszültsége állandó, Kirchhoff II. törvénye szerint bármely t időpontban $U_T = U_R(t) + U_C(t)$. Δt idővel a telepfeszültség rákapcsolása után a kondenzátor feszültsége $U_C(\Delta t) = \Delta Q/C = I\Delta t/C$. Ezért az ellenálláson $U_R(\Delta t) = U_T - I\Delta t/C$ feszültség marad, aminek következtében a kondenzátort töltő áram: $I(\Delta t) = U_R(\Delta t)/R = U_T/R - I\Delta t/RC = I_0 - I\Delta t/RC$.

Látható, hogy az áram megváltozása: $\Delta I = -I\Delta t/RC$. Már találkoztunk hasonló differenciálegyenletekkel, ahol egy fizikai mennyiség változása arányos volt saját nagyságával. (lásd sugáryengülés törvénye II/1.1.3., bomlástörvény II/3.2.2.) Ezeknek a differenciálegyenleteknek a megoldása mindig egy exponenciális függvény. Azt is megfigyelhettük, hogy az exponenciális kitevőjében a differenciálegyenletben szereplő arányossági tényező jelenik meg. Esetünkben ez a $-1/RC$. A megoldás tehát: $I(t) = I_0 e^{-t/RC}$. Az ellenálláson és a kondenzátoron eső feszültségek:

$$U_R = RI + U_T e^{-\frac{t}{RC}}. \quad U_C = U_T - U_R = U_T(1 - e^{-\frac{t}{RC}}) \quad (\text{VII.2})$$

Ezeket a függvényeket mutatja a VII.7. ábra.



VII.7. ábra. Soros RC-kör feltöltődését jellemző elektromos mennyiségek időbeli változása

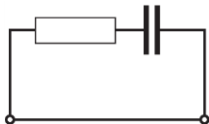
Soros RC-kör kisülése

A már feltöltött RC-kört kisüthetjük, ha telep helyett a bemeneti kapcsokat rövidre zárjuk (VII.8. ábra). Ekkor a kondenzátor viselkedik feszültségforrásként. Legyen a feltöltött kondenzátor feszültsége U_0 ! A Kirchhoff-törvény most $U_R + U_C = 0$ alakba írható. A kondenzátorra és az ellenállásra tehát ugyanakkora nagyságú, de ellentétes előjelű feszültség jut. A kialakuló áram erőssége, azaz a kondenzátor kisülésének sebessége, arányos az ellenálláson eső feszültséggel, vagyis lényegében a kondenzátorfeszültséggel. Tehát minél kisebb lesz a kondenzátor feszültsége, annál lassabban sül ki. Ez megint exponenciális függvényt sejtet. Matematikailag: $I = U_R/R = -U_C/R$, $U_C = Q/C$. Kezdetben legyen a kondenzátor töltése Q_0 . Δt idő múlva a kialakult áram a kondenzátor töltését ΔQ -val megváltoztatta $\Delta Q = I\Delta t$, azaz $Q = Q_0 + I\Delta t$. (Valójában a kondenzátor töltése csökken, ez azonban az I előjelében van elrejtve. I negatív, ugyanúgy mint az U_R). Ezt behelyettesítve I képletébe:

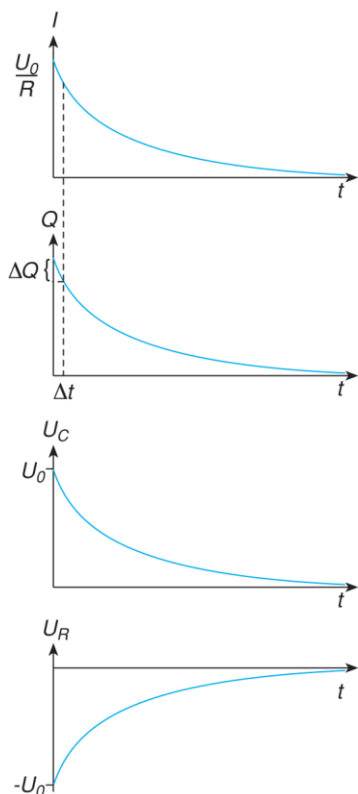
$$I = -\frac{U_C}{R} = -\frac{Q}{RC} = \frac{-Q_0 - I\Delta t}{RC} = -\frac{Q_0}{RC} - \frac{I\Delta t}{RC}$$

(VII.3)

megint azt kaptuk, hogy az áram változása: $\Delta I = -I\Delta t/RC$. A feltöltődésnél elmondottak alapján: $I(t) = I_0 e^{-t/RC}$. Ebből a kondenzátoron, ill. az ellenálláson eső feszültségek: $U_R = RI = U_0 e^{-t/RC}$. $U_C = -U_0 e^{-t/RC}$. (VII.9b ábra).



VII.8. ábra. Soros RC-kör kisülése



VII.9. ábra. Soros RC-kör kisülését jellemző elektromos mennyiségek időbeli változása

Párhuzamos RC-körök.

Ha egy kondenzátort és egy ellenállást egymással párhuzamosan kapcsolunk, akkor ún. párhuzamos RC-kört kapunk (VII.10. ábra). Ilyen áramkörrel modellezhető például a bőr elektromos szempontból, hiszen a bőrre helyezett elektróda és a bőr alatti izomszövetek jó vezetők, amelyek egy majdnem szigetelőt zárnak közre. Ez alkotja a kondenzátort, az ellenállásra pedig a bőr nem tökéletes szigetelő volta miatt van szükség a modellben. Hasonló tulajdonságúak a membránok is, melyek két oldalán kialakuló töltésrétegek a feltöltött kondenzátorra emlékeztetnek, a membránon keresztüli aktív vagy passzív transzporttal átjutott töltések árama pedig a kondenzátorral párhuzamos vezetőképesség (ellenállás) meglétére utal.

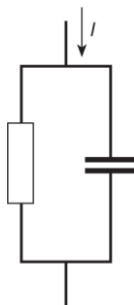
A párhuzamos RC-körre áramot kapcsolva a kondenzátor felöltődik. A jelenség hasonló a soros RC-körben lezajló folyamathoz. Most azonban nem feszültséggenerátort, hanem áramgenerátort kapcsolunk a körre. Az áramgenerátor kapcsain folyó áramerősség állandó, vagyis nem függ a rákapcsolt terhelőáramtól. Így előállított áramimpulzusokat használnak membránok elektromos tulajdonságainak vizsgálatánál is.

Legyen most is kezdetben a kondenzátor kisütött állapotban! Ha áramot kapcsolunk a rendszerre, ez megoszlik az ellenállás és a kondenzátor ágak között: $I = I_R + I_C$. Minden pillanatban igaz, hogy a kondenzátoron és az ellenálláson eső feszültségek megegyeznek: $U_R = U_C$. Az első pillanatban $U_{C_0} = 0$, tehát U_{R_0} is nulla. Ebből következik, hogy $I_{R_0} = U_{R_0}/R$ is nulla, tehát az első pillanatban minden áram a kondenzátor ágában fog folyni. Ez az áram tölti a kondenzátort. Ha növekszik a kondenzátor feszültsége, ezzel párhuzamosan az ellenálláson eső feszültség is növekszik. Az Ohm-törvény szerint az ellenállás ágában nő az áram, vagyis egyre kevesebb áram jut a kondenzátor töltésére, ezért a kondenzátor töltődése lassul. Ennek következtében a kondenzátor töltőárama aszimptotikusan közelíti a nullát, míg a feszültség beáll egy egyensúlyi értékre. Nézzük, mindezt a képletek nyelvén! A bekapcsolást követő Δt idő múlva a kondenzátoron $\Delta Q = I_C \Delta t$ töltés lesz, feszültsége $\Delta U_C = \Delta Q/C = I_C \Delta t/C$. Az ellenállás ágában folyó áram: $I_R = U_R/R$. Mivel $U_C = U_R$ azt kapjuk, hogy $I_R = I_C \Delta t/RC$, vagyis $I_C = I - I_C \Delta t/RC$. Vegyük észre, hogy I állandó, ezért I_C megváltozása: $\Delta I_C = -I_C \Delta t/RC$. Megint azt kaptuk, hogy az I_C megváltozása magával I_C -vel arányos, aminek a már megszokott exponenciális megoldása van:

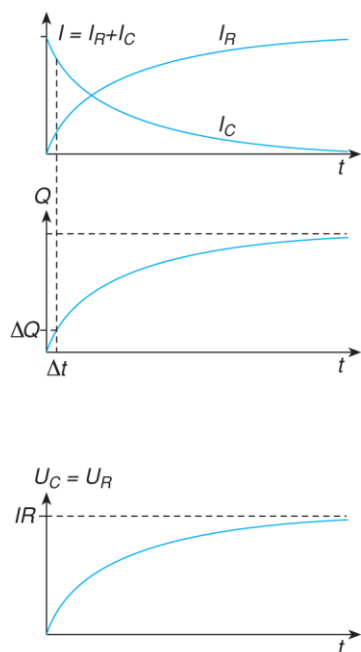
$I_C = I e^{-t/RC}$. Az ellenálláson és a kondenzátoron (azaz tulajdonképpen az RC-körön) eső feszültség:

$U_R = R(I - I_C) = RI(1 - e^{-t/RC})$. A VII.11. ábra mutatja a feszültségek és az áramerősségek időbeli lefutását.

Párhuzamos RC-kör kisütése. Ha a párhuzamos RC-kört magára hagyjuk, spontán módon kisül. Ilyenkor az áramkör megegyezik a soros RC-kör kisülésekor tárgyalttal. A kisülési folyamat is teljesen ugyanaz, ezért most nem tárgyaljuk újra.



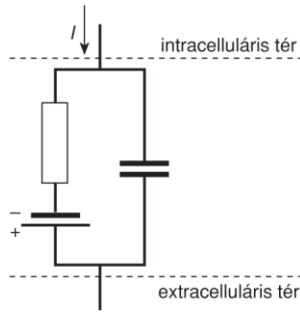
VII.10. ábra. Párhuzamos RC-kör



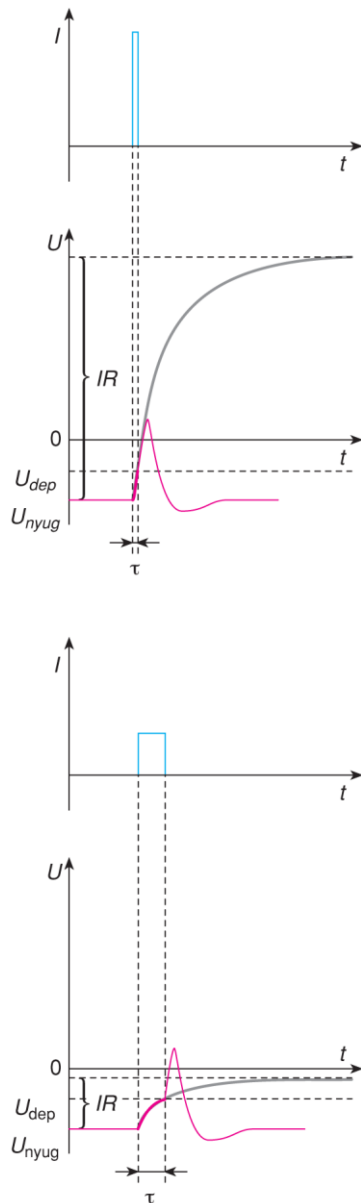
VII.11. ábra Párhuzamos RC-kör feltöltődése

Sejtmembrán mint RC-kör

Már említettük, hogy elektromos szempontból a sejtmembrán is RC-körrel modellezhető. Mindaddig, amíg az akciós potenciál ki nem alakul, ez a modell jól le is írja a jelenségeket. A depolarizációs küszöb (U_{dep}) elérése után, az akciós potenciál impulzus ideje alatt kinyíló feszültségfüggő membrán ionsatornák vezetőképessége azonban nem modellezhető egyszerű ellenállással, hiszen itt olyan bonyolult és külső energiát is igénylő folyamatok zajlanak le, amelyek nemlineáris áram-feszültség függést eredményeznek. Amíg ezt a küszöböt el nem érjük a membránfeszültség változását leírhatjuk egy módosított RC körrel. (lásd kábelmodell, III/4.3.2. rész), ahol egy beépített feszültségforrás (U) biztosítja alapállapotban a nyugalmi potenciálnak megfelelő feszültséget az RC kör sarkain. (1. ábra). Bár az ingerületi folyamatok leírásánál általában az akciós potenciál során lezajló folyamatokra koncentrálnak, szeretnénk rámutatni, hogy az ingerületi folyamat kezdetén lezajló jelenségeknek meghatározó szerepük van abból a szempontból, hogy létrejön-e a tovaterjedő akciós potenciál vagy a membránpotenciál változása megmarad helyi szinten. Elektromos árammal való ingerlés esetén egyszerűen arról van szó, hogy ha az RC-kör feltöltődése elér egy bizonyos értéket, ami a depolarizációs küszöbfeszültségnek felel meg, akkor kialakul az akciós potenciál. Ha a feltöltődés nem éri el ezt a szintet, akkor nem alakul ki akciós potenciál. A 2. ábra mutatja, hogy a gerjesztő impulzusnak vagy rövidnek és nagy áramerősségűnek kell lenni, vagy ha az áram kicsi, akkor tovább kell várni a küszöbérték eléréshez. Tulajdonképpen ez a fizikai alapja az ingerkarakterisztika görbének. A küszöbáram biztosítja hogy az ellenálláson eső feszültség $U_{dep} - U_{nyug}$ legyen, a küszöbtöltés pedig a kondenzátornak ugyanekkora feszültségre való feltöltéséhez szükséges.



1. ábra. A membránban a nyugalmi potenciál közelében végbemenő folyamatokat modellező RC-kör



2. ábra. A depolarizációs küszöb eléréséhez vagy rövid de nagy áramerősségű, vagy kisebb áramú, de elég hosszú ideig tartó impulzus szükséges. A depolarizációs küszöb eléréséig a membrán potenciálja a párhuzamos RC-körnél megismert exponenciális görbe szerint változik (vastagított szakasz)

1.2.3. VII/1.2.3. Váltóáramú szűrőkörök

Ezek a szűrőkörök tulajdonképpen feszültségosztók, amelyek a VII/1.2.1. részben tárgyaltól csak abban különböznek, hogy az egyik ellenállás helyett kondenzátor van az osztóban. Ez a csekély változtatás azonban alapvetően megváltoztatja a feszültségosztó tulajdonságait, ugyanis a kondenzátor váltóáramú ellenállása függ a frekvenciától. Ennek következtében a feszültségosztás frekvenciafüggő lesz. Kétféle RC-kör létezik, attól függően, hogy melyik ellenállást helyettesítjük kondenzátorral.

Felüláteresztő szűrő

A VII.12a ábrán a feszültségosztó R_1 ellenállását cseréltük le kondenzátorra. A kondenzátor váltóáramú ellenállása (X_C) a frekvencia növekedésével csökken:

$$X_C = \frac{1}{2\pi f C} \quad (\text{VII.4})$$

(ahol f a váltakozó áram frekvenciája, C a kondenzátor kapacitása). A feszültségosztó egyenletébe R_1 helyett X_C -t behelyettesítjük, és R_2 -t egyszerűen R -rel jelöljük. Figyelembe véve az ohmos ellenálláson és a kondenzátoron eső feszültségek között 90° -os fáziskülönbséget, a váltóáramú ellenállások négyzetei adódnak össze:

$$U_{ki} = U_{be} \frac{R}{\sqrt{R^2 + X_C^2}} = U_{be} \frac{R}{\sqrt{R^2 + \frac{1}{(2\pi f C)^2}}} = U_{be} \frac{2\pi f C R}{\sqrt{1 + (2\pi f C R)^2}}$$

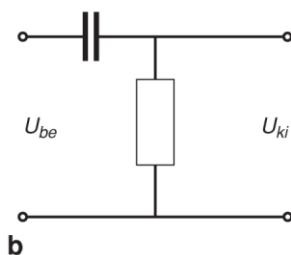
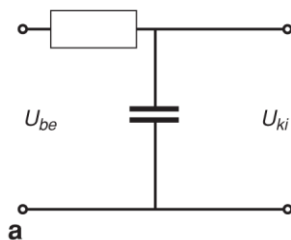
(VII.5)

Elég nagy frekvencián $X_C < R$, tehát a kondenzátoron eső feszültség elhanyagolhatóan kicsi, azaz a bemenőfeszültség gyakorlatilag gyengítetlenül jut a kimenetre. Alacsony frekvencián $X_C \gg R$, ezért a kimenetre elhanyagolható feszültség esik. Ez az áramkör tehát csak egy bizonyos ún. határfrekvencia felett engedi át a váltakozófeszültséget, ezért felüláteresztő, vagy alulvágó szűrőnek nevezzük.

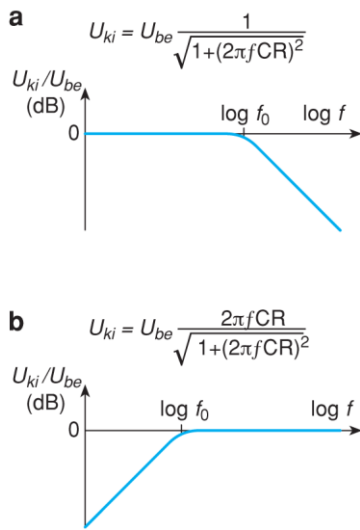
Aluláteresztő szűrő

Ha a másik ellenállást helyettesítjük kondenzátorral (VII.12b ábra), akkor a fenti gondolatmenettel analóg megfontolások segítségével beláthatjuk, hogy egy határfrekvencia alatt a bemenő feszültség gyakorlatilag gyengítetlenül jelenik meg a kimeneten, elég nagy frekvencián pedig gyakorlatilag nincs kimenőfeszültség. A határfrekvencia mindkét esetben ugyanakkora, mégpedig az a frekvencia, amelyiknél a kapacitív és az ohmos ellenállás megegyezik, azaz $X_C = R$.

A VII.13. ábra mutatja a kimenő és bemenő feszültségek hányadosát a frekvencia függvényében. Mind a frekvencia, mind a relatív feszültségek skálája logaritmikus, az utóbbi azért, mert decibelskálát alkalmazunk (lásd IV/3.2.).



VII.12. ábra. Aluláteresztő a) és feluláteresztő b) szűrő kapcsolási rajza

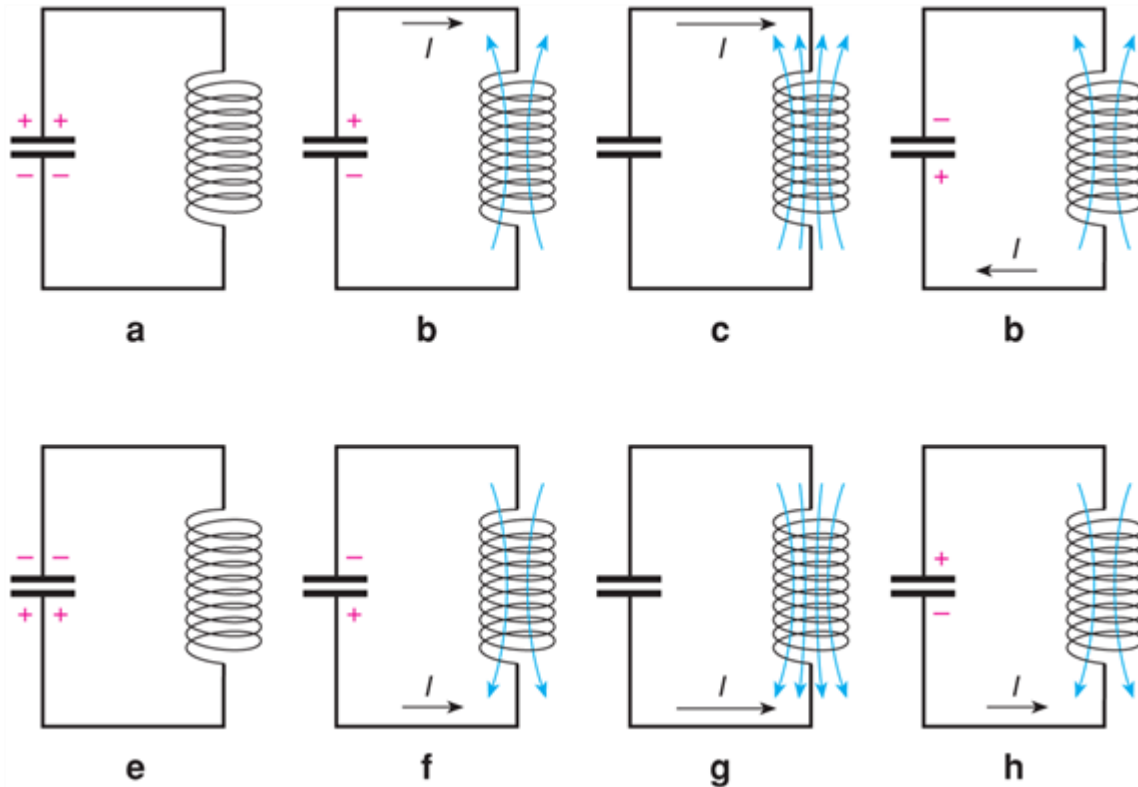


VII.13. ábra. Aluláteresztő a) és feluláteresztő b) szűrő átviteli karakterisztikája. A határfrekvencia:

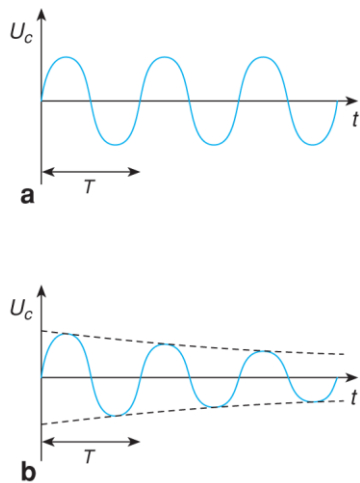
1.2.4. VII/1.2.4. LC-kör (rezgőkör)

Egy kondenzátorból és egy tekercsből álló kapcsolást rezgőkörnek, vagy LC-körnek nevezünk. A kapcsolat lehet soros, vagy párhuzamos, mi csak az utóbbival foglalkozunk (VII.14. ábra). Ha az LC-kör kondenzátorát egy bizonyos feszültségre feltöltjük, és a rezgőkört magára hagyjuk, akkor a kondenzátor feszültsége szinuszosan változik az idő függvényében. A tekercs ohmikus ellenállása miatt ennek a feszültségnek az amplitúdója exponenciálisan csökken, azaz csillapodó rezgés jön létre.

A szinuszos rezgés kialakulása a következőképpen történik. A feltöltött kondenzátor (VII.14a ábra) elkezd a tekercsen keresztül kisülni, tehát a tekercsen keresztül áram indul meg (VII.14b ábra), ami mágneses teret kelt. Amikor minden töltés elfogyott a kondenzátorlemezekről (VII.14c ábra), az áram elvileg megszűnne, és a mágneses tér is megszűnne. A mágneses tér csökkenése azonban olyan feszültséget indukál a tekercsben, amely az áram csökkenése ellen hat (Lenz törvénye). A tekercsben indukált feszültség tehát tovább hajtja a töltéseket) és az áramot még egy ideig fenntartja (VII.14d ábra). Ennek következtében a kondenzátor feltöltődik az eredetivel ellentétes polaritással (VII.14e ábra), majd az eddig leírtak újra megismétlődnek fordított áramiránnyal (VII.14f–h ábra). Végül a VII.14a ábrán látható kezdőállapothoz jutunk vissza. Ez a rezgés egy periódusa, ami ezután periodikusan ismétlődik. Energetikai szempontból az elektromos energia (feltöltött kondenzátor esete, VII.14a ábra) átalakul a mágneses tér energiájává (VII.14c ábra) amelyik azután visszaalakul elektromos energiává (VII.14e ábra). A valóságban a tekercsnek mindig van ohmos ellenállása, amelyen hő keletkezik, azaz energiavesztés lép fel, minek következtében a rezgés amplitúdója csökken. Ilyen csillapodó jelet mutat a VII.15b ábra.



VII.14. ábra. A rezgőkör működése



VII.15. ábra. Ideális, ill. reális rezgőkör kondenzátorán kialakuló feszültség állandó amplitúdójú, ill. csillapított szinusz alakú

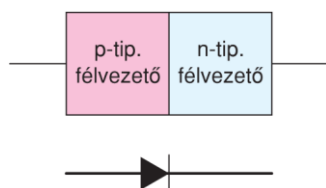
1.3. VII/1.3. Félvezető áramköri elemek

1.3.1. VII/1.3.1. Félvezető dióda

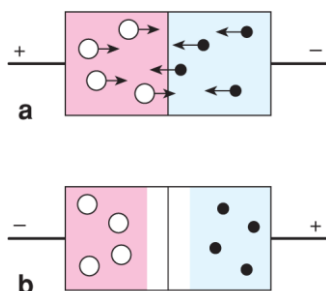
A félvezető dióda egy n típusú és egy p típusú félvezetőből áll (VII.16. ábra). Legfontosabb funkciója az egyenirányítás, ami azt jelenti, hogy csak az egyik irányba engedi át az áramot. Ezt jelzi az áramköri jelölés is: áram csak a nyíl irányába tud folyni.

A VII.17a ábra mutatja, mi történik ha olyan feszültséget adunk a diódára, amely hatására a diódanyíllal megegyező irányú áram folyik. Ekkor a feszültség a defektelektronokat és a vezetési sávban levő elektronokat egymás felé hajtja. Ezek a két réteg találkozásánál egymással rekombinálnak. Mivel a diódához csatlakozó vezetésekről az elektronok és a defektelektronok (utóbbiak elektron kilépéssel) pótlódnak, folyamatos áram

alakul ki. Ezt nevezzük a dióda nyitóirányának. Ellenkező irányú feszültséget kapcsolva a diódára az elektromos tér hatására a töltéshordozók egymástól eltávolodnak (VII.17b ábra). Középen egy kiürített sáv alakul ki, ahol nincs töltéshordozó, így áram sem folyik. Ez a dióda záróiránya. A diódát általában egyenirányításra használják, azaz váltakozó feszültségből egyenfeszültséget hoznak vele létre. Ilyen átalakításra van szükség például az elektronikus berendezéseket működtető tápfeszültség előállításához.



VII.16. ábra. A félvezető dióda felépítése és áramköri rajza



VII.17. ábra. A félvezető dióda nyitó és záróirányú viselkedése. A körök a defektelektronokat, a pontok a vezetési sávban levő elektronokat jelentik. A szürke sáv a kiürített zóna

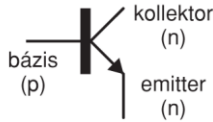
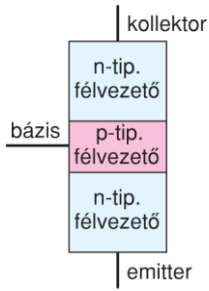
1.3.2. VII/1.3.2. Tranzisztorok

A detektoron, a különféle jelformálókon a jel teljesítménye csökken. Az ilyen kapcsolásokat nevezzük passzív áramköröknek, az őket felépítő elemeket (ellenállás, kondenzátor, tekercs stb.) pedig passzív áramköri elemeknek.

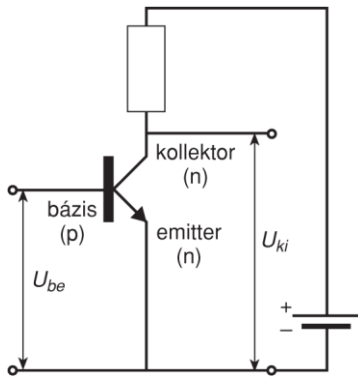
A teljesítmény növelését megvalósító kapcsolásokhoz egy merőben új tulajdonságokkal rendelkező tagra van szükség, amely kis teljesítménnyel meghajtva nagy teljesítményt tud vezérelni. Ilyen áramköri elemek a tranzisztorok, melyek a modern elektronika nélkülözhetetlen alkotóelemei.

Az első tranzisztor John Bardeen, Walter Houser Brattain és William Bradford Shockley munkásságának köszönhetően készült el 1949-ben. Munkájuk elismeréseként 1956-ban fizikai Nobel-díjat kaptak. Azóta a tranzisztorok több generációját fejlesztették ki, egyre kisebb méretben és energiafelhasználással.

Az első generációs ún. bipoláris tranzisztor három szennyezett félvezető rétegből állt (VII.18. ábra). Első ránézésre két diódának tűnik, de a középső (ún. bázis) réteg nagyon vékony, és emiatt a tranzisztor egészen másként viselkedik, mint két egymással összekapcsolt dióda. A tranzisztor három kivezetése (emitter-bázis-kollektor) két áramkörhöz csatlakozik a VII.19. ábra szerint. A kollektorra kötött ellenállás nem engedi, hogy a tranzisztoron túl nagy áram folyjon. Ha a bázisra nem kapcsolunk semmilyen feszültséget, az emitter és kollektor között nem folyik áram, mivel a két „dióda” közül az egyik (mégpedig a báziskollektor-dióda) záróirányú. A bázisra az emitterhez képest pozitív jelfeszültséget kapcsolva a bázis felől az emitter felé áram indul meg. Ez azt jelenti, hogy az n típusú félvezető emitterben levő negatív töltéshordozók a bázis felé indulnak, ahol a pozitív defektelektronokkal rekombinálnak, éppen úgy, mint egy nyitóirányú diódánál. A vékony bázisrétegbe beáramló elektronok egy része azonban nem rekombinálódik, hanem továbbhalad a kollektor irányába, ami azt jelenti, hogy megindul egy emitter → kollektor áram, annak ellenére, hogy a báziskollektor „dióda” záróirányú. A legmeglepőbb az, hogy az elektronok nagy része a kollektor irányába halad, és csak kis részük rekombinálódik a bázisban. Ez adja a tranzisztor igazi jelentőségét. Ugyanis a bázisemitter (I_B) és a kollektor-emitter (I_K) áramok egymással arányosak, de a bázisáram sokkal kisebb. Tehát egy kisebb bázisárammal lehet „vezérelni” a nagyobb kollektor áramot. Ha a VII.19. ábrán levő kapcsolásban a bemenőfeszültséget (U_{be}) egy kicsit megemeljük, ezzel egy kicsit megemelkedik a bázisáram (I_K) is, aminek következtében nagyon megemelkedik a kollektor áram (I_K), amivel arányosan megnő az ellenálláson eső feszültség. Így a kimenőfeszültség (U_{ki}) lecsökken. A kimenőfeszültség változása azonban az előbb leírt áramerősítés miatt sokkal nagyobb, mint a bemenő feszültség változása. Ez a tranzisztoros jelerősítés alapja.



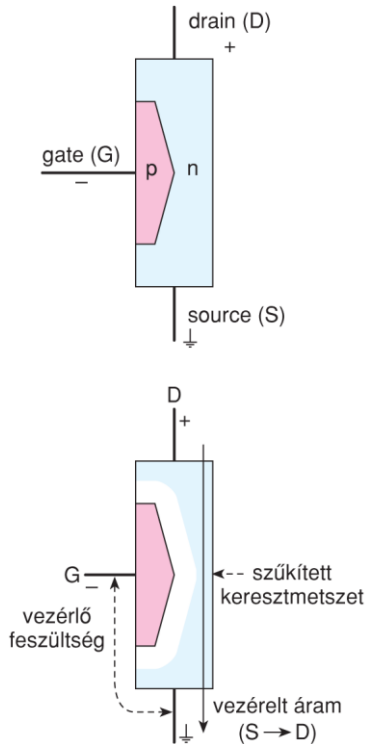
VII.18. ábra. A bipoláris tranzisztor felépítése és áramköri rajza



VII.19. ábra. Tranzisztoros erősítő áramkör

1.3.3. VII/1.3.3. FET (Field Effect Transistor)

A tranzisztorok következő generációját a FET-ek alkotják. A bipoláris tranzisztornál a bemenetre kapcsolt feszültség hatására áram folyik, ami azt jelenti, hogy a működéshez elektromos bemenő teljesítmény szükséges. Ez csökkent jelentősen a FET-esetében. A VII.20 ábrán látszik az elrendezés, és a működés is. A bipoláris tranzisztoroknál használt emitter, kollektor és bázis elektródáknak most a source, drain, és gate kivezetések felelnek meg. Az elv nagyon egyszerű, a diódánál már tárgyalt kiürített réteg vastagságát változtatjuk a vezérlő feszültséggel. Ennek olyan hatása van, mintha a vezető keresztmetszetét változtatnánk, amivel az átfolyó áramot regulálhatjuk. A FET nagy előnye, hogy a vezérlő elektródán gyakorlatilag nem folyik áram, azaz a bemenő teljesítmény nagyon alacsony. Ez az integrált áramkörök elterjedésével nagyon fontos szemponttá vált. Minél több tranzisztort zsúfolunk ugyanis össze egy integrált áramkörbe, annál kevesebb hőt termelhet egy-egy tranzisztor.

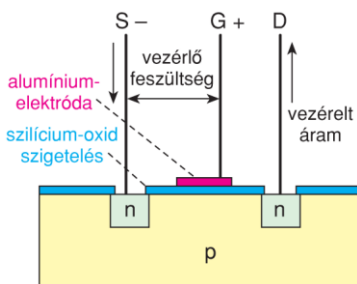


VII.20. ábra A FET felépítése és működése

1.3.4. VII/1.3.4. MOS (Metal Oxide Semiconductor)-FET és CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor)-FET

A modern számítástechnikai eszközökben szinte csak ilyen tranzisztorok vannak. Ezeket az eszközöket egy szilíciumlapkán alakítják ki. A MOS-FET esetén az alapvetően p típusú szennyezett szilíciumlapkán alakítják ki az n típusú szigeteket. A „gate” elektróda alatt oxidált szilícium szigetelés található (VII.21. ábra). A „gate” (G) és a „source”(S) közé kapcsolt feszültség hatására a két n típusú félvezető sziget között vezető híd jön létre, mivel a pozitív G elektróda a szilícium hordozóban levő vezetési elektronokat odavonzza.

A gyakorlatban technikai okokból inkább CMOS FET-eket alkalmaznak, amelyek az MOS-FET-től abban különböznek, hogy a p és n típusú félvezetők, illetve a feszültségek polaritásai fel vannak cserélve.



VII.21. ábra. MOS-FET tranzisztor felépítése

1.4. VII/1.4. Elektromos erősítő

Az elektromos erősítőtől azt követeljük meg, hogy a bemenő jel időbeli lefolyásával (lehetőleg) teljesen azonos, de annál nagyobb teljesítményű kimenő jelet állítson elő. Természetesen az erősítő működéséhez egy tápfeszültség is szükséges amelynek energiáját a kimenőjel előállításához felhasználhatjuk. Az erősítő felépítésével, és belső működésével nem foglalkozunk, azt egy fekete doboznak tekintjük, amelyet a bemenő és kimenő feszültség-, illetve teljesítményviszonyával jellemzünk.

1.4.1. VII/1.4.1. Az erősítő jellemző adatai

Az erősítő legfontosabb jellemzői a feszültség- ill. teljesítményerősítés:

$$A_U = \frac{U_{ki}}{U_{be}} \quad \text{ill.} \quad A_P = \frac{P_{ki}}{P_{be}}$$

(VII.6)

A bemenő- ill. kimenőteljesítmény (P_{be} ill. P_{ki}) még némi magyarázatra szorul. Az erősítő bemenetére kapcsolt feszültség hatására a bemeneten áram folyik (VII.22. ábra). A bemenet tehát úgy viselkedik, mint egy ellenállás, aminek az értéke meghatározható a bemenő feszültség és a bemeneten folyó áram hányadosából. Ezt nevezzük bemenő ellenállásnak. A kimeneten megjelenő feszültség a jelfeldolgozó lánc következő elemének bemenő feszültsége lesz, ennek az elemnek a bemenő ellenállása lesz az erősítő terhelő ellenállása (R_t).

A bemenő ill. kimenő teljesítmények tehát:

$$P_{be} = \frac{U_{be}^2}{R_{be}} \quad \text{ill.} \quad P_{ki} = \frac{U_{ki}^2}{R_t}$$

(VII.7)

Feltéve hogy a következő fokozat is ugyanakkora bemeneti ellenállással rendelkezik, tehát az erősítő bemenő és terhelő ellenállásai megegyeznek, a teljesítményerősítés:

$$A_P = \frac{\frac{U_{ki}^2}{R_t}}{\frac{U_{be}^2}{R_{be}}} \approx \frac{U_{ki}^2}{U_{be}^2} = A_U^2.$$

(VII.8)

Teljesítmény jellegű mennyiségek összehasonlítására gyakran használják a decibelskálát (ld pl. IV/3.2. fejezet). Mivel a teljesítményerősítés két teljesítmény hányadosa, a decibelskála itt is használatos. A decibelben számolt erősítésszint a decibelskála definíciója alapján:

$$n = 10 \cdot \lg A_p. \quad (\text{VII.9})$$

Az erősítésszint a feszültségerősítéssel felírva:

$$n = 10 \cdot \lg A_U^2 = 20 \cdot \lg A_U.$$

(VII.10)

A bemenő- és kimenő-jelek hányadosa természetesen csak egy bizonyos feszültségtartományban lehet állandó. Ez abból következik, hogy a kimenő-jelet az erősítő a tápfeszültségből alakítja ki. Ha például a feszültségerősítés $A_U = 50$, akkor 10 V-os tápfeszültség mellett a 0,1 V-os bemenőfeszültséget 5 V-ra erősíti az áramkör, de ha a bemenő jelet 1V-ra emeljük, akkor az elméleti 50 V-os kimenőfeszültség helyett csak a tápfeszültségből maximálisan előállítható 10 V-ot fogjuk találni. Ilyen esetekben a jel torzul.

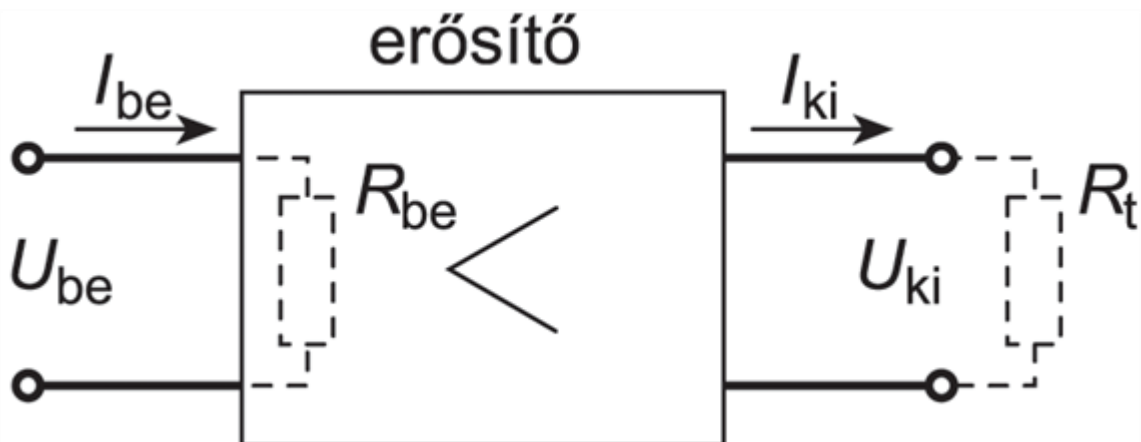
Az erősítő bemeneti, ill. kimeneti feszültségét általában ugyanahhoz a (földpotenciálnak nevezett) potenciálhoz viszonyítjuk. Így a bemenet és kimenet egy-egy kapcsa megegyezik, amit VII.23. ábrán szaggatott vonallal érzékeltetünk.

A jelek egy része azonban két olyan pont közti feszültségként adódik, amelyek közül egyik sem a földpotenciál. Tipikusan ilyenek a biológiai jelek, például az EKG-jel. Ilyen jelek erősítésére kezdték alkalmazni az ún. differenciálerősítőt, amit a VII.23b ábra mutat. Itt tulajdonképpen az U_{be1} és az U_{be2} feszültségek különbsége lesz az erősítendő bemenőjel:

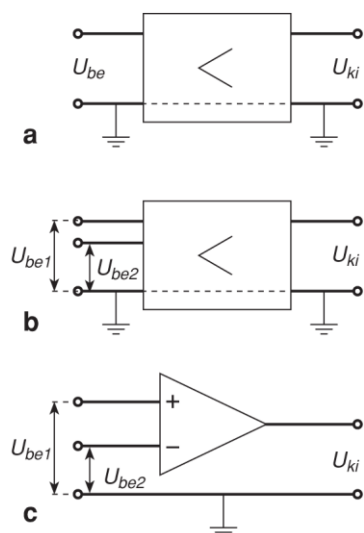
$$U_{ki} = (U_{be1} - U_{be2}) A_U.$$

(VII.11)

Az erősítő félvezető áramköri elemeket tartalmaz. A különbözően adalékolt szennyezett félvezető anyagokból kialakított tranzisztorok, alapvető jellemzője, hogy kis árammal, nagyobb áramot lehet vezérelni, változtatni. Nagyon leegyszerűsítve ez az erősítés alapja. Természetesen egy erősítőben tranzisztorok tucatjai is lehetnek. Manapság az erősítők (általában differenciálerősítők) egy integrált áramköri tokban kaphatók, ami szintén indokolja, hogy az erősítő belső felépítésével ne foglalkozzunk.



VII.22. ábra. Vázlat az erősítő jellemzőinek magyarázatához



VII.23. ábra. a) Hagyományos (földelt) erősítő, b) differenciál vagy földfüggetlen erősítő, c) a differenciálerősítő (műveleti erősítő) szokásos áramköri rajza

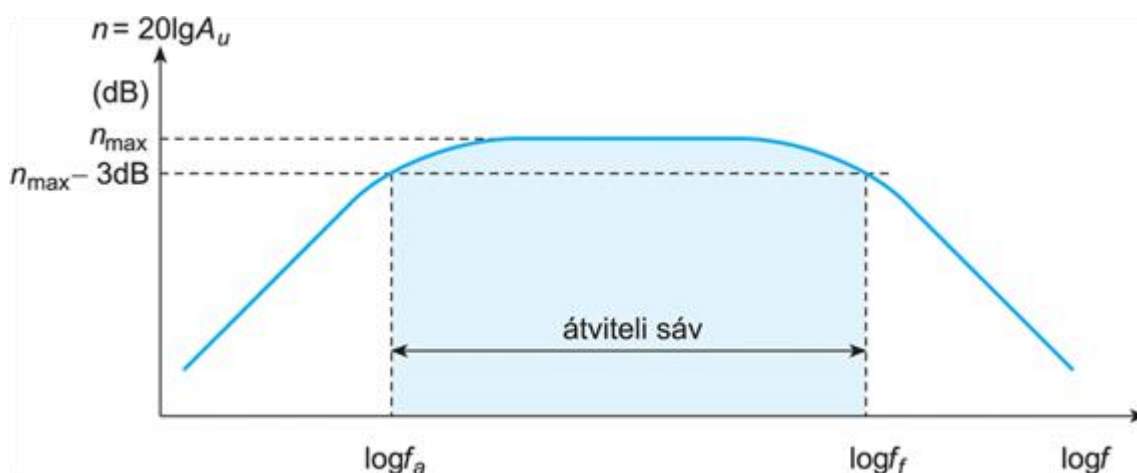
1.4.2. VII/1.4.2. Az erősítő karakterisztikája

Ha az erősítő bemenetére különböző frekvenciájú szinuszos váltakozófeszültséget kapcsolunk, akkor azt tapasztaljuk, hogy az erősítésszint függ a frekvenciától. Az erősítést a frekvencia függvényében ábrázolva kapjuk az **erősítő frekvenciaátviteli karakterisztikáját**. A VII.24. ábrán egy tipikus karakterisztikát látunk.

Az erősítő frekvenciakarakterisztikáját általában úgy ábrázolják, hogy a decibelben kifejezett erősítésszintet (n) a frekvencia logaritmusának függvényében veszik fel. Vegyük észre, hogy ez tulajdonképpen egy kétszeres logaritmusos ábrázolás, hiszen a decibelben kifejezett erősítésszint a feszültségerősítés logaritmusával arányos.

Az átviteli függvény általában egy adott frekvenciatartományban állandó, magas frekvenciáknál az erősítés felülvágó szűrőhöz hasonlóan csökken. Ugyanígy az alacsony frekvenciáknál is csökken az erősítés (az alulvágó szűrő frekvenciaátviteli karakterisztikájának megfelelően). Az alsó (f_a) és felső (f_h) határfrekvencia közötti állandó erősítésű tartományt **átviteli sávnak** nevezzük. Határfrekvenciának azokat a frekvenciákat nevezzük, ahol az erősítés a maximális erősítésszintnél 3 dB-lel kisebb. Tehát az átviteli sávon belül az erősítésszint legfeljebb 3 dB-lel változik. (l. VII.1. Megjegyzés).

Korábban láttuk, hogy Fourier-tétel segítségével minden jelhez rendelhető egy frekvenciatartomány, amelybe tartozó szinuszhullámok segítségével a jelalak elég hűen rekonstruálható. Az optimális erősítést akkor érjük el, ha a jel frekvenciatartománya és az erősítő átviteli sávja egybeesik (l. VII.4. ábra). Ekkor az erősítő a jel minden komponensét ugyanolyan mértékben erősíti, így nem lép fel torzulás. Ha az erősítő átviteli sávja keskenyebb, mint a jel frekvenciatartománya, akkor a jel egyes komponensei csak kevésbé vagy alig erősödnek, az erősített jelből hiányzó komponensek miatt a jel alakja torzul. Kisebbség a baj, ha az erősítő átviteli sávja szélesebb, mint a jelhez szükséges frekvenciatartomány, ekkor azonban az erősítő a feleslegesen erősített frekvenciatartományban zajokat erősíthet, ami rontja a jel minőségét.



VII.24. ábra. Tipikus erősítő frekvenciaátviteli karakterisztika

VII.1. megjegyzés. Az erősítésszint a karakterisztika maximumánál és valamelyik határfrekvenciánál: $n_{\max} = 10 \cdot \lg (P_{\text{ki,max}}/P_{\text{be}})$, valamint $n_{\max} - 3\text{dB} = 10 \cdot \lg (P_{\text{ki,határ}}/P_{\text{be}})$, amiből kivonással kapjuk: $3\text{dB} = 10 \cdot \lg (P_{\text{ki,max}}/P_{\text{ki,határ}})$. Mivel a dB nem „igazi mértékegység”, csupán viszonyszámot fejez ki, mint pl. a radián, ezért ezt elhagyhatjuk, tízzel oszva és az egyenletet a 10 hatványára emelve: $P_{\text{ki,max}}/P_{\text{ki,határ}} = 10^{0.3} \approx 2$. ugyanakkora bemenő teljesítmény esetén a kimeneten a határfrekvenciánál feleakkora kimeneti teljesítményt kapunk, mint a maximális erősítéshez tartozó frekvencián.

1.4.3. VII/1.4.3. A visszacsatolás

Az erősítő tulajdonságait radikálisan megváltoztathatjuk, ha a kimenőjel egy kis részét visszavezetjük a bemenetre. Pontosabban a kimenőfeszültség egy részét (β -szorosát) hozzáadjuk az eredeti jelfeszültséghez, vagy levonjuk abból (VII.25. ábra). Ha a visszacsatolt jelet hozzáadjuk a bemenő jelhez, akkor pozitív, amikor a visszacsatoló jelet levonjuk a bemenő jelből akkor negatív visszacsatolásról beszélünk. $\beta \leq 1$, hiszen a visszacsatoló feszültség nem lehet nagyobb a kimeneti feszültségnél. A kimenőfeszültség β -szorosát általában egy egyszerű feszültségosztó állítja elő (lásd keretes rész VII.1.2.1.). A visszacsatolás következtében az erősítő bemenetére ténylegesen jutó feszültség:

$$U = U_{\text{be}} + \beta U_{\text{ki}} \quad \text{vagy} \quad U = U_{\text{be}} - \beta U_{\text{ki}}.$$

(VII.12)

Figyelembe véve még, hogy az eredeti erősítő feszültségerősítése

$$A_U = \frac{U_{\text{ki}}}{U} \quad (\text{VII.13})$$

azt kapjuk, hogy a visszacsatolt erősítő feszültségerősítése:

$$A_{U,V} = \frac{U_{\text{ki}}}{U_{\text{be}}} = \frac{A_U}{1 - A_U \beta} \quad \text{ill.} \quad A_{U,V} = \frac{A_U}{1 + A_U \beta}.$$

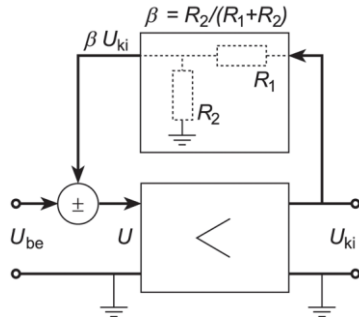
(VII.14)

Először is vegyük észre, hogy a visszacsatolás nélküli esetre ($\beta = 0$) visszkapjuk az eredeti erősítés értékét. **Pozitív visszacsatolás** esetén a nevező csökken, így az erősítés növekszik a visszacsatolás következtében, hiszen a kimenőjel egy részét visszavezetve a bemenetre, az mintegy újra erősödik, és még jobban növeli a kimenő jelet. Ez előnynek tűnik, azonban mint látni fogjuk, ezért az előnyért drágán kell fizetni.

Először is az elmondottak csak elég kis β esetén igazak, addig, míg $A_U \beta < 1$. Ha $A_U \beta = 1$, akkor az erősítés végtelen nagyra nő. Ezt úgy is elképzelhetjük, hogy amikor a visszacsatolás növelésével megközelítjük a $A_U \beta = 1$

esetet, akkor $A_{U,V}$ egyre nagyobb lesz, azaz egyre kisebb bemenő feszültség kell ugyanakkora kimenőjel előállításához. A $A_U\beta = 1$ esetben pedig már akkor is keletkezik kimenőjel, ha nincs bemenőjel. Ez az oszcillátor esete.

Az oszcillátor váltakozófeszültséget előállító áramkör. Kérdés, hogy mekkora lesz a keletkező váltakozó feszültség frekvenciája? A válaszhoz észre kell vennünk, hogy β -hoz hasonlóan $A_{U,V}$ is függ a frekvenciától. A pozitív visszacsatolás következtében az erősítő frekvenciaátviteli karakterisztikája a VII.26. ábrán látható módon változik. A pozitív visszacsatolást növelve, természetesen azon a frekvencián következik be az oszcilláció feltétele ($A_U\beta=1$), ahol az eredeti erősítés a maximális volt.



VII.25. ábra. A visszacsatolt erősítő. A nyilak a jel ill. a visszacsatoló jel terjedési irányát mutatják a jobb megértés érdekében. A körbe zárt \pm jel azt mutatja, hogy a két jelet (az eredeti bemenő- és a visszacsatoló jelet) összeadjuk, vagy kivonjuk

A VII.26. ábra mutatja, hogy a pozitív visszacsatolás következtében az átviteli sáv keskenyedek. Ez az az ár, amit a megnövelt erősítésért fizetni kell. Sőt van még valami, amit a karakterisztika nem mutat. Az erősítő által termelt zajok ugyanis a bemenetre visszakerülve újra felerősödnek, így az erősített jel zajosabbá válik.

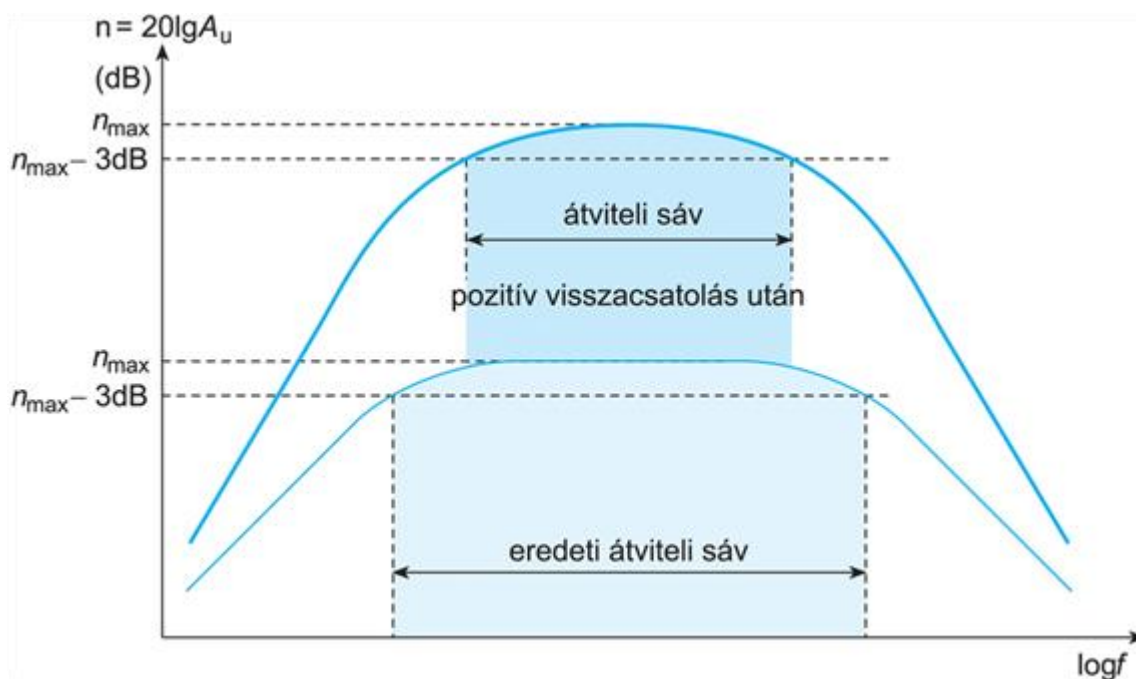
A **negatív visszacsatolt** erősítő erősítése minden esetben kisebb az eredetinél. Ha $A_U\beta \gg 1$, akkor

$$A_{U,V} = \frac{1}{\beta} < A_U.$$

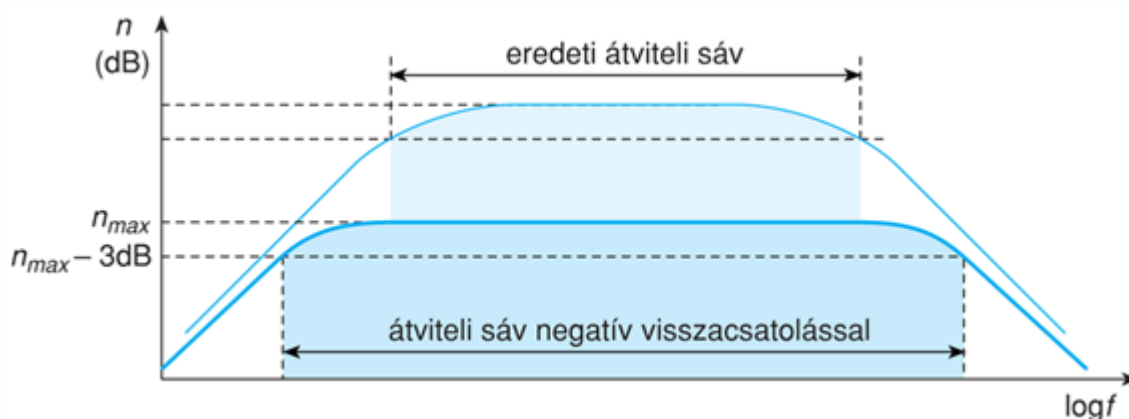
(VII.15)

Ez az átviteli sávban minden frekvencián érvényes. Első ránézésre nem tűnik ésszerű dolognak csökkenteni az erősítést, de ezért cserébe más tulajdonságok javulását kapjuk. A VII.27. ábra mutatja a negatív visszacsatolás hatását a frekvenciaátviteli karakterisztikára. Látható, hogy a karakterisztika simább lesz, az átviteli sáv szélesebb lesz. Ezzel párhuzamosan az erősítő által keltett zajok egy része is kioltódik azzal, hogy a bemenetre negatív előjellel kerül vissza.

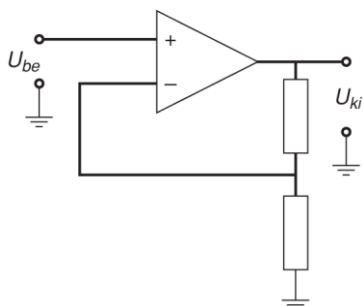
A visszacsatoló jel levonása a bemenőjeltől legegyszerűbben a differenciálerősítővel lehetséges. A VII.28. ábra mutat egy nagyon egyszerű negatív visszacsatolást, ahol az erősítő negatív bemenetét használtuk fel a negatív visszacsatolásra. A mai műveleti erősítők, amelyek integrált áramkörként kaphatók nagy (több mint 100 dB) erősítésszinttel rendelkeznek. Egy adott alkalmazáshoz a szükséges erősítést és átviteli sávot a megfelelő visszacsatolással lehet beállítani.



VII.26. ábra. Az erősítő frekvenciaátviteli karakterisztikájának változása pozitív visszacsatolás hatására



VII.27. ábra. Az erősítő frekvenciaátviteli karakterisztikájának változása negatív visszacsatolás hatására



VII.28. ábra. Negatív visszacsatolás műveleti erősítővel

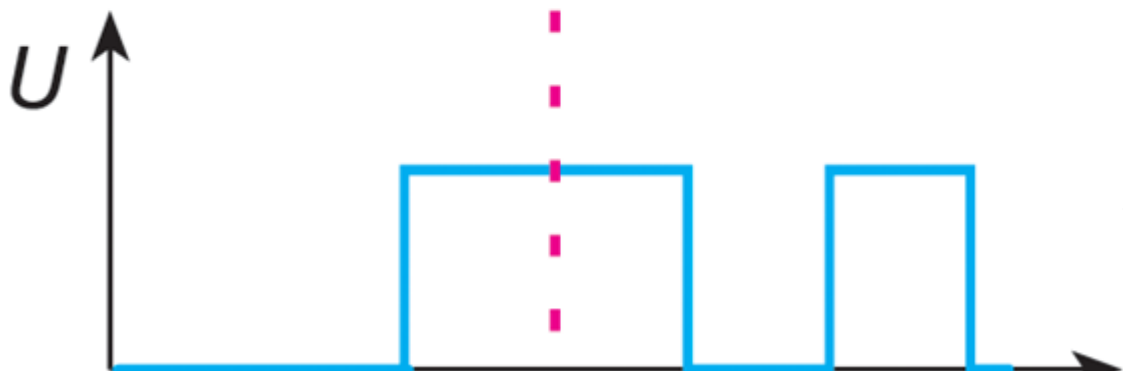
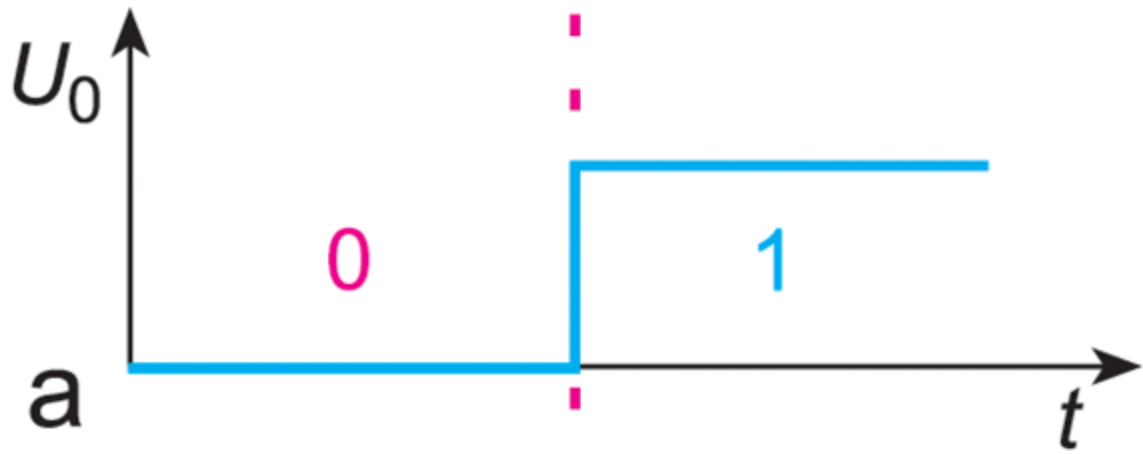
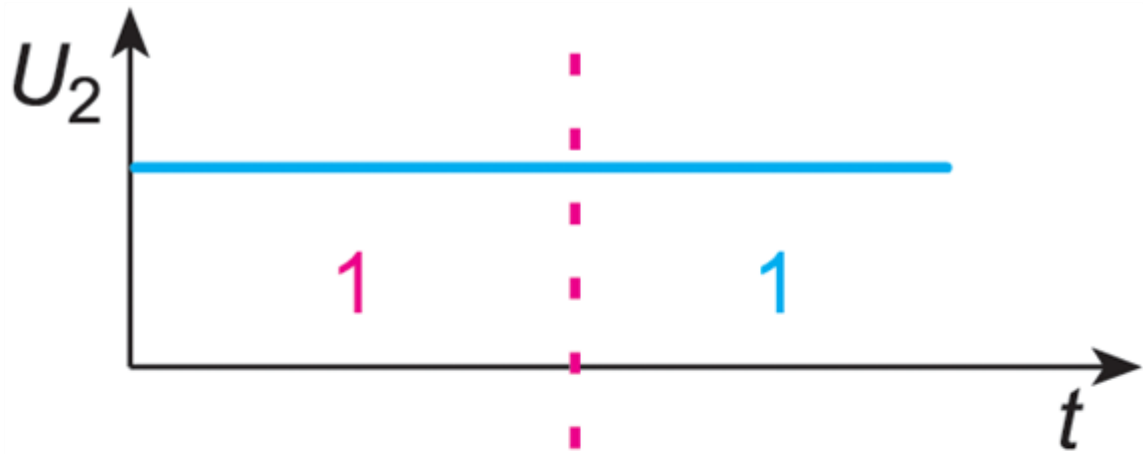
VII.2. megjegyzés. Biztos mindenki tapasztalta már, hogy egy rendezvényen, ahol az előadó hangját mikrofon, erősítő és hangszórók segítségével kihangsították, valaki véletlenül túlságosan megnövelte az erősítést, minek következtében sípoló hang hallatszott. Ez a pozitív visszacsatolás határesetének következménye.

Ekkor a pozitív visszacsatolást a hangszóróból a mikrofonba visszajutó hang jelentette. Az erősítés növelésével, a visszacsatolás állandó volta mellett a $Au\beta$ szorzat egy frekvenciánál elérte az 1-et és bekövetkezett az oszcilláció.

1.5. VII/1.5. Jelátalakítás, jelszelektálás

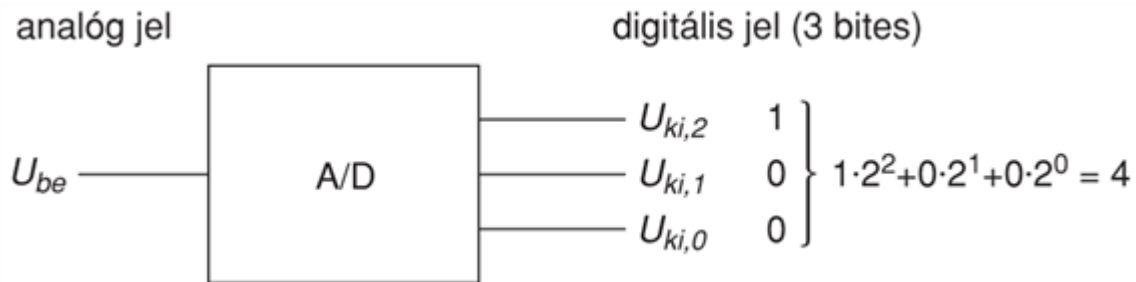
1.5.1. VII/1.5.1. Analóg-digitális átalakítók

A legegyszerűbb (bináris digitális = BD) digitális jel esetén a feszültség két értéket vehet fel alacsony, amit 0-val vagy magas, amit 1-gyel jelölhetünk. Ez egy egyjegyű kettes számrendszerbeli számnak felel meg. Azt az információt, amit egy ilyen digitális jel szállít 1 bitnek (binary digit = bit) nevezzük. Ha ennél nagyobb számot szeretnénk ezzel a módszerrel megjeleníteni, akkor több egymással párhuzamos vagy egymást szabályszerű időközönként követő ilyen BD feszültségjelre van szükségünk. (VII.29. ábra) Például 8 párhuzamos BD feszültségjel összesen $2^8 = 256$ -féle lehet, azaz 0-tól 255-ig tudjuk megjeleníteni a számokat. Ezt a nyolc feszültséget együtt 8 bites digitális jelnek hívjuk. A BD jel, tehát általában nem csak egy, hanem több párhuzamos vezetéken megjelenő feszültségjelből tevődik össze. Ezek mindig egy kettes számrendszerben felírt számot jelenítenek meg.



VII.29. ábra. Párhuzamos a) és soros b) digitális jelek. Feltüntettük azt a kettes számrendszerbeli számot amit a digitális jelhez rendelhetünk

Az analóg jeleknek digitálissá alakítását ún. analóg-digitális (A/D) átalakítóval végezzük. (VII.30. ábra) Az A/D átalakító fontos paramétere az a bemeneti feszültségtartomány, amelybe eső feszültségeket át tudja alakítani. A másik fontos jellemző a konverter felbontása, azaz, hogy a kimenő digitális jel hány digitális feszültséggel jeleníthető meg, azaz az átalakító hány bites. Az n bites A/D konverter a bemenő feszültségtartományt 2^n intervallumra osztja fel, és minden ilyen feszültségintervallumhoz egy számot rendel. Ennek az intervallumnak a szélessége lesz a digitalizált jel pontossága, hiszen ezen az intervallumon belül a bemenőjeleket a konverter nem különbözteti meg, ugyanazt a számot rendeli hozzájuk.

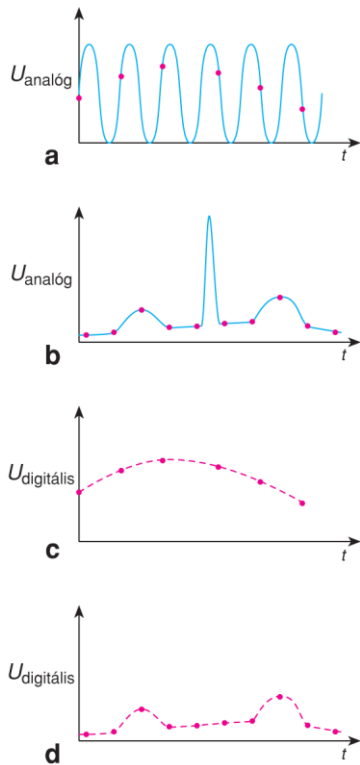


VII.30. ábra Az analóg-digitális átalakító

Egy analóg jelet elvileg tetszőleges pontossággal megadhatunk (pl. 2,38470173... V) Természetesen csak elvileg, hiszen a mérési pontosság miatt csak néhány tizedes jegy megadása értelmes. A jel digitalizált változatának mindig véges pontossága van, ezt a konverter már említett felbontása határozza meg. A mai modern A/D konverterek 12 vagy akár 16 bitesek is lehetnek, azaz több mint 4000, ill. 65000 feszültségértéket különböztetnek meg.

Még egy nagyon fontos jellemzője van az A/D konverternek, ez pedig a mintavételezés frekvenciája. A bemenőjel ugyanis általában folyamatosan változik, ezért a konverter annak értékét bizonyos időközönként megméri (abból mintát vesz). Nagyon fontos, hogy a mintavételezés frekvenciája illeszkedjen a jelhez. Itt újra utalnunk kell arra, amit a jelek frekvenciatartományáról mondtunk (lásd VII/1.2.2. rész). A mintavételezésnek olyan sűrűnek kell lenni, hogy még a legmagasabb frekvenciájú felharmonikus is elég sűrűn megmérjük. Ez a gyakorlatban azt jelenti, hogy a mintavételezési frekvencia a legnagyobb frekvenciájú komponens frekvenciájának legalább duplája legyen. Ekkor a leggyorsabb komponens periódusa alatt is legalább két mérést végzünk. A VII.31. ábra mutatja, hogyan torzulhat a jel, ha nem elég sűrű a mintavételezés. A jel lényeges elemei is elveszhetnek, ahogy ezt a VII.31b és d ábra mutatja, ahol az EKG-jel legjellegzetesebb csúcsa az ún. R hullám veszett el a mintavételezés durva hiányossága révén. Emlékezzünk arra, hogy az R hullám hegyes volta miatt kellett olyan sok felharmonikus az EKG-jel hű összerakásához. Nem meglepő, ha az R hullám vesz el (vagy torzul), ha a mintavételezés frekvenciája kisebb a szükségesnél. A tanulság tehát az, hogy ugyanúgy, ahogy az erősítő átviteli sávjának, az A/D konverter mintavételezési frekvenciájának is illeszkedni kell a jelhez, annak frekvenciatartományához.

Az analóg-digitális átalakító belső szerkezetével nem foglalkozunk, annyit azonban megemlítünk, hogy többféle átalakítási módszer létezik. A legegyszerűbb az, amely a számkitalálás játékhoz hasonló: Gondoltam egy számot 0-tól 7-ig. Nagyobb 3-nál? Igen. Nagyobb 5-nél? Nem. Nagyobb 4-nél? Igen. Ez a szám az 5! Az igen és nem válaszok a digitalizált jel 1 és 0 értékeinek felelnek meg, azaz a példánkban szereplő igen nem igen válaszszorozatnak megfelelő digitális jel értéke 101, ami az 5 kettes számrendszerbeli megfelelője. Az analóg-digitális átalakító tehát összehasonlításokat végez (nagyobb mint...?) és ezen összehasonlítások eredményei adják a digitalizált jel 0 vagy 1-es értékeit.



VII.31. ábra. Két példa arra, hogy a szinusz-, ill. az EKG-jel alakja torzul a digitalizálás során, ha a mintavételezés frekvenciája nem megfelelő. Felül (a és b görbéken) az eredeti jelalakok láthatók. A piros pontok a mintavételezést jelölik. Alul (c és d) látható az így módon digitalizált jel. A szaggatott vonal azt illusztrálja, hogy milyen jelet képzelhetünk el a digitalizált pontok alapján

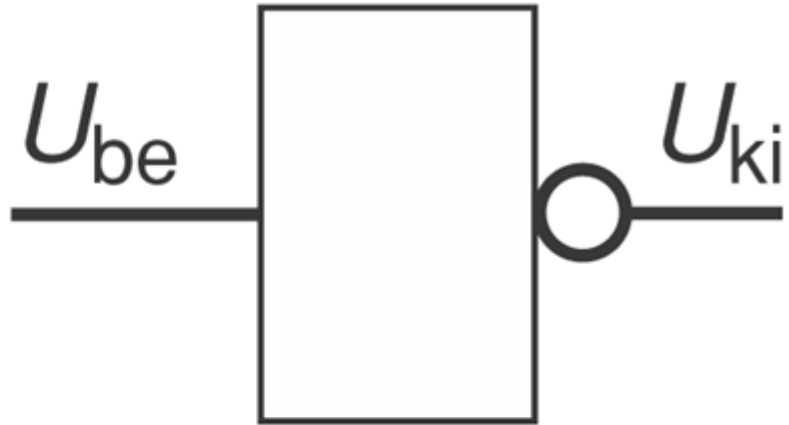
VII.3. megjegyzés. Az A/D átalakító felbontását egy példával világítjuk meg. Legyen a bemenő feszültségtartomány 0-8 V, és legyen az egyszerűség kedvéért a konverterünk csak 4 bites. Ekkor a kimenő digitális jel $2^4=16$ fajta lehet, azaz 0-15 ig terjedő értékeket vehet fel. A bemeneti feszültségtartományt a konverter tehát 16 részre osztja. Egy ilyen intervallum 0,5 V széles. Az első intervallumba 0-0,5 V eső bejövő jel esetén a kimenet a legkisebb (azaz 0) értéket adja. A második 0,5-1 V-os intervallum esetén a kimenő jel az 1-es, és így tovább, a legutolsó 7,5-8 V-ig terjedő intervallumba eső feszültséggel a 15-ös kimenőjelet adja. A véges felbontás miatt az ugyanabba az intervallumba eső bemenőjel (pl. 2,1 és 2,4 V) ugyanazt a (4-es) digitalizált értéket adják.

Digitális áramköri elemek

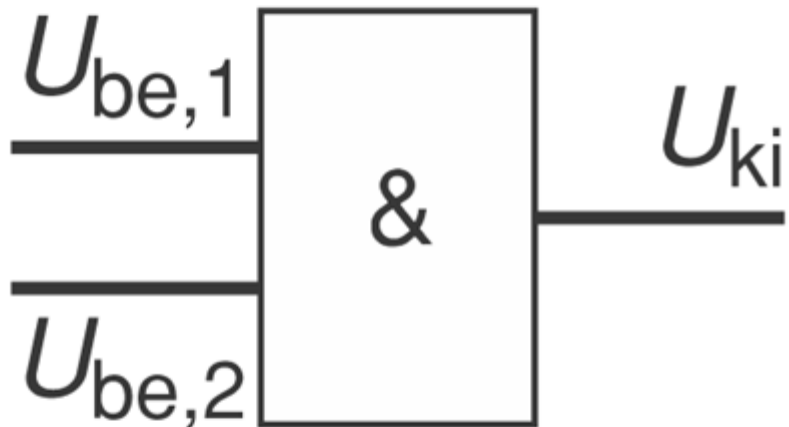
1. Logikai áramkörök

A digitális jelek kombinációjából új jel előállítását logikai műveletnek nevezzük. A logikai műveleteket megvalósító áramkörök az ún. kapuáramkörök. A legegyszerűbb a logikai művelet a tagadás (NEM), amikor a 0 szintnek megfelelő bemenőjeltől 1-es lesz és fordítva. A többi művelethez legalább egy bemenőjel szükséges. Ezek szemléltetésére legyen két bemenőjelünk ($U_{be,1}$ és $U_{be,2}$), amelyből logikai művelettel képezhetünk új értéket. A logikai ÉS művelet esetén kimenőjel (U) csak akkor lesz 1-es, ha mindkét bemeneten 1-es jel volt. Ezzel szemben a logikai VAGY műveletnél bármely bemenőjel 1-es szintje esetén a kimenet 1-es lesz, és csak akkor marad 0, ha minden bemeneten 0 szint van. Az 1. ábra mutatja a kapuáramkörök egyezményes áramköri jelöléseit. A logikai kapuk kombinációjával nagyon sok funkció ellátható. Ilyen áramkörök sokasága építi fel például a számítógépekben található processzorokat is. Egy egyszerű összeadó áramkör látható a 2. ábrán. A későbbiekben további példákat is mutatunk.

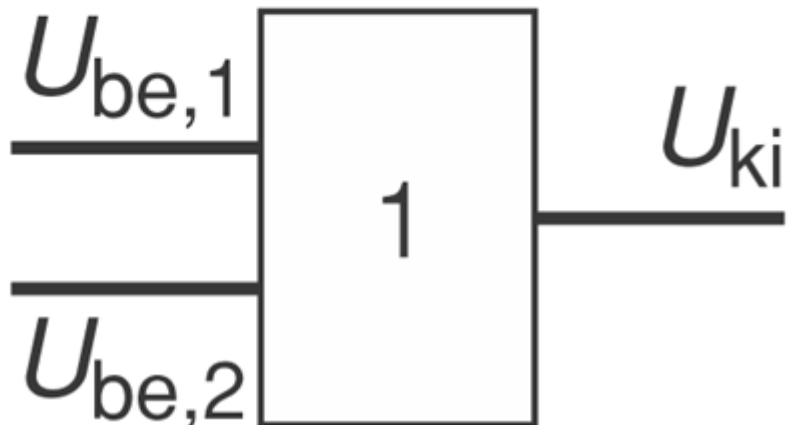
a



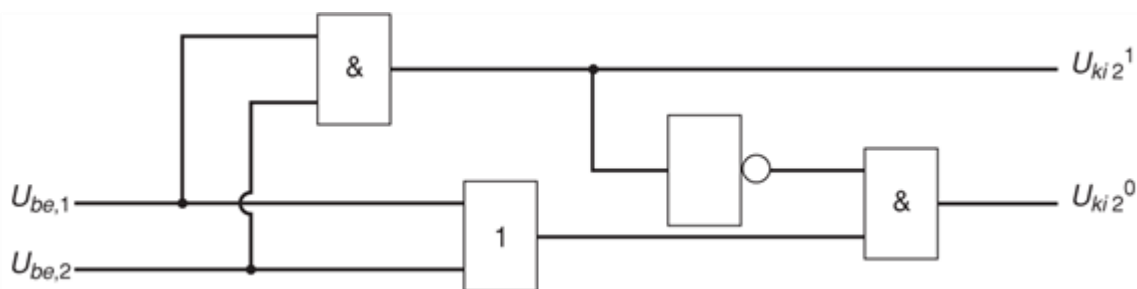
b



c



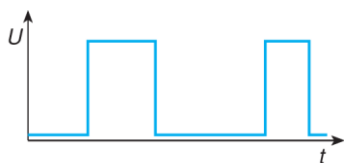
1. ábra. Kapuáramkörök jelölései: a) NEM b) ÉS c) VAGY kapu



2. ábra. két egybités számot összeadó logikai áramkör. A két egymástól független digitális bemenőjel U_{be1} és U_{be2} összege egy kétbités digitális jellel adható meg, ezért kell két kimenőfeszültség (Például: $1 + 1 = 2$, ami kettes számrendszerben két számjeggyel írható le: 10 azaz $1 \cdot 2^1 + 0 \cdot 2^0$)

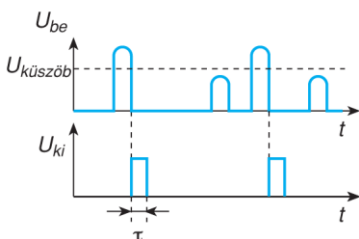
2. Multivibrátorok

A multivibrátorok digitális jelet, vagy másképpen négyszögjelet állítanak elő. A kimenőjel tehát két diszkrét feszültséget vehet fel, amelyek közti váltás nagyon gyors. (3. ábra) A kétféle kimenőfeszültséghez szokás a multivibrátor két állapotát rendelni. Ha a kimenőfeszültség alacsony, akkor a multivibrátor alapállapotban van, magas kimenőfeszültség esetén pedig aktivált állapotról beszélünk. A multivibrátoroknak három fajtájuk van: monostabil, astabil, és bistabil multivibrátor.



3. ábra. Négyszögjel

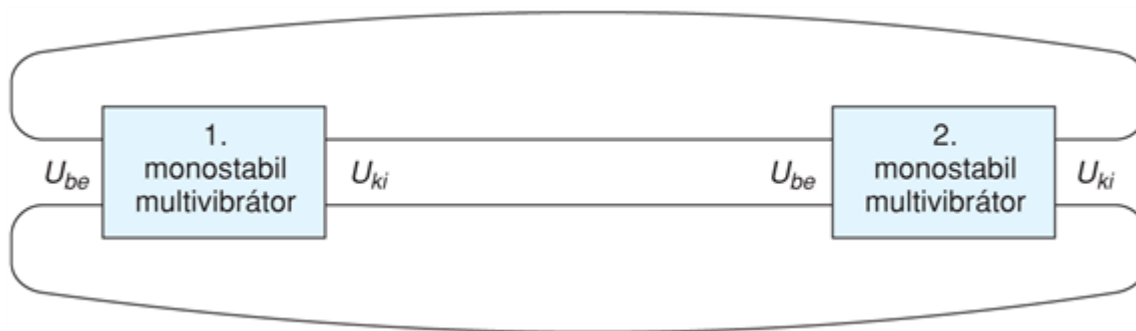
A *monostabil multivibrátor* hasonlít egy integrál-diszkriminátorra (lásd VII.1.5.3.). Ha a bemenőfeszültség elér egy küszöbértéket, akkor a kimeneten egy meghatározott hosszúságú impulzus jelenik meg (4. ábra). A diszkriminátortól eltérően most kezdődjön a kimenőjel a bemenő impulzus végén az ún. lefutó élnél. A monostabil név arra utal, hogy a multivibrátornak egy stabil állapota van, a másik, az aktivált állapot csak bizonyos (τ) ideig áll fenn, ezután a multivibrátor visszatér az alapállapotba. Szemléletesen azt mondhatjuk, hogy a monostabil multivibrátor egy intelligens emberhez hasonlít, aki ha elég hangosan szólnak hozzá, a kérdés elhangzását követően egy rövid és tömör választ ad, majd elhallgat.



4. ábra. A monostabil multivibrátor működése

Ha két ilyen multivibrátort az 5. ábra szerint összekapcsolunk, akkor analógiánk szerint a két intelligens ember beszélgetni kezd, hiszen az egyik beszéde a másik választát váltja ki, aminek végén az első érzi úgy hogy válaszolnia kell és így tovább. Ehhez természetesen az is kell, hogy a kezdetben valamelyikük megszólaljon, de ez az elektronikus verzióban a bekapcsoláskor biztosítva van. A két monostabil multivibrátorból a leírtak szerint összerakott áramkört *astabil multivibrátornak* nevezzük, hiszen egy stabil állapota sincs, folytonosan oda-vissza ugrál a két állapot között. Nincs szüksége bemenőfeszültségre sem, a kimenőjelnek pedig bármelyik monostabil

kimenetét használhatjuk. Folytonos impulzussorozatok előállítására használják. Ilyeneket alkalmaznak ingerterápiás célból, ill. szívritmus-szabályzóknak (pacemaker) (IX/4. alfejezet).

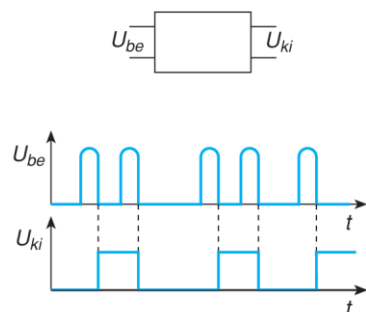


5. ábra. Astabil multivibrátor létrehozása két monostabilból

A *bistabil multivibrátor*nak mindkét állapota stabil. Bemenő impulzus hatására a multivibrátor átmegy a másik állapotba, és ott marad a következő impulzus érkezéséig. Ha jól megfigyeljük a 6. ábrát, akkor rájöhethetünk, hogy két bemenőimpulzus hatására kapunk egy kimenőimpulzust. A bistabil multivibrátor tehát az impulzusszám felezésére is használható. Ennél fontosabb alkalmazást kapunk azonban, ha több bistabil multivibrátort egymás után kapcsolunk és ún. bistabil láncot alkotunk belőlük. A 7. ábrán a működés könnyebb szemléltethetősége céljából a láncot úgy rajzoltuk fel, hogy (az eddigiekkel ellentétben) a multivibrátorok bemenete a jobb oldalon, kimenetük pedig a bal oldalon van.

A kimenőfeszültség alacsony értékét 0-val, a magasat 1-el jelölve, a három kimenőjel éppen a bemeneten megjelent impulzusszám kettes számrendszerbeli alakját adja meg (párhuzamos BD kódban).

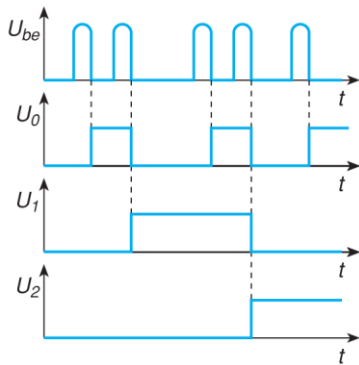
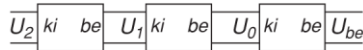
Egy n bistabil multivibrátorból álló láncnak összesen 2^n állapota van, és ezért 0-tól $2^n - 1$ -ig tud számolni. A számokat kettes számrendszerben kapjuk meg. Mivel a kettes számrendszerben ábrázolt számot az ember nem tudja egykönnyen értelmezni, ezt át kell alakítani 10-es számrendszerbeli számmá. Az átalakítást logikai kapuáramkörökből kialakított összetett áramkör végzi.



6. ábra. A bistabil multivibrátor működése

7.1. táblázat -

impulzusszám	0	1	2	3	4	5
$U_0 (2^0)$	0	1	0	1	0	1
$U_1 (2^1)$	0	0	1	1	0	0
$U_2 (2^2)$	0	0	0	0	1	1
decimális érték	0	1	2	3	4	5



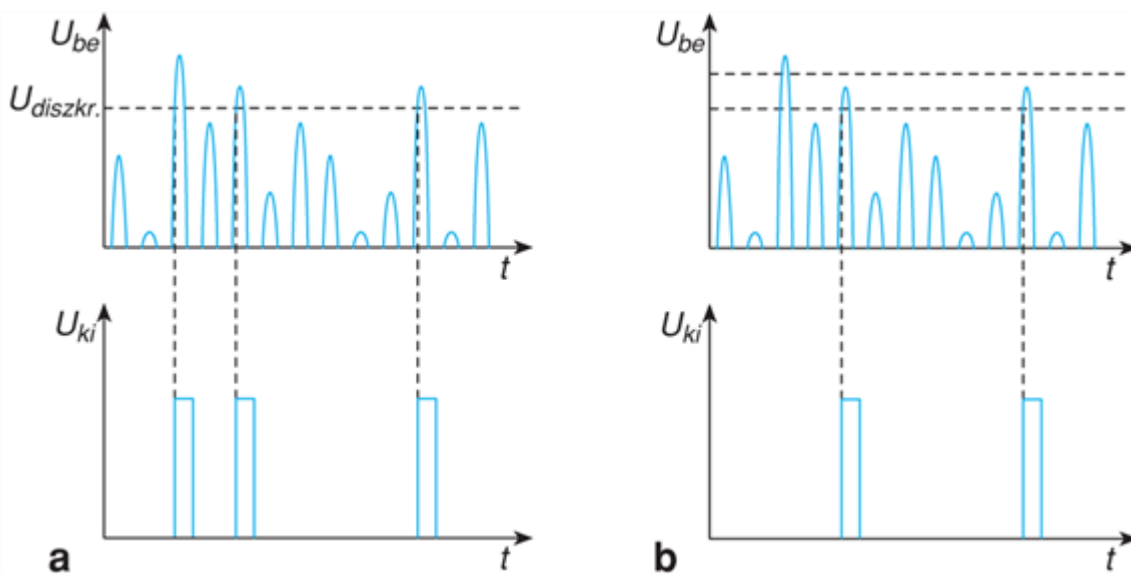
7. ábra. A bistabil számlálólánc működése. A táblázat az egyes kimenetekhez rendelhető értékeket tartalmazza az impulzus után. Az utolsó sora pedig a bináris számok alapján számított decimális értéket

1.5.2. VII/1.5.2. Zajsűrés

Az analóg jelek formálásának két leggyakoribb módja a zajsűrés és a az impulzusjelek szelektálása. A zajsűrés akkor hatásos igazán, ha a zaj ismert alakú vagy frekvenciájú (pl. a hálózathoz tartozó 50 Hz-es zavarjel). Ilyenkor a jelfeldolgozó láncba beiktatható egy olyan áramkör, amelyik például az 50 Hz-es komponenseket kiszűri. Tudnunk kell azonban, hogy a legjobb szűrőáramkörök is valamilyen frekvenciasávot szűrnék ki, nem pedig egy adott frekvenciát. Ezáltal a jel bizonyos komponensei (l. Fourier-felbontás) is eltávolításra kerülnek, azaz a jel is torzul. Manapság az ilyen jelformálás sokkal hatékonyabban végezhető a digitalizált jelen, aminek az az előnye is megvan, hogy a digitálisan tárolt jelen többféle zajsűrés eljárást is kipróbálhatunk, sőt a zajos jelet analizálva megtudhatjuk, hogy a zaj milyen tulajdonságú (pl. milyen frekvenciájú), és ennek tudatában hatékonyabb zajsűrés eljárást használhatunk.

1.5.3. VII/1.5.3. Impulzusjelek szelektálása

A jelátalakítás másik fajtája az impulzusjelek szelektálása. A szelektáló áramkör neve a diszkriminátor. Két fajtája van az integrál- és a differenciál-diszkriminátor. Működésüket (az erősítőhöz hasonlóan) csak „kívülről” fogjuk megismerni, tehát csak azzal foglalkozunk, hogy adott bemenőjelre a berendezés milyen kimenőválaszt ad. Ezt legjobban a VII.32. ábra szemlélteti.

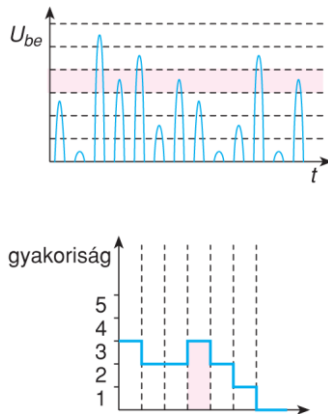


VII.32. ábra. Az integrál-diszkriminátor a) és a differenciál-diszkriminátor b) működése

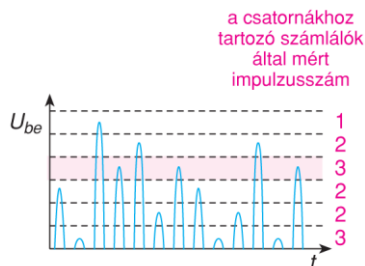
A bemenetre jutott impulzusjelek hatására az **integrál-diszkriminátor** kimenetén akkor jelenik meg kimenőimpulzus, ha a bemenő impulzus nagysága meghalad egy előre beállított **küszöbfeszültség szintet**. A kimeneten megjelenő impulzus nem egyszerűen a bemenőimpulzus küszöb feletti része, hanem mindig azonos amplitúdójú és hosszúságú (uniformizált) impulzus. A bemeneten megjelenő jelből tehát az integrál-diszkriminátor kiszűri a beállított küszöbfeszültségnél kisebb impulzusokat. A zajimpulzusok gyakran kisebb amplitúdójúak mint a jelimpulzusok, ezért az integrál-diszkriminátor javíthat a jel/zaj arányon.

A **differenciál-diszkriminátor** esetén két feszültséget, illetve ezáltal a köztük eső feszültségtartományt, az ún. **csatornát** jelöljük ki. A készülék csak azokra a bemenőjelekre ad válaszipulzust a kimeneten, amelyek amplitúdója a csatornába esik. A kimenőimpulzus itt is uniformizált. Ha a csatorna helyzetét változtatva azzal mintegy letapogatjuk a bejövőimpulzusok feszültségtartományát, a kapott kimenőimpulzusokat adott ideig számoljuk és az impulzusszámot a beállított feszültség függvényében ábrázoljuk, akkor az impulzusok nagyság szerinti eloszlását kapjuk meg (VII.33. ábra).

Ha differenciál-diszkriminátorral mérünk, akkor az impulzusok nagy részét nem hasznosítjuk. Pl. a VII.34. ábrán, ha a szürkével jelölt csatornát használjuk, akkor a bejövő 13 impulzusból csak 3-ra kapunk kimenőjelet. A diszkriminátort követő számláló tehát 3 impulzust számol meg, a többi impulzust nem detektáljuk. Ezután a diszkriminátort eltolva újabb impulzussorozaton mérünk, amelynek megint csak egy kis része esik a mérőcsatornába. A módszer hátránya a lassúsága, hiszen az impulzusok nagy részét nem hasznosítjuk, ezért hosszabb ideig kell mérni. Ezen a gondon segítenek a modern **sokcsatornás analízátorok**. A sokcsatornás analízátor úgy képzelhető el, mint sok differenciál-diszkriminátor és sok számláló összessége. A differenciál-diszkriminátorok csatornáikkal lefedik a bemenő jelfeszültség teljes tartományát. (Például a VII.34. ábrán jelölt esetben a bemenőfeszültség tartományát hat részre osztottuk, amihez hat differenciál-diszkriminátor tartozik.) Ezáltal bármekkora is a bejövő impulzus, beleesik valamelyik diszkriminátor csatornájába, és az kimenőjelet szolgáltat. Mindegyik diszkriminátorhoz tartozik egy számláló. A beérkező impulzust tehát mindig az a számláló számolja meg, amelyhez tartozó csatornába esett. Így minden impulzust hasznosítottunk és a számlálóokban rögtön előállnak a gyakoriságtételek.



VII.33. ábra. Gyakorisági eloszlás készítése differenciál-diszkriminátorral. A felső ábrán a differenciál-diszkriminátor bemenőimpulzusai láthatók, az alsó ábrán pedig a csatorna pásztázásával kapott gyakorisági eloszlás. (A beszűrkített csatornához tartozó gyakoriság az eloszláson is szürke a szemléletesség kedvéért.) Az ábra egy kicsit „csal” abban az értelemben, hogy valójában minden csatornabeállítással új impulzussorozaton mérünk. Mivel az impulzusok az egymást követő mérésekben ugyanolyan eloszlásúak, ezért a kapott eloszlásfüggvény így is meghatározható



VII.34. ábra. A sokcsatornás analízátor elve

1.6. VII/1.6. Megjelenítők

Az analóg jelfeldolgozó lánc utolsó eleme a megjelenítő. Impulzusjelek esetén ez leggyakrabban egy **számláló**, amely előre beállítható ideig számolja az impulzusokat, és **az impulzusszámot megjeleníti**. Mivel a diszkriminátorból kijövő uniformizált impulzusjelek tulajdonképpen már digitális jelnek tekinthetők, a számlálásuk is digitális áramkörökkel történik, amelyekről később szólunk.

Analóg jelek megjelenítésére szolgálhat egy **mechanikus író**, ahol a papír felett a jelfeszültséggel arányosan elmozduló toll rajzolja fel a jelet. Ilyen írókat találunk az EKG készülékek egy részében az EKG-görbe rögzítése céljából. Ha a jelet nem akarjuk megörökíteni, csak figyelni, vagy a jel nagyon gyorsan változik, és a mechanikus író tehetetlensége révén nem képes azt felrajzolni, akkor a jel megjelenítésére a katódsugárcsővet használhatjuk.

Bár a **katódsugárcső** alkalmazása a digitális technika, ill. a modern TFT- képernyők (lásd később) elterjedésével fokozatosan háttérbe szorul, úgy gondoljuk, hogy rövid tárgyalása segíti az újabb megjelenítők működési elvének megértését is.

1.6.1. VII/1.6.1. Katódsugárcső

A katódsugárcső (VII.35. ábra) egyik végében elektronok lépnek ki a fűtőfeszültséggel ($U_{\text{fűtő}}$) felizzított katódból, és vákuumban az anódfeszültség ($U_{\text{anód}}$) hatására az anód irányába gyorsulnak. Az anód kiképezése olyan, hogy egy vékony elektronsugár tovább tud haladni a másik oldalon elhelyezkedő ernyő felé. Ez az elektronsugár a katódsugár, amiről a megjelenítő a nevét kapta. A katódsugárcső ernyője lumineszkáló anyaggal van bevonva, amelyben az elektronok becsapódása fényfelvillanást hoz létre. Mivel az elektronok folyamatosan érkeznek, az elektronsugár becsapódási helyén egy fénylő pontot látunk. Tulajdonképpen az elektronsugár olyan, mint egy nagyon könnyű mutató (vagy toll), amit nagyon gyorsan lehet mozgatni. A mozgatáshoz elektromos teret használunk, amelyet a katódsugárcsőben elhelyezett eltérítő lemezpárokra kapcsolt feszültséggel állítunk elő. (Megjegyezzük, hogy a katódsugár eltérítése történhet mágneses mezővel is, pl. számítógéppanel, TV-képcső.) A katódsugárcsőben két eltérítő lemezpár helyezkedik el. A függőleges lemezek a rájuk kapcsolt feszültség hatására vízszintes irányban térítik el a katódsugarat. Az eltérítés arányos a kondenzátorra kapcsolt feszültséggel.

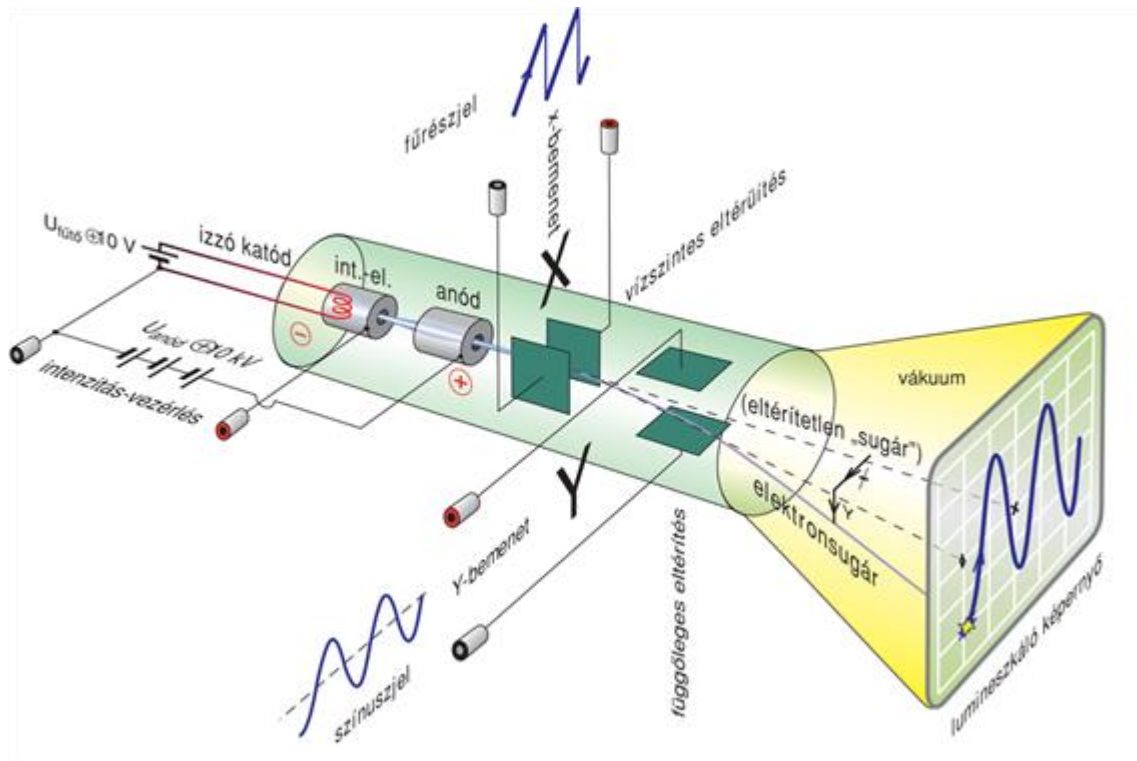
Ha az idő függvényében egyenletesen növekvő feszültséget kapcsolunk a vízszintesen eltérítő lemezekre (x bemenet), akkor a képernyőn fénylő pont egyenletes sebességgel vízszintesen végigvándorol a képernyőn. (Az eltérítő feszültség a maximumát elérve ugrásszerűen visszaesik a kezdő értékére, majd újból egyenletesen növekszik, fűrészfogszerű alakot öltve. l. VII.35. ábra). Ilyen fűrészfeszültség hatására a fénylő pont vízszintes pozíciója arányos az idővel, mivel állandó sebességgel vándorol. Tehát a vízszintes tengelyünk tulajdonképpen az időtengely.

Ezek után a vizsgált jel megjelenítéséhez nem kell más, mint hogy azzal a katódsugár függőleges eltérítését vezéreljük, azaz a vízszintesen elhelyezkedő, de függőleges irányba eltérítő lemezpárra kapcsoljuk (y bemenet). A két elmozdulás eredőjeként a vizsgált jel az idő függvényében kirajzolódik a katódsugárcső képernyőjén.

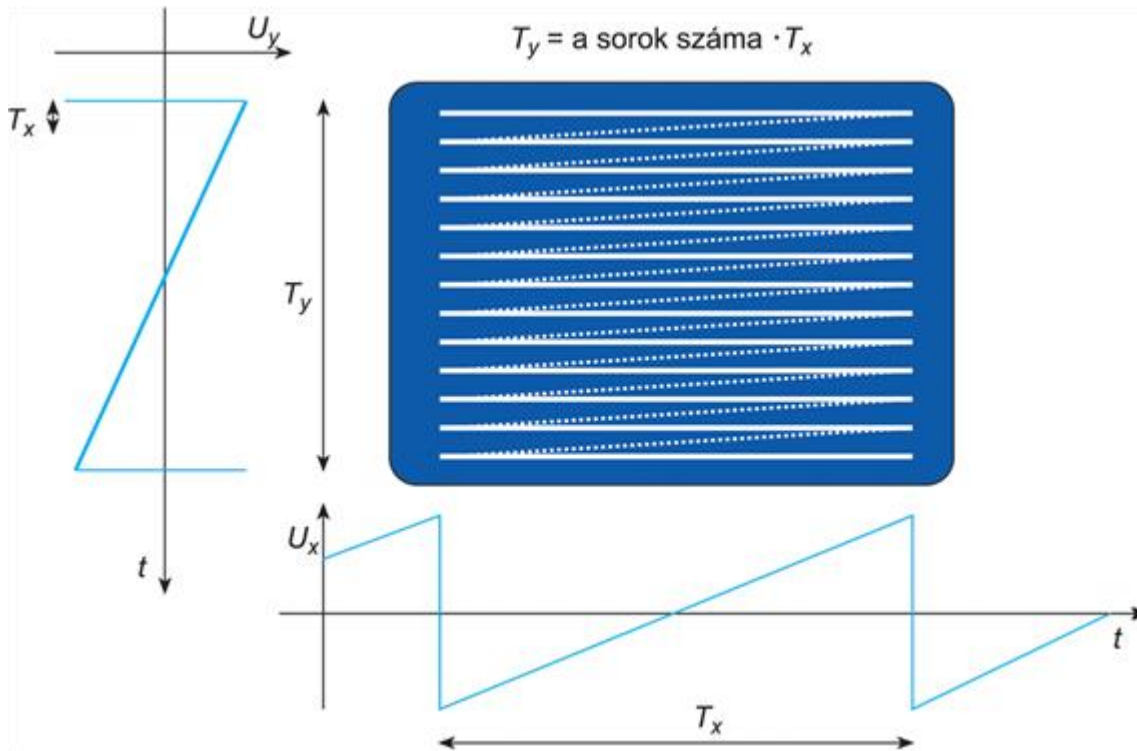
Ilyen működtetés esetén a kirajzolt jel fényessége nem hordoz információt, az intenzitást úgy állítjuk be, hogy a jel jól látható legyen. A katódsugárcső fontos jellemzője az érzékenység, ami azt adja meg, hogy 1 V eltérítőfeszültség hatására hány mm-t mozdul el a katódsugár lumineszkáló foltja a képernyőn.

A katódsugárcső képek megjelenítésére is alkalmas. Ilyenkor az x irányú lemezpárra kapcsolt fűrészfeszültség mellett az y irányú lemezpárra fűrészfeszültséget kapcsolnak (lásd VII.36. ábra). A világító pont így sorról sorra végigpásztazza a teljes képernyőt. A (kétdimenziós) kép a világító pont fényességének változtatásával (intenzitásvezérlés) valósul meg. A képi információt az intenzitás vezérlésére szolgáló jel hordozza, amit az intenzitás vezérlő elektródára kell kapcsolni (lásd a VII.35. ábrát).

Színés képet a színkeverés alapelvei szerint állíthatunk elő (lásd színkeverés IV/2.2.7. rész). Ennek megfelelően a képernyőt úgy alakítják ki, hogy minden képelem három különböző színben (piros, zöld, kék) lumineszkáló részből áll. A három alapszín intenzitásának vezérlését három katódsugár segítségével külön-külön oldják meg, ily módon minden képpontban tetszőleges szín kikeverhető.



VII.35. ábra: A katódsugárcső felépítése



VII.36. ábra. Képmegjelenítés katódsugárcső segítségével. A vízszintes fehér vonalak a képsorokat jelölik, a szaggatott vonalak pedig a visszafutó elektronnaláb mozgásának útját. Ez utóbbiak nem látszanak, mert az elektronnalábot kioltják a visszafutás idejére.

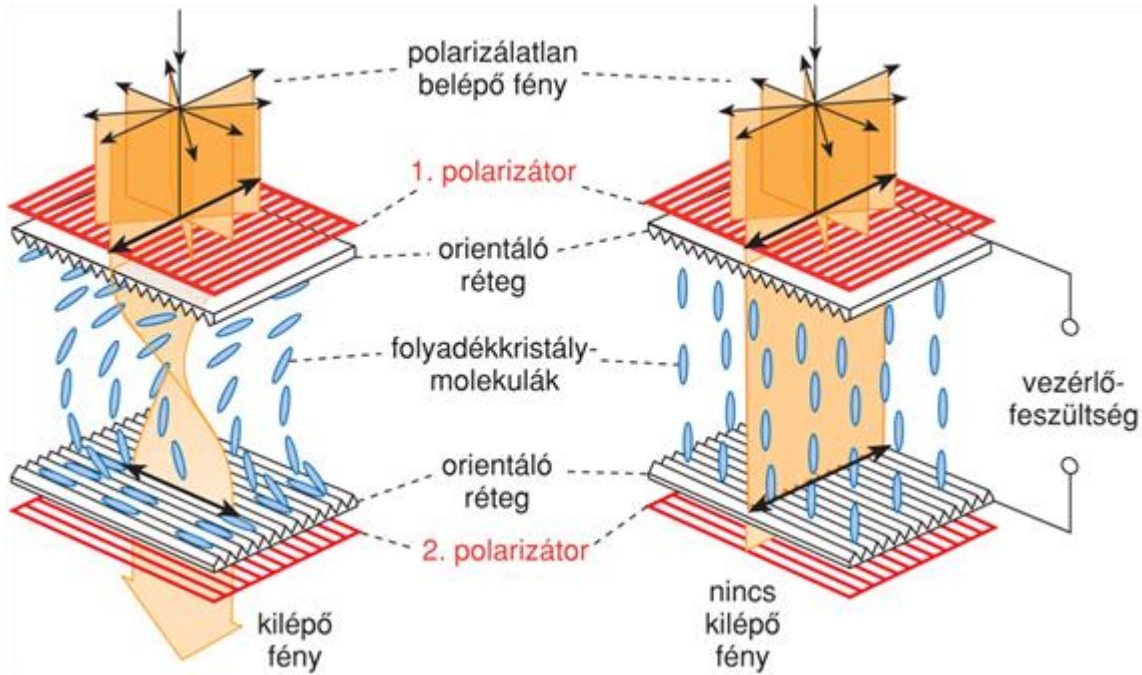
1.6.2. VII/1.6.2. Folyadékkristályos képernyők (LCD) működése

Mint említettük, a katódsugárcsöves képmegjelenítő módszert egyre jobban háttérbe szorítják a folyadékkristályos képernyők (Liquid Crystal Display: LCD, lásd VII.37. ábra). Legfőbb előnyük a lapos kivitel és a káros sugárzástól való mentesség.

A folyadékkristályok optikai tulajdonságai elektromos erőterrel befolyásolhatók (lásd I/3.4.2. rész, elektrooptikai jelenség), így közvetlenül alkalmasak például egy képpont fényáteresztő képességének megváltoztatására. Az LCD- kijelzők nem rendelkeznek saját fénnel, így annak átvilágítását szükség esetén a panel mögött elhelyezkedő fehér színű fluoreszcens háttérfény biztosítja. A VII.38. ábra az LCD-kijelzők (egy elterjedt típusának: TN, Twisted Nematic, azaz csavart nematikus) egyetlen elemi cellájának működését mutatja be.



VII.37. Egy tipikus LCDmonitor



VII.38. ábra. Az LCD-képernyő egy cellájának működési elve

A folyadékkristály két átlátszó műanyag film vagy üveglap közötti néhány μm vastagságú teret tölti ki. A filmek felülete belül finoman, egy irányban rovátkolt, ez a finom szerkezet meghatározza a hosszúkás folyadékkristály-molekulák irányultságát a film közelében. Az alsó és a felső film rovátkái egymásra merőlegesek, ezért alapállapotban a molekulák egy negyed csavarvonaltól helyezkednek el (VII.38a ábra.). A filmek alatt, illetve fölött még egy-egy keresztezett állású polarizátor réteg helyezkedik el, amelyet rácsos ábrázolással szemléltetünk.

A háttérfényből az első polarizátor csak az első film rovátkolásának megfelelő polarizációs irányú fényt enged át. A cella alapállapotában a csavarvonaltól elrendeződött folyadékkristály-molekulák saját orientáltságuknak megfelelően elfordítják a fény polarizációs síkját, így az a keresztezett második polarizátoron keresztül gyengítetlenül hagyja el a kijelzőt.

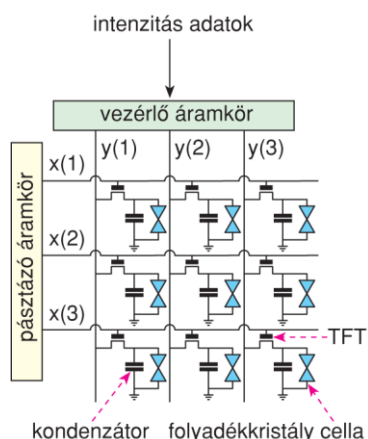
A filmek külső felülete a képelem területén vezető réteggel van bevonva, amely rendkívül vékony, ezért átlátszó. Amennyiben ezen elektródákra feszültséget kapcsolunk, a folyadékkristály molekuláinak orientációja a VII.38b ábra szerint alakul. Ez esetben a polarizált fény síkja a folyadékrétegben változatlan marad ezért a második (keresztezett irányú) polarizátor a fényt elnyeli. A kijelző cellája tehát sötét lesz.

Az elektródokra adott feszültség változtatásával és ezáltal a fény polarizációs síkjának elfordításával a kilépő fény intenzitása folyamatosan szabályozható.

A színes LCD-megjelenítők egy képeleme három cellából áll, melyek különböző színű (piros, zöld, kék) színszűrővel vannak lefedve. Az ezeken áthaladó eltérő intenzitású fények kombinációjával tetszőleges szín előállítható, csakúgy, mint a katódsugárcsőves színes képernyőknél.

Az LCD-k egyik hibája a viszonylag lassú működésükből származott (lásd példa). Ezen segít új megoldásként a vékonyréteg-tranzisztor (Thin Film Transistor: TFT). A VII.39. ábrán látható módon a vezetékek kereszteződésében egy vékonyréteg-tranzisztor (TFT) és egy kondenzátor található, amely az adott LCD-cella elektródjaihoz kapcsolódik. Egy tetszőleges sorra, illetve oszlopra kapcsolt feszültségimpulzus a tranzisztort bekapcsolja és feltölti a kondenzátort. Egy sort kijelölve az oszlopvezetékek egyedi feszültségeivel egy egész képsor azonos időben állítható be (ez az előbbi példa alapján körülbelül ezerszeres sebesség növekedést jelent a működésben). Az egész képet soronként végigpásztázva az egész kép előállítható. Ez a kép azonban rövid időközönként frissítésre szorul, hiszen a kondenzátorok csak kis ideig tartják meg töltéseiket.

A TFT LCD-képernyők előnye tehát az, hogy gyorsak és kontrasztosabb képet tudnak előállítani, mint TFT nélküli elődjük.



VII.39. ábra. Az egyes cellák x, és y irányú vezetékeken keresztül vezérelhetők

VII.1. példa. Egy nagy felbontású színes LCD képernyő igen nagy számú (több millió) cellát tartalmaz. Természetesen ezek közvetlen vezérlése ugyanennyi különálló vezetékkel követelne meg, aminek megvalósítása gyakorlatilag lehetetlen feladat. Ezért a különböző cellákat időben egymás után vezérlik egy X-sor, és egy Y-oszlop irányú vezetékrendszer segítségével (lásd VII.39. ábra). (Ezzel a módszerrel egy jó felbontású (például 1024.768) színes képernyő esetében az $1024 \cdot 768 = 789504$ cella csupán $1024 + 768 = 1792$ vezetékkel vezérelhető, ami technikailag már kivitelezhető.)

1.7. VII/1.7. Terápiás célú elektromos készülékek felépítése és működésük alapjai

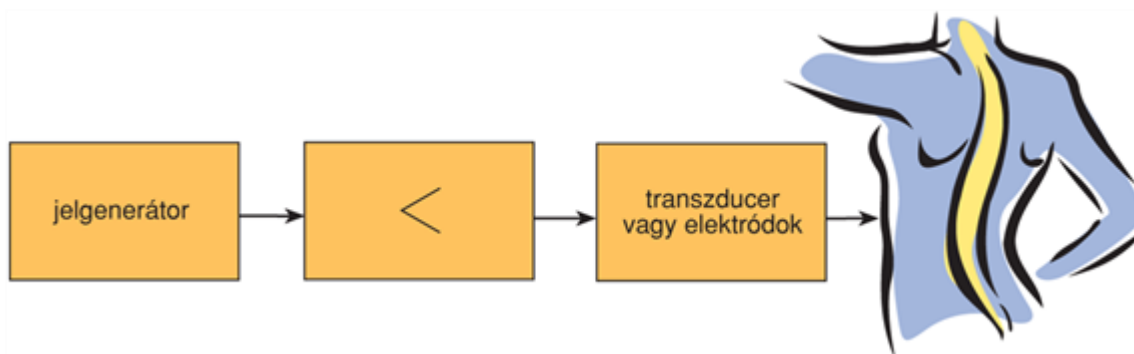
A terápiás célú készülékek esetén valamilyen jelet szeretnénk a páciensre vezetni. A jel forrása az esetek többségében egy elektromos áramkör. A jel paramétereit (pl. amplitúdó, frekvencia stb.) a jelgeneráló egységen mi állíthatjuk be. A jelet szükség esetén erősíteni kell. Ha terápiás célra nem elektromos jelet használunk, akkor szükség lehet transzducerre, ami az elektromos jelet nem elektromos jellé alakítja. Összességében tehát a jelfeldolgozó lánc fordítottjához hasonló összeállítást kapunk (VII.40. ábra).

Periodikus impulzusjel-sorozat jel előállítására astabil multivibrátorral lehetséges. Szinuszelet oszcillátorral állíthatunk elő, aminek két fő alkotóeleme a pozitívan visszacsatolt erősítő és a rezgőkör (VII.41. ábra).

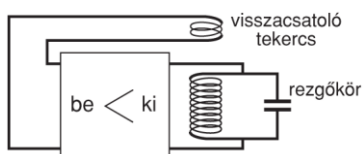
Már a VII/1.4.3. részben említettük, hogy a pozitívan visszacsatolt erősítő bizonyos feltételek fennállása esetén oszcillációba kezd. A frekvenciát az határozza meg, hogy melyik frekvencián volt az erősítés maximális. Most, a rezgőkör beiktatásával, megváltoztatjuk a visszacsatolt erősítő karakterisztikáját, és így a rezgőkör rezonanciafrekvenciáján lesz az erősítő + rezgőkör együttes átvitele maximális. A pozitív visszacsatolást a rezgőkör tekercsével indukzív csatolásban levő (tehát azzal együtt egy transzformátort alkotó) visszacsatoló tekercsrel érjük el. A pozitív visszacsatolás növelésével tehát a rezgőkör saját frekvenciáján következik be az oszcilláció.

Az oszcillátor működését vizsgálhatjuk a rezgőkör szempontjából is. Ekkor a rezgőkör a rezonanciafrekvenciáján rezeg. A rezgés amplitúdója a veszteségek miatt csökkenne, de az erősítő kimenetéről mindig pótlódik az elvesztett energia, ezért a rezgés amplitúdója végül is állandó marad. Ebből a nézőpontból a visszacsatoló tekercsben indukálódott feszültség, amit az erősítő bemenetére vezetünk mintegy vezényli az energia-utánpótlást, hogy az a megfelelő ütemben érkezzen. (Gondoljunk a meg-meglökött gyermekhintára.)

Az oszcillátor kimenőfeszültsége legegyszerűbb esetben az erősítő kimenőfeszültsége. Bizonyos esetekben az oszcillátor kimenőfeszültségét indukzív csatolással veszik le az oszcillátorról. Ekkor egy harmadik tekercset helyeznek el úgy hogy az is transzformátort alkotson a rezgőköri tekercsrel, így ebben a harmadik tekercsben indukálódik a kimenőfeszültség. Ilyet használnak (főleg érintésvédelmi okból) a hőterápiás berendezéseknél.



VII.40. ábra. Terápiás célú elektromos berendezések elvi vázlata



VII.41. ábra. Szinuszoszcillátor

VII.4. megjegyzés. Léteznek bonyolultabb diagnosztikai berendezések, amelyek először egy jelet vezetnek a páciensre, majd detektálják az erre adott választ. Ilyen például az ultrahang-diagnosztika, ahol a páciensbe vezetett ultrahang visszaverődését detektáljuk, vagy az objektív audiometria, ahol egy impulzusszerű hangra válaszként adott agyi elektromos tevékenységet mérjük. Ebben az esetben az itt terápiásnak nevezett lánc szolgáltatja a páciensre adott jelet (ultrahangimpulzus, v. hangimpulzus), a kapott választ (visszavert ultrahang, ill. agyi elektromos jelek) a fejezet elején részletesen tárgyalt jelfeldolgozó lánc végzi.

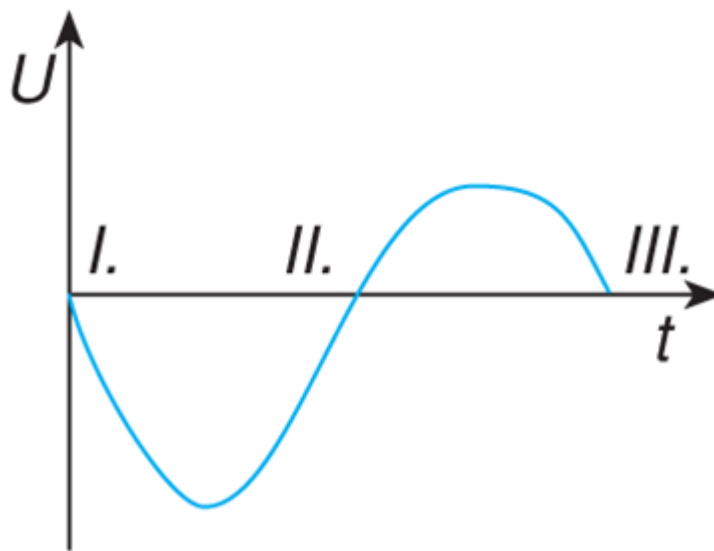
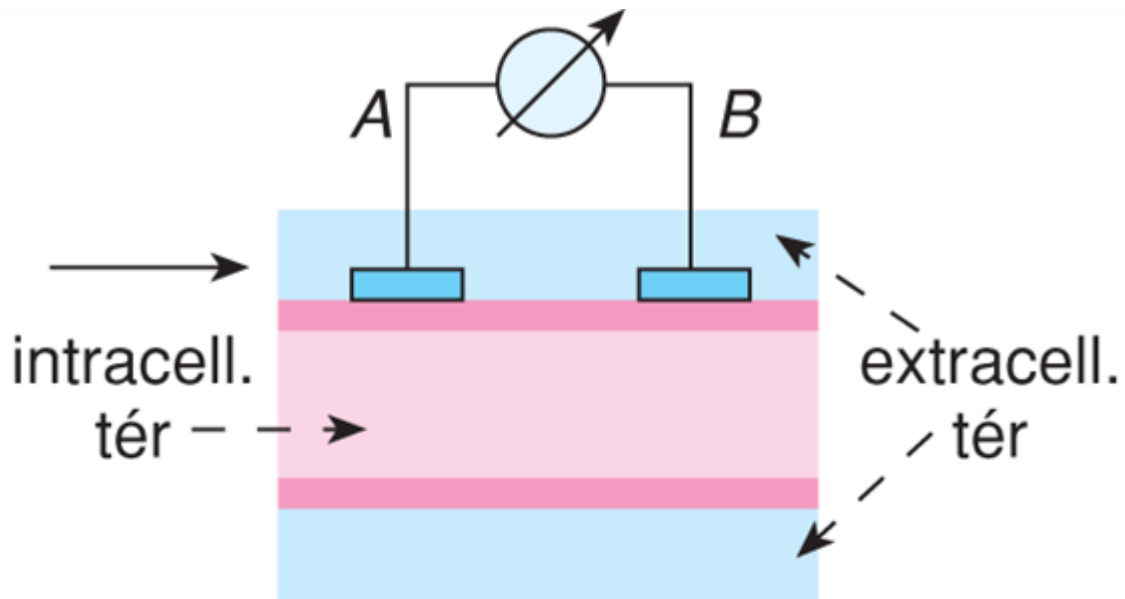
2. VII/2. Testfelszíni elektromos jelek feldolgozása

2.1. VII/2.1. Elektrokardiográfia

Annak ismeretében, hogy a sejtmembrán nyugalmi és az akciós potenciállal rendelkezik, megalapozottnak érezzük, hogy a szív (és minden más működő szerv) működését elektromos jelek kísérik. A szív automáciával rendelkező ingerképző helyéről tovaterjedő impulzusok indulnak el, amelyek először a pitvarok, majd a kamrák összehúzódását idézik elő. Ezen jelenségeket kísérő elektromospotenciál-változások észlelhetők a test felületén elhelyezett elektródák és kellően érzékeny feszültségmérő berendezés segítségével. Az **elektrokardiogram** a szívizomrostok eredő (difázisos) akciós potenciálja a testfelszínen regisztrálva.

2.1.1. VII/2.1.1. Egy rost akciós potenciálja

Az egyik esetben egy intracellulárisan és egy extracellulárisan elhelyezett elektród közötti potenciálkülönbséget mérjük. Így kapjuk a korábban már tárgyalt akcióspotenciál-görbét (III/4.4. fejezet). Ezt szokták *monofázisos akciós potenciálnak* is nevezni. A másik lehetőség, hogy mindkét elektródot extracellulárisan helyezik a sejt felszínére egymástól bizonyos távolságra, és a köztük lévő potenciálkülönbséget mérik. Ezt *difázisos akciós potenciálnak* nevezik. A VII.42. ábrán egy sejt felületén a nyíl irányában tovaterjedő ingerület esetén mért difázisos potenciált mutatjuk be. A görbének az I ponttól a negatív csúcsig terjedő szakasza az A elektród alatti membránterület depolarizációjára utal. A negatív csúcstól a II. pontig a B elektród alatt is bekövetkezik a depolarizáció. A II. ponttól a pozitív csúcsig az A elektród alatti területen végbemegy a repolarizáció. A pozitív csúcstól a III. pontig a repolarizáció a B elektród alatt is lezajlik és helyreáll a nyugalmi állapot.



VII.42. ábra. Difázisos akciós potenciál mérése és a mérés eredménye

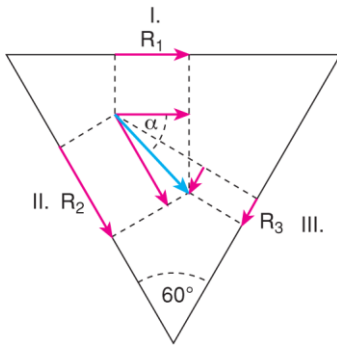
2.1.2. VII/2.1.2. Bipoláris elvezetések

Elvileg a testfelszín bármely két pontja között potenciálkülönbség mérhető. A gyakorlatban azonban az eredmények összehasonlíthatósága érdekében meghatározott helyekre, a végtagokra és a mellkas bizonyos pontjaira helyezik az elektródokat. A mellkasi elektródok szokásos helyét a VII.43. ábra mutatja.

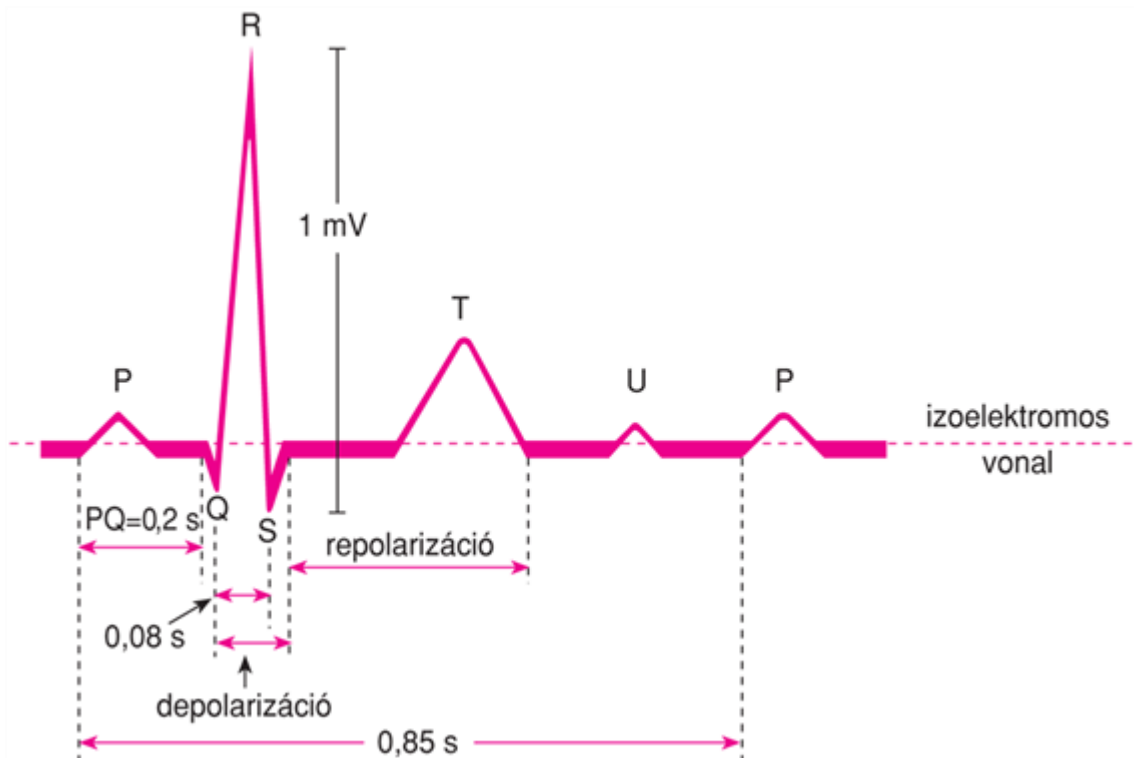


VII.43. ábra. Mellkasi elektródok szokásos elhelyezése

Ha két végtagra elektródokat helyezünk, az elektródok közötti képzeletbeli vonalra kívül a szív ingerületi állapota által előidézett erőtérváltozás, amelyet regisztrálhatunk. Ha a leggyakoribb jobb kar (JK), bal kar (BK), bal láb (BL) elvezetést alkalmazzuk, a kívülő erőtér pillanatnyi komponenseit úgy rajzolhatjuk fel, mint egy egyenlő oldalú háromszög – az ún. Einthoven–Waller-féle háromszög – közepén helyet foglaló vektor vetületeit, ahogy azt a VII.44. ábra mutatja. A jelek időbeli változása szolgáltatja az EKG-görbét, ahogy a VII.45. ábrán látható.



VII.44. ábra. Az Einthoven–Waller-féle háromszög. Az R_1 , R_2 , R_3 vektorok a háromszög csúcsainak megfelelő elektródelhelyezések esetén a háromféle vetületben azonos időpontban mérhető feszültségkülönbség nagyságát és polaritását fejezik ki



VII.45. ábra. EKG-hullámok didaktikus ábrázolása

Mint a görbe alakja is mutatja, találunk olyan szakaszokat is, ahol nincs potenciálkülönbség, a görbe az alapvonalon, az izoelektromos szinten marad (VII.45. ábra). Ez nem jelenti azt, hogy a szívnek ilyenkor nincs elektromos aktivitása, hanem a pitvar, ill. a kamra teljes depolarizáció vagy a teljes repolarizáció állapotában van.

A hagyományos JK-, BK-, BL-elvezetést római számokkal szokás jelölni. A JK–BK-elvezetés az I., a JK–BL- a II. és a BK–BL- a III. elvezetés. A többfajta elvezetésnek az az értelme, hogy azok különböző irányból „látják” a szívet. Ezek a jelek természetesen különböző nagyságúak attól függően, hogy a szív elektromos főtengelye, illetve az azt képviselő vektor frontális vetülete az Einthoven-háromszögben hogyan helyezkedik el.

Ezek alapján értelmezhető az a tapasztalati megfigyelés, amit Einthoven– Waller-szabálynak is neveznek, hogy az R_1 - és az R_3 -hullámok maximumainak összege az R_2 -hullám maximumával egyezik meg, azaz

$$R_1 + R_3 = R_2 \cdot \text{(VII.16)}$$

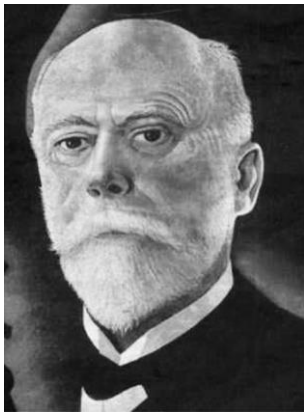
Ugyanis, ha az R -vektort tekintjük, amely a szív elektromos főtengelyét képviseli az R -hullám során, és elhelyezzük az egyenlő oldalú Einthoven-háromszögben (VII.44. ábra) az előbbi tapasztalati törvényt trigonometrikus azonosságnak adódik:

$$R \cos \alpha + R \cos (120^\circ - \alpha) = R \cos (60^\circ - \alpha)$$

(VII.17)

Ugyanis az egyes elvezetések úgy foghatók fel, mint az R vektor vetületei.

A különböző elvezetésekben észlelt, különböző magasságú görbék önmagukban is diagnosztikai információt hordoznak. A különböző elvezetésekben észlelt feszültségértékek a szív ingerületvezető apparátusának a jellemzői. Az eddigiekben mindig két elektród között elképzelt vonalra vetíthettük ki az Einthoven-háromszögben elhelyezkedő vektort. Mivel a mérés során mindkét elektród potenciálja változik (differens elektród), ezért **bipoláris elvezetésről** beszélünk. Az I., II., III., ún. **Einthoven-féle, vagy standard elvezetések** bipoláris elvezetések.

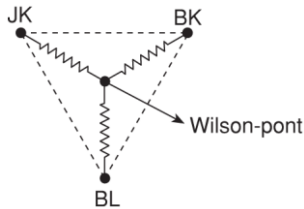


Willem Einthoven (1860–1927) holland orvos és fiziológus. 1924-ben fiziológiai Nobel-díjat kapott az elektrokardiogram értelmezéséért.

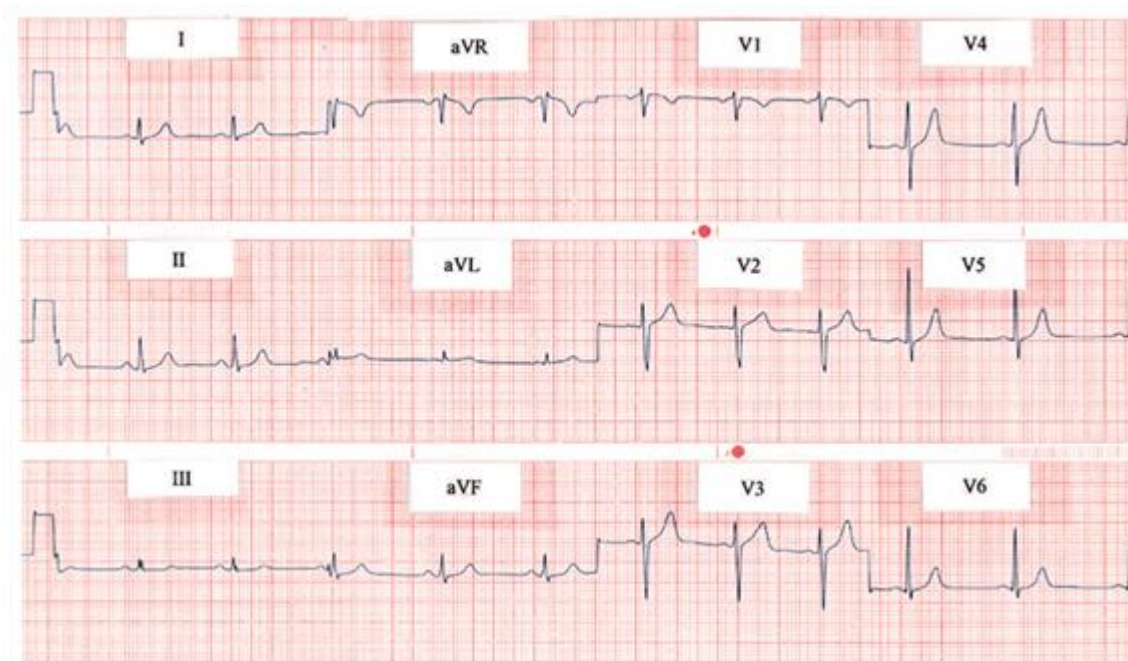
2.1.3. VII/2.1.3. Unipoláris elvezetések

Unipoláris elvezetést akkor kapunk, ha a testfelület egy adott pontjának potenciálingadozásait egy állandó potenciálon lévő ún. indifferens elektródhoz hasonlítjuk, amelynek a potenciálját önkényesen 0-nak tekintjük. Indifferens pont megvalósítható úgy, hogy a JK, BK és BL elektródokat nagy ellenállásokon keresztül (5000-10000 Ω) összekötjük. Az így létrehozott indifferens pontot nevezik **Wilson-pontnak** (Wilson Central Terminal – **WCT**) (VII.46. ábra). Ezt alkalmazzák a mellkasi unipoláris elvezetéseknel (Wilson-féle elvezetések), ahol az aktív elektród a mellkas megfelelő pontján van. Jelölésük: V_1 - V_6 .

A végtagi unipoláris elvezetések esetében az aktív elektród az egyik végtagi elektród, az indifferens pontot pedig úgy képezik, hogy a Wilson-pontból kihagyják az éppen aktív elektródot. Így egy kvázi-indifferens pontot kapunk, aminek következtében a hullámok amplitúdója megnő az EKG-görbén. Ezeket az elvezetéseket **Goldberger-féle elvezetésnek** nevezik, jelölésük aVR, aVL és aVF. Az **a** a megnövelt amplitúdóra utal (augmented), **V** a feszültséget jelenti (voltage) az R, L és F pedig az aktív elektród helyét jelzi (right, left arm ill. foot). Az unipoláris elvezetés differens elektródját először a BK-ra, majd a JK-ra helyezve és a két görbét egymásból kivonva az I. elvezetést stb. kaphatjuk. A 3 Einthoven-, a 3 Goldberger- és a 6 Wilson-elvezetés alkotja az ún. 12-elvezetési rendszert (VII.47. ábra).



VII.46. ábra. A Wilson-pont kialakítása

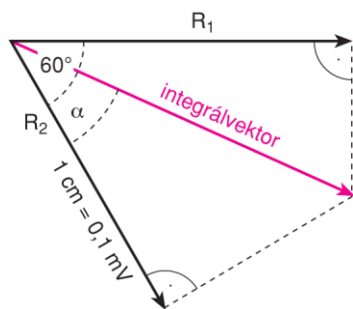


VII.47. ábra. 12 elvezetési normális EKG-felvétel

Az integrálvektor

Az integrálvektort mind az unipoláris, mind a bipoláris elvezetés alapján megszerkeszthetjük. Unipoláris elvezetés esetén a következők állíthatók. A vektor irányulhat a differens elektród felé, vagy távolodhat attól. Ha depolarizáció közben az integrálvektor a differens elektród felé irányul, akkor pozitív irányú lesz a kilengés, ha az integrálvektor ellenkező irányú, akkor negatív kilengést kapunk. Harmadik lehetőség az, ha az integrálvektor merőleges erre a két irányra. Ilyen esetben a görbe az izoelektromos vonalban halad. Repolarizációkor – a nyugalmi potenciál helyreállítási folyamata alatt – a differens elektród felé közeledő integrálvektor az izoelektromos vonal alá süllyedő görbét ír le, ha a repolarizációs hullám az elektródtól távolodik, pozitív görbét kapunk.

Bipoláris elvezetéseknel a helyzet a következő: pozitív kitérést kapunk, ha a depolarizációkor az integrálvektor az I. elvezetésben a bal kar, a II. és III. elvezetésben a bal láb felé irányul, repolarizációkor pedig az ellenkező irányba.



Az integrálvektor szerkesztése

2.1.4. VII/2.1.4. Az EKG-jel feldolgozása

Tekintettel a szív akciós áramainak nagyságára és az elektródoknak a szívtől való távolságára, az EKG-görbék feszültségkülönbségei mV nagyságrendűek. A legnagyobb kitérés, az R-hullám feszültsége 1 mV körül van. A teljes pitvar-kamra komplexus – a szív összehúzódási idejének megfelelően – 0,8 s nagyságrendű. Az ennél lényegesen gyorsabb szív működést tachycardiának, az ennél sokkal lassúbb szív működést bradycardiának nevezzük. A szív akciós áramainak a feszültségértékei az átlagos 1 mV-nál lehetnek jelentősen kisebbek vagy nagyobbak. Low-voltage-ról beszélünk, ha az R hullám magassága egyik elvezetésben sem haladja meg a 0,5 mV-ot és high-voltage-ról, ha az R-hullám magassága valamelyik elvezetésben meghaladja a 2 mV-ot. Az Einthoven-féle standard elvezetésekben kapott R-hullámok nagyságát alapul véve szokásos elvégezni az Einthoven–Waller-féle háromszög felrajzolásával, az R-hullámok értékeit eredményeit, a szívhez rendelhető térerősség-vektor megszerkesztését, amelyet **integrálvektornak** nevezünk. A kamra fő izomtömegének depolarizációját jelző kitérésből, az R-hullámból szerkesztett integrálvektor adja a szív elektromos főtengelyének frontális vetületét. Az integrálvektor nagysága a szerkesztéshez használt mV-cm egységválasztástól függ, a vízszinteshez viszonyított iránya (l. α szög a keretes rész ábrájában) azonban diagnosztikai értékű paraméter.

A mért potenciál nagyságát a szívizom tömege befolyásolja. Amikor pozitív kitérésről beszélünk, akkor tudatában kell lenni annak, hogy megállapodás szerint pozitívnak tekintjük az izoelektromos vonal feletti görbéket, és negatívnak az az alatti görbéket. Az elnevezés független attól, hogy lényegüket tekintve a depolarizációs hullámok negatív feszültséget képviselnek.

A vázizmok (harántcsíkolt izom) működésének elektromos tevékenységét is a μV -mV nagyságú feszültségek jellemzik, ezért szükséges a páciensnek nyugalomban maradnia az EKG készítésekor. Ellenkező esetben ugyanis a harántcsíkolt izomműködés keltette potenciálok elfedik a szív működésre jellemzőket. Az újabb EKG-készülékek automatikusan képesek kiszűrni az izomműködésből, illetve a hálózati elektromos zajból származó zavarokat. Ezeket a készülékeket megfelelő szűrőkkel látják el, amelyek az egyébként jellemző frekvenciájú izom eredetű, illetve hálózati zavarokat csökkentik.

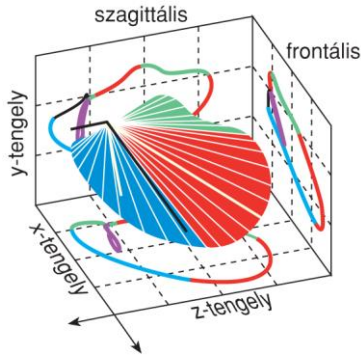
2.1.5. VII/2.1.5. Vektorkardiográfia

Az unipoláris elvezetés alkalmazása lehetővé tette a vektorkardiográfia kialakulását is, amely a valóságos viszonyokról sokkal hűbb, de jóval bonyolultabb képet ad, mint a hagyományos Einthoven-féle JK-, BK-, BL-elvezetés. Ezek az integrálvektornak csak egy-egy vetületét adják meg. Az integrálvektort a hagyományos elvezetés során kapott adatokból is megszerkeszthetjük (l. előző ábra).

Az integrálvektor szerkesztésekor gyakorlatilag a szív elektromos terének leírására használt legegyszerűbb modellben szereplő térerősség-vektornak egy, a frontális síkba eső vetületét kapjuk. Hasonlóképpen megszerkeszthető a tér másik két síkjára eső vetület is. Megfelelő számítógépes feldolgozás segítségével, ezek a vetületek megjeleníthetők.

Ha nemcsak egy időpillanatban végezzük el a szerkesztést, hanem a szív ciklus teljes időtartama alatt, a vektor időbeli változásait tudjuk nyomon követni. A jó láthatóság érdekében nem az egész vektort és annak az adott síkba eső mozgását ábrázolják, hanem csak a vektor végpontját. Így az adott síkban egy zárt görbét kapunk (VII.48. ábra). A görbe zártága a szív ciklikus működésére utal.

A 12 elvezetéses rendszerben mért mérések számítógépes kiértékelése lehetővé teszi, hogy megkapjuk mindhárom síkra eső vetületben a szív térerősség-vektorának változását. Ugyanakkor lehetővé válik egyfajta háromdimenziós rekonstrukció is.



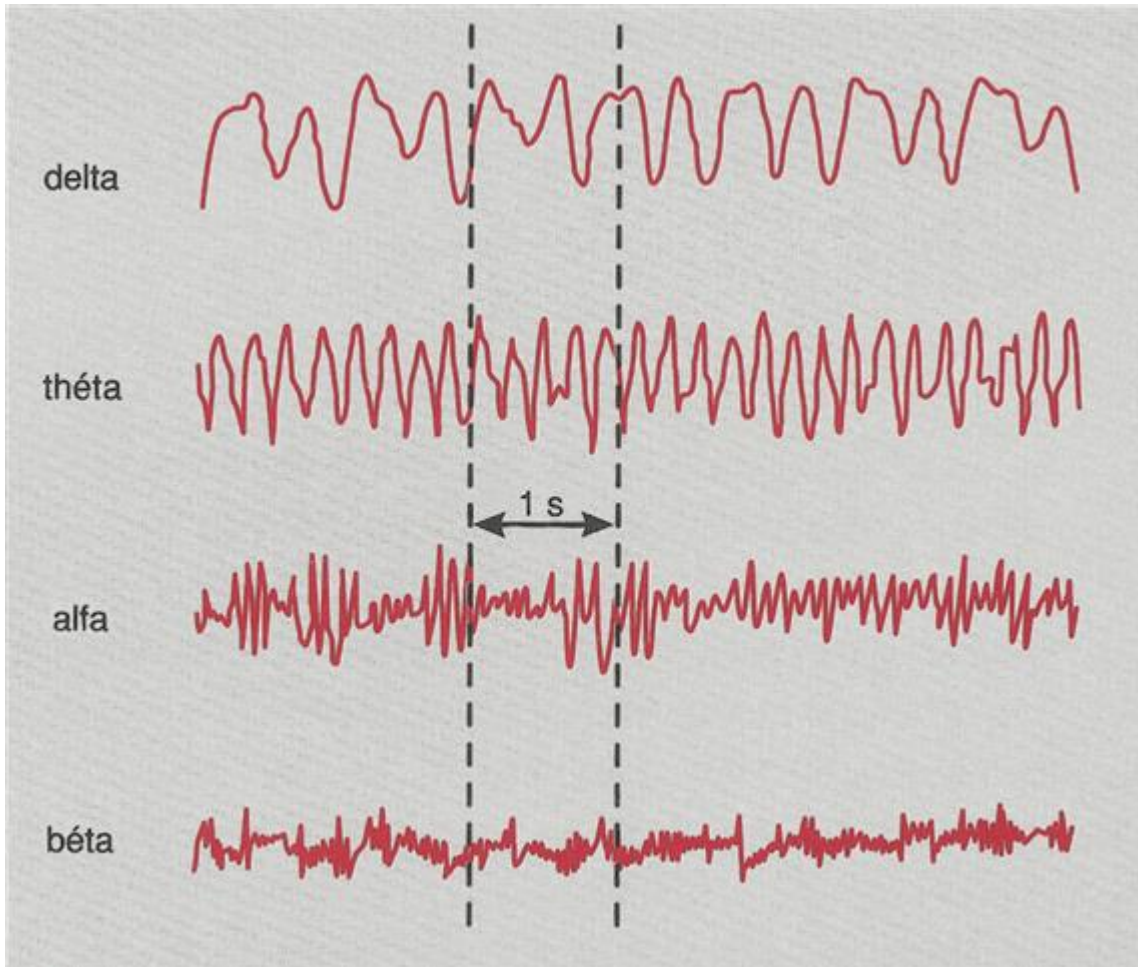
VII.48. ábra. Vektorkardiogram és a vektor mozgásának háromdimenziós rekonstrukciója. A színek időbeli egymásutániságot jelölnek. A kezdethez a fekete szín tartozik. A síkokon a zárt görbék az egyes síkokra eső vetületet jelentik meg. A felületen megjelenő egyes vonalak, a térerősség-vektor irányát és nagyságát adják meg az adott pillanatban

2.2. VII/2.2. Elektroencefalográfia

A működést jelző potenciálváltozások minden szervre jellemzőek és diagnosztikai értékkel bírnak. A gyakorlatban a szív, az agy, az izom és a retina működési potenciáljainak a mérését használják fel elsősorban diagnosztikai célokra. Az agy működési potenciáljainak a képét elektroencefalogramnak, a görbék vizsgálatával foglalkozó módszert az EKG analógiájára **elektroencefalográfiának (EEG)** nevezzük.

Lényeges különbség az EKG és az EEG között, hogy míg az EKG esetében mV nagyságrendű feszültségeket, addig az EEG esetén a csontos koponya árnyékoló hatása miatt csupán μV nagyságú feszültségeket lehet regisztrálni. Ez érthetővé teszi, hogy miért kíván bonyolultabb berendezést az elektroencefalográfia. A műtéti úton vagy kísérlet során létrehozott koponyacsonthiányon keresztül elektródokat helyezhetünk közvetlenül az agy felszínére is, vagy ún. mélyelektrodos kísérletekben az elektródokat bevezethetjük az agy különböző rétegeibe. Az előbbi eljárást elektrokortikográfiának nevezzük. A szív egyirányú funkciójával szemben a központi idegrendszer legfőbb centruma rendkívül sokoldalú feladatokat lát el, ezért az ilyen vizsgálatokban több unipoláris elvezetést alkalmazunk. 4-6-8-16-csatornás EEG-készülékeket használnak de vannak a speciális igényeknek megfelelően felépített különleges berendezések is.

Az EKG-görbe aránylag egyszerű, és némi gyakorlattal jól elkülöníthető hullámai után az EEG-görbe áttekinthetetlennek látszik. Az EEG-hullámokat elsősorban a frekvenciájuk alapján osztályozzák (VII.49. ábra). Regisztrálásukhoz használhatunk oszcilloszkópot, mozgó papírtekercsen regisztráló érzékeny tintairó galvanométereket vagy A/D konverterrel felszerelt számítógépet. Az EEG-görbék alakját bizonyos mértékig a használt készülék is deformálhatja. A forgalomban lévő EEG-készülékek 1-100 Hz frekvenciájú jeleket képesek észlelni, ami nem jelenti azt, hogy ettől eltérő frekvenciájú potenciálkülönbségek nem keletkezhetnek az agyban. A frekvencia mellett a hullámok alakjának, illetve nagyságának is jelentősége van. Az EEG-görbe különböző frekvenciájú és amplitúdójú hullámfajtáit a görög ábécé betűivel jelöljük: α -hullámnak nevezzük a 8–13 Hz frekvenciájú 20 μV amplitúdójú hullámokat. Ezek a hullámok az agy nyugalmi állapotára, például az alvás kezdeti szakaszára jellemzőek. A β -hullámok 14-50 Hz frekvenciával rendelkeznek. Amplitúdójuk rendszerint kisebb, mint az α -hullámoké. β -hullámokat mutat az EEG-görbe akkor, ha a vizsgálati alanyt szellemi munkára készítjük (például számoltatjuk). A δ -hullámok 0,5-4 Hz frekvenciájú, 50-100 μV amplitúdójú, ritkán észlelhető EEG-hullámfajtát képviselnek. A θ -hullámok a δ -nál valamivel nagyobb frekvenciájúak (5-7 Hz), és rendszerint kóros körülmények között keletkeznek.



VII.49. ábra. EEG-görbék

2.3. VII/2.3. Elektromiográfia

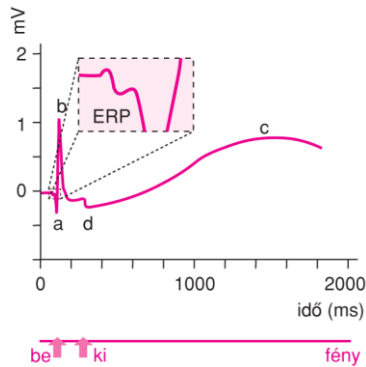
A harántcsíkoltizom-tevékenység, illetve az ideg-izom ingerületáttevődés vizsgálatára alkalmas az **elektromiográfia (EMG)** és az **elektroneurográfia**. Az első esetben indifferens elektródhoz viszonyítjuk egy, a vizsgált harántcsíkolt izomból elvezetett tüelettrod potenciálját nyugalomban lévő vagy akaratlagos izomműködés esetén. A második esetben az akarattól független elektromos impulzusokkal ingereljük a vizsgálandó ideget, az izomműködés regisztrálását hasonló módon végezzük. Elektroneurográfia segítségével mérhető az idegimpulzus terjedési sebessége is, ha két különböző helyen ingereljük ugyanazon ideget és mérjük a kiváltott izomválaszok közötti késleltetési idők különbségét.

2.4. VII/2.4. Elektroretinográfia

A retinában a fényinger elektromos jellé alakul a receptor sejtekben, majd akciós potenciálok sorozataként továbbítódik az idegsejtekben. A megvilágítás által a retinában kiváltott töltésmozgások elektromos potenciálváltozásokat keltenek, amelyek a szemre helyezett elektródákkal elvezethetők és regisztrálhatóak. Az így nyert görbét az EKG és az EEG mintájára elektroretinogramnak (ERG) nevezik. Az ERG az egész retina ingerületi állapotának az elektromos jele. Időbeli lefutásának analízise alkalmas a retina betegségeinek (mint például a retina ischaemia) érzékeny és objektív diagnosztizálására.

Az ERG regisztrálásának konvencionális módja, hogy kontaktlencsébe épített elektródat helyezünk a corneára, és annak – rövid fényfelvillanások hatására bekövetkező – potenciálváltozását viszonyítjuk a homlokon elhelyezett referenciaelektrodhoz. Az ingerlő fény intenzitását és hullámhosszát változtatva elérhető, hogy az elektromos jel elsődlegesen a pálcika vagy a csap sejtek működéséből származzon. Az elektroretinogram hullámainak amplitúdója tipikusan kb. 100 μV -tól néhány mV-ig terjed. A megvilágítás hatására fellépő potenciálváltozások időtartama meghaladja a megvilágítás időtartamát (VII.50. ábra). A jelenség oka az, hogy a fényérzékeny molekulák ingerlését egy sor lassúbb kémiai folyamat követi. Az ERG-görbét a szokásos

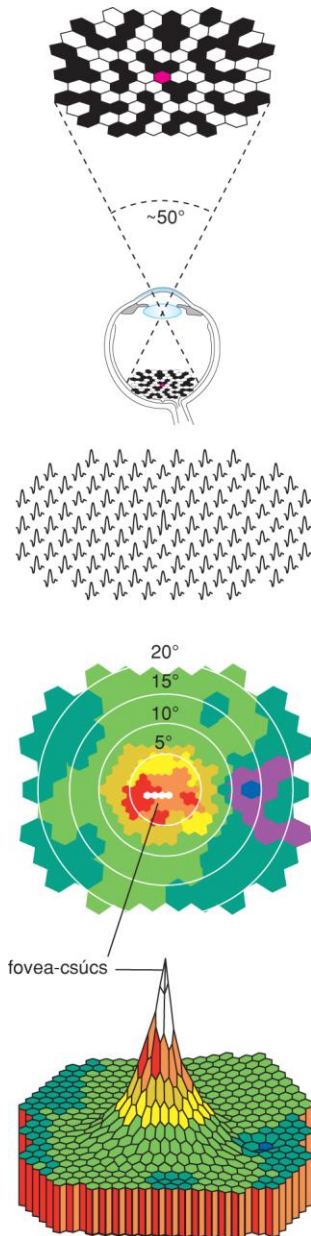
elvezetések mellett gyors és lassú komponensekre lehet osztani. A gyors részhez tartozik az *a*- és *b* hullám. A receptorsejtek ingerületi állapotával az *a* hullám hozható kapcsolatba, míg a *b* hullám a bipoláris sejtek rétegében (a Müller-sejtekben) keletkezik. Időtartamuk néhány tized másodperc. Az ingerlés megszüntetését egy rövid negatív (kikapcsolási) csipke (*d*) jelzi. Az ERG lassú komponense a pigmenthámból származó *c* hullám, ami az *a* és *b* hullámok utáni lassú potenciálnövekedés. Ha az inger nagyon rövid ideig tart, csak a kikapcsolási csipke után jelentkeznek. A *c* hullám tartama néhány másodperc is lehet. Ez alatt zajlik a molekuláris átalakulások és gyors elektromos jelenségek után bekövetkező regeneráció. Ennek előfeltétele, hogy a pálcikák és csapok vége ép pigmentsejtekkel érintkezzék, amelyek A-vitamint tartalmaznak. Ha a regenerálódás A-vitamin hiánya miatt nem kielégítő, akkor szürkületi látásyengülés – farkasvakság – következik be.



VII.50. ábra. Elektroretinogram

Mikroelektroda segítségével kimutatható, hogy még az *a*-hullám előtt megjelenik egy kb. 3 ms-os kis bifázisos hullám, az ún. korai receptorpotenciál (**e**arly **r**eceptor **p**otential, ERP). A korai receptorpotenciál feltehetőleg a rodopszin fény hatására bekövetkező átalakulásait kísérő elektromos dipólusváltozásokat mutatja.

A multifokális elektroretinogram (mfERG) révén ma már lehetőség van a retina különböző területeinek elkülönült vizsgálatára is. A mfERG-vizsgálat során a konvencionális ERG-vel megegyező módon elhelyezett elektródákon folytonosan mérik az elektromos feszültséget, miközben a páciensnek sötét és világos hatszögekből álló ábrák sorozatát villantják fel (VII.51. ábra). A hatszög alakú cellákból álló mozaikot nézve hasonló mozaikszerű megvilágítás jön létre a retinán. A hatszögeknek mindig a fele világos, fele sötét, így módon a váltakozó ábrák váltakozása ellenére a szembe jutó átlagos megvilágítás konstans marad. Miközben az ábrák látszólag véletlenszerűen villódnak, egy számítógép a felvillantott képeket és az egész retináról származó elektromos jeleket egymáshoz kapcsoltn regisztrálja. A retina egyes területeinek elektromos aktivitását a számítógépes adatfeldolgozás során a megvilágító mintázat és az elvezetett elektromos jel együttes vizsgálatából matematikai úton határozzák meg, ami aztán minden képelemre megjeleníthető. A jelek amplitúdóját külön ábrázolva szemléletes képet kapunk a retina működéséről, illetve annak rendellenességeiről. Az ábrán egy egészséges szem mfERG-eredménye látható, amelyen megfigyelhető a foveának a környezeténél lényegesen nagyobb és a vakfoltnak a zérus aktivitása.



VII.51. ábra. A multifokális elektroretinogram (mfERG) felvételének vázlata

3. VII/3. Audiometria

Az **audiometriás hallásvizsgálatok** az orr-, fül- és gégegyógyászat rutinvizsgálatai közé tartoznak. Feladatai: a **hallásvesztés** megállapítása, bizonyos foglalkozási ágak dolgozóinak **zajártalmi hallássérüléseinek** vizsgálata, vagy a nagyothalló személy egyéni adottságainak megfelelő **hallókészülék beállítása**. Egyáltalán nem közömbös, hogy a nagyothalló személynek **hangvezetési nagyothallása** van, vagy a **belső fül működésével** kapcsolatos a **nagyothallása**. Az audiometria **hangaudiometriára** és **beszédaudiometriára** oszlik fel, mi csak az előbbivel foglalkozunk.

3.1. VII/3.1. Hangaudiometria

A normális hallású személyekhez képest a sérült hallású személyek hallását a magasabb hallásküszöb jellemzi. Hangaudiometriával (tiszta, szinuszos hangokkal, lásd később) meg lehet állapítani az egyes mérési frekvenciákon a **hallásvesztés** mértékét. Az ún. **hallásküszöb-audiogramon** a hallásvesztés decibelben adják meg (J_{dB}), hiszen a phonskála, vagy sonskála csak normális hallású személyek hallására vonatkozik. A

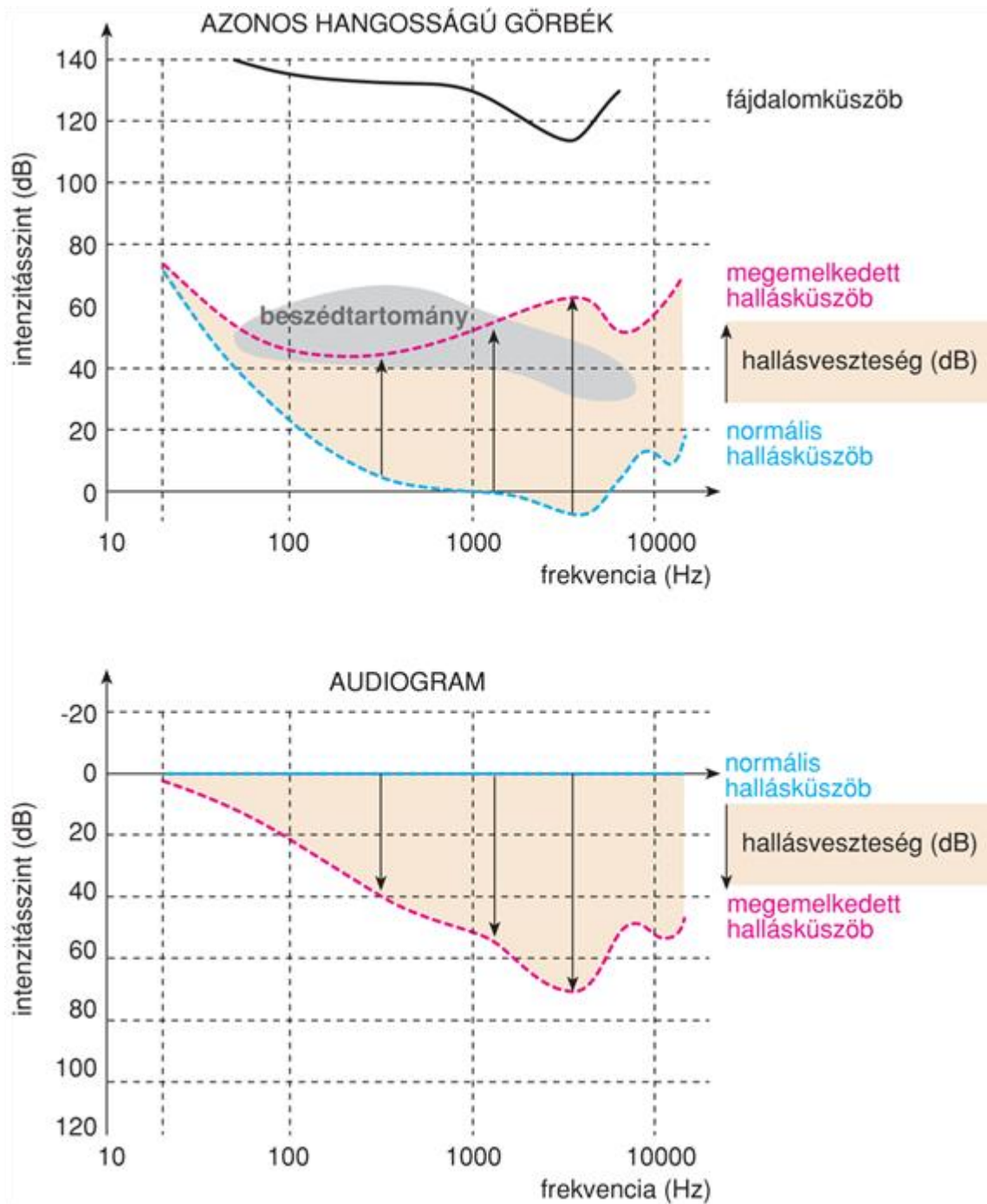
normális hallásküszöb görbéjét az audiogram felső részén egy 0dB-es vízszintes egyenes szemlélteti (VII.52. ábra.). Ettől lefelé ábrázolják a megemelkedett hallásküszöb normálistól való eltéréseit.

A **hangaudiométer** egy olyan hanggenerátor, amelynek változtatható szinuszos kimeneti feszültsége egy légvezetési (ui. van csontvezetési is) fejhallgatóra jut. A mérési frekvenciák majdnem az egész hallástartományt átfedik, és oktávonként állíthatók be. A fejhallgatóban keletkező hang intenzitásszintje a hanggenerátor kimenőfeszültségével szabályozható.

A **hallás károsodása** egy bizonyos intenzitásszint felett arányos az elszorított hangadaggal, azaz a **hangdózissal (D)**. A hangdózis az intenzitás és az idő szorzatával arányos ($D=J \cdot t$). Kísérleti állatokon kimutatták a szőrsejtek pusztulását a Corti-szervben (VII.53. ábra). A sérülés az alkalmazott hangfrekvenciáknak megfelelő helyeken volt jelentős.

Az öregedés természetes módon a hallás fokozatos romlásával jár. Ez a romlás kb. 20 éves kortól indul és elsősorban a hallás felső határfrekvenciájának (-3 dB-es pont) csökkenésében nyilvánul meg (VII.54. ábra).

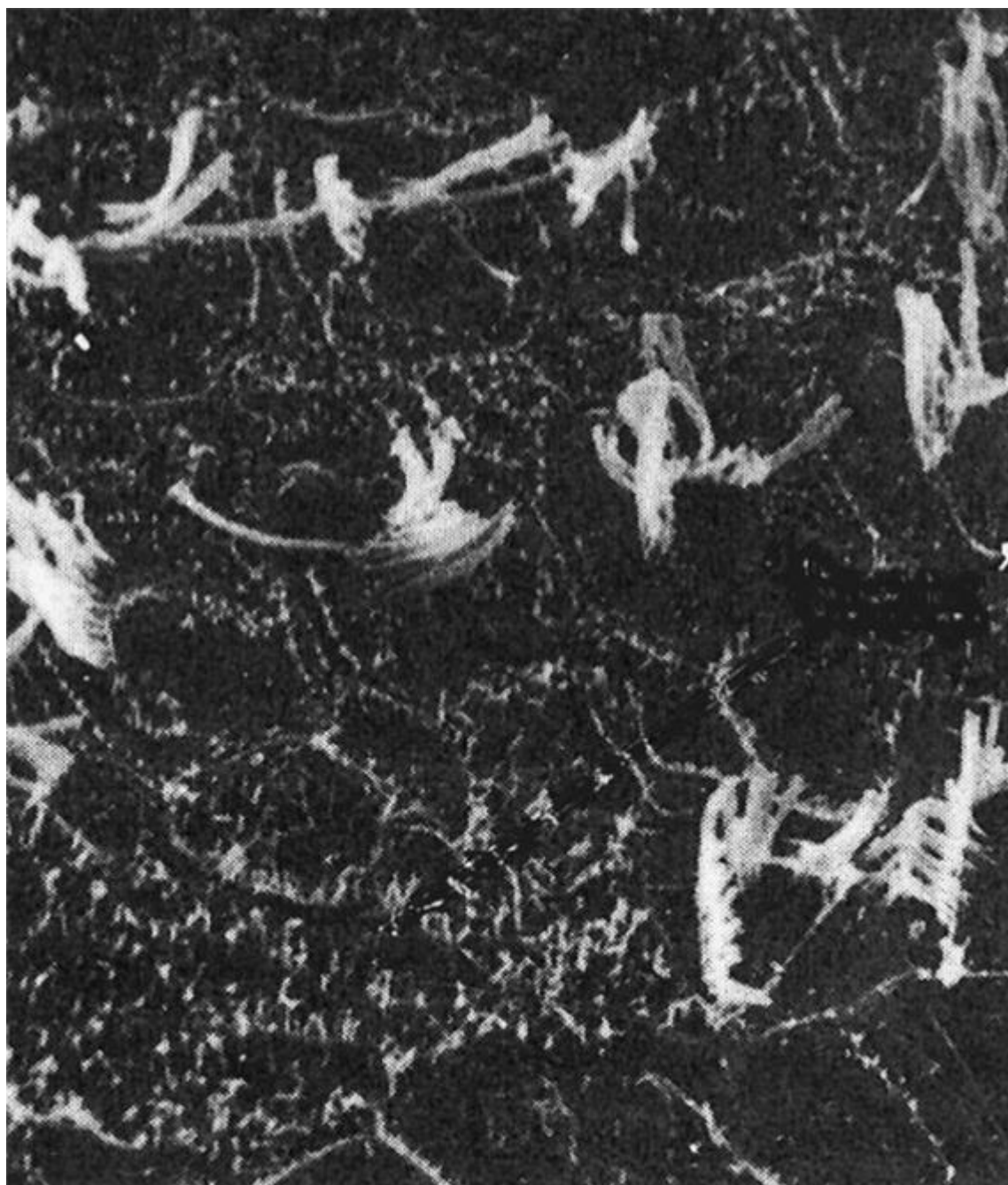
Halláskárosodásról 30 dB-nél nagyobb hallásvesztés esetén beszélünk, ezt a határt jelzi a vastag vízszintes vonal a VII.55. ábrán. A szaggatott függőleges vonalak a zajártalom leggyakoribb frekvenciatartományát jelölik. A ferdén vonalkázott terület görbe vonalai a normális fájdalomküszöbnek felelnek meg.



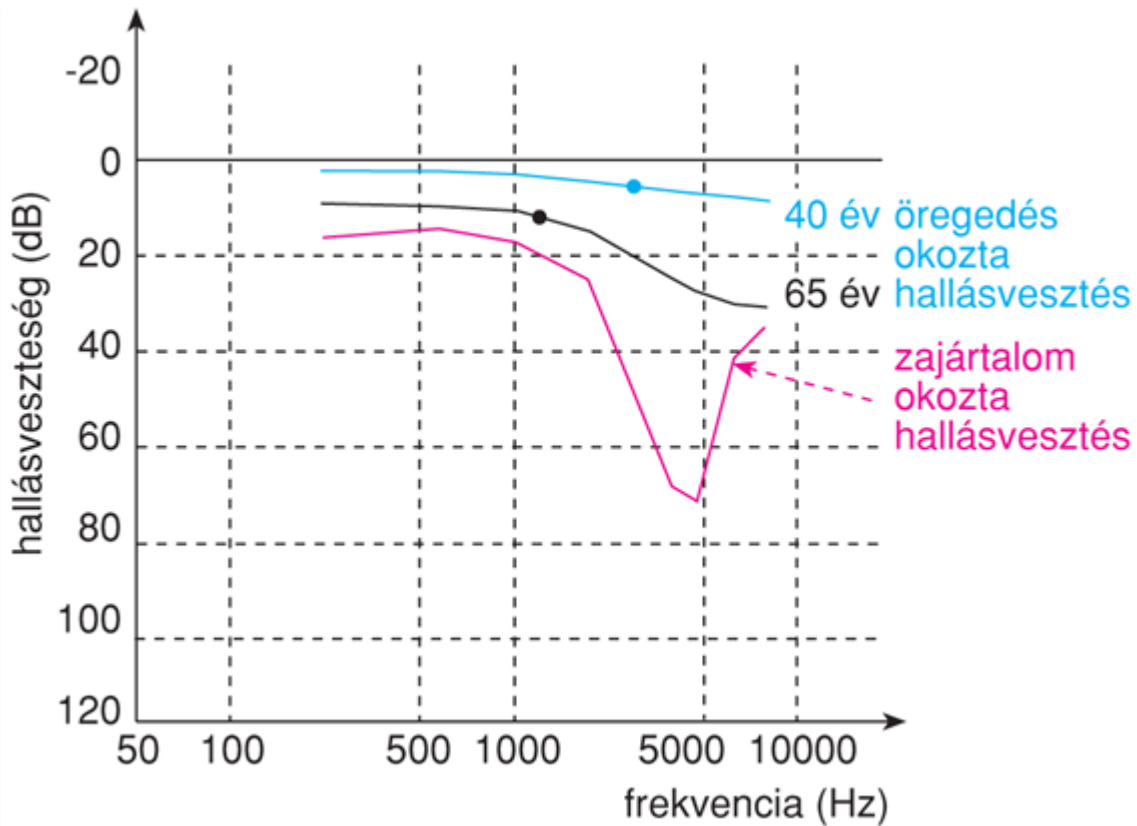
VII.52. ábra. Az audiogram származtatása az azonos hangosságú görbék



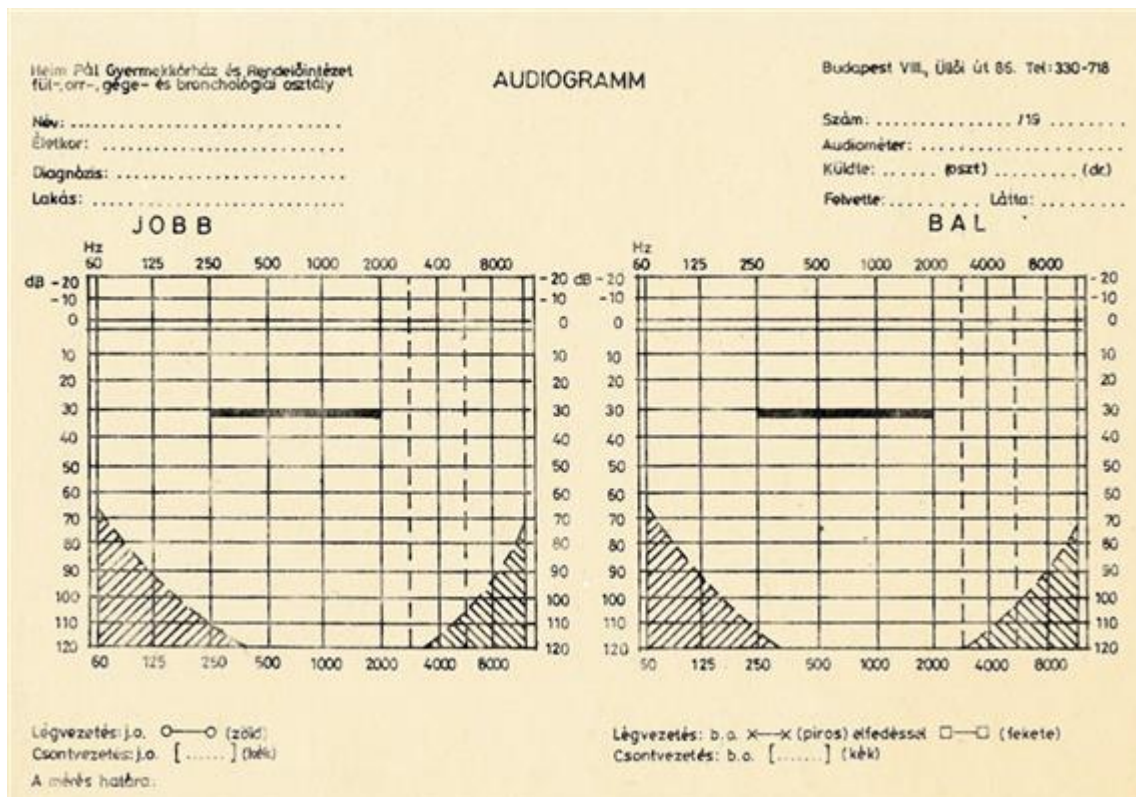
VII.53a. ábra. Tengerimalac normális



VII.53b. ábra. és sérült szőrsejtjei 24 órás 120 dB-es rockzene „besugárzás” előtt és után



VII.54. ábra. Jellegzetes hallásvesztések audiogramjai. A pontok a határfrekvenciát (–3 dB) jelölik.



VII.55. ábra. Egy, az orvosi gyakorlatban használt audiogram űrlap

3.2. VII/3.2. Objektív audiometria

A rutin audiometriai vizsgálatnál a beteg válaszai alapján történik a hallásküszőb megállapítása, ezért a vizsgálat szubjektív. **Az objektív audiométerrel ez a vizsgálat a beteg válaszaitól függetlenné válhat.** Kibővül alkalmazási területe is: csecsemők, süketseget szimulálók, nem kooperáló betegek, sőt – altatásban – kísérleti állatok hallása is vizsgálható e módszerrel (VII.56. ábra).

A hallóideg elektromos aktivitása mikroelektród segítségével tanulmányozható ugyan (Elektro-Cochleo-Gram), de a módszert veszélyessége miatt emberen nem alkalmazzák. A rendelkezésünkre álló egyik non invazív mérési módszer a fül mögé helyezett elektród potenciáljának mérése lehet, egy – pl. a fejtetőn elhelyezett – indifferens elektróddal szemben.

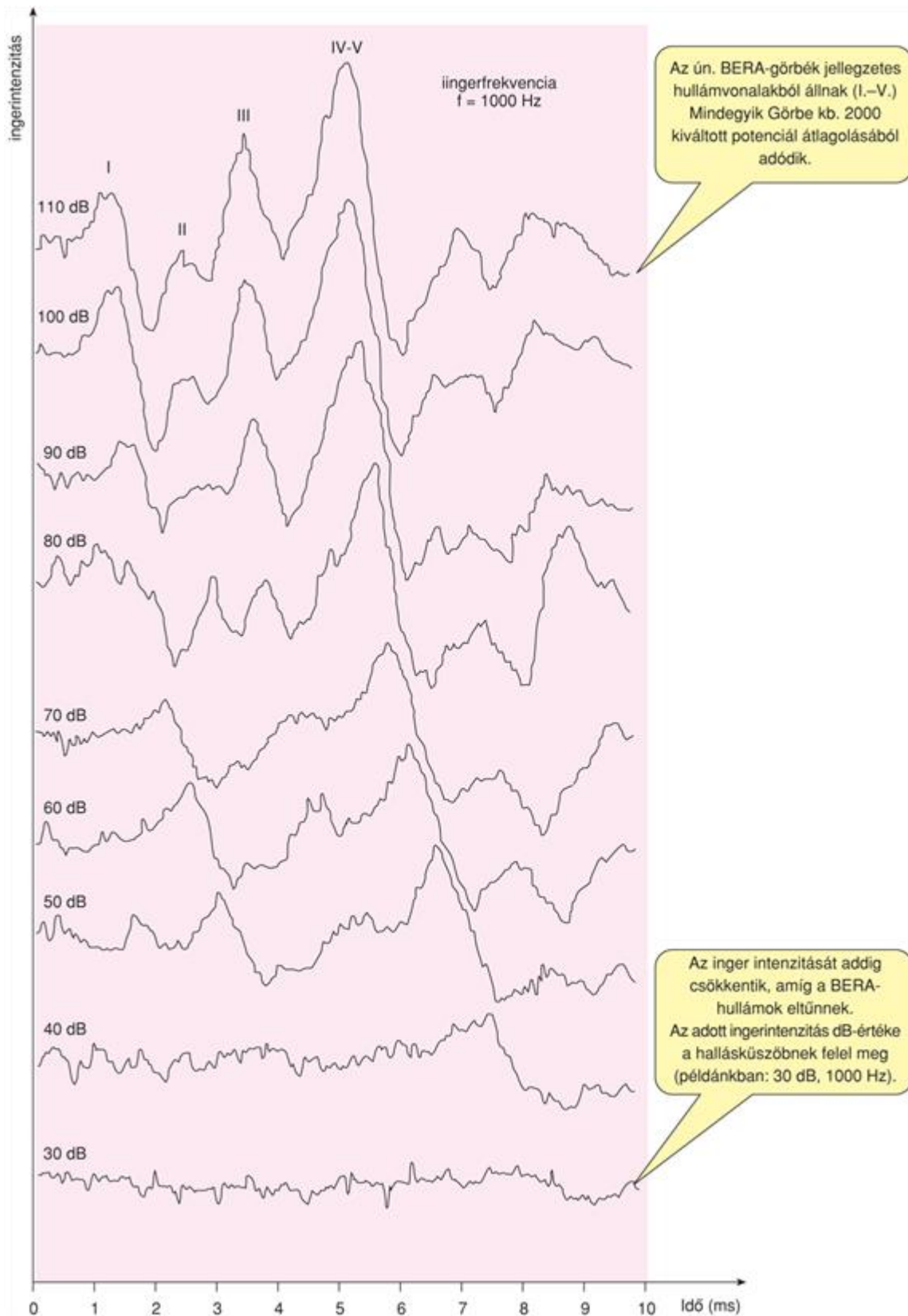
A fejbőrre optimálisan elhelyezett elektródák között is csak rendkívül kicsiny, mikrovolt nagyságrendű potenciálkülönbség lenne mérhető. A helyzetet tovább nehezítik az elektródapáron megjelenő zajok, amelyek az agy egyéb elektromos aktivitásának (EEG), a vázizmok (EMG) és a szív (EKG) jeleinek, ill. a külső elektromágneses terek okozta zavaró feszültségeknek köszönhetően rendszerint sokkal nagyobb amplitúdójúak mint maga a mérendő jel. Így a jel/zaj viszony jóval kisebb lehet, mint egységnyi. Ennek javítására szűrési technikák sem alkalmazhatók, mivel a hasznos jel frekvenciatartománya közel azonos a zajokéval. Digitális technikával azonban a zajban „eltüntetett” jelek számítógépes feldolgozása lehetővé válik. Ez az ún. kiváltott potenciálok jelátlagolási módszere. A hallás vizsgálatánál a hallóidegpálya kiváltott potenciáljait mérik, a módszer neve: BERA (Brainstem Evoked Response Audiometry).

A hallás objektív audiometriai vizsgálatánál a fejhallgatóra **adott adott frekvenciájú ésrövid időtartamú akusztikus inger** (click) frekvenciáját és intenzitását számítógéppel vezérelik. A klikkek azonos időben követik egymást. **A rendszertelenül jelenlévő háttérzajból a kiváltott potenciálokat a számítógép addig átlagolja, amíg a hallópályán keletkező potenciál (BERA) kiemelkedik.** Embernél általában 2000 átlagolásból kapunk egy görbét (VII.57. ábra).

A clickek intenzitását csökkentve egyre kisebb amplitúdójú hullámot ad az átlagolás. Amikor a hullámok – eltűnnek elértük a hallásküszőböt. Az adott inger intenzitásszintje lesz a hallásküszőb értéke az adott frekvencián. A továbbiakban eltérő frekvenciákon (125 Hz–8 kHz), oktávonként ismételtén megméri az **objektív hallásküszőböt**, majd megszerkesztik az audiogramot.



VII.56. ábra. Objektív audiometriai vizsgálat



VII.57. ábra. Különböző intenzitású hangimpulzusok által kiváltott ún. BERA-potenciálok. A fenti mérésorozatból az audiogram egy pontja (1000 Hz) szerkeszthető meg

A **BERA-görbe (Brainstem Evoked Response Audiometry)** jellegzetes hullámai a hallóidegpálya alábbi átkapcsolódásaiból keletkeznek:

I.Nervus Cochlearis

II.Nucleus Cochlearis

III.Oliva Superior

IV.Lemniscus Lateralis

V.Colliculus Inferior

8. fejezet - VIII. rész – Képképző módszerek

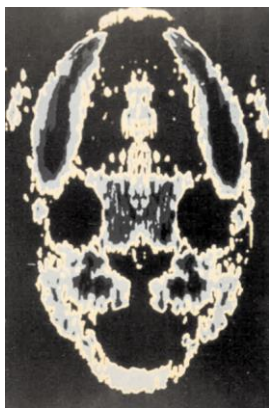
Az orvosdiagnosztikai feladatokban kezd megszokottá válni, hogy az eredmény képszerűen jelenik meg. A „kép”-szerűség azonban lehet megtévesztő is a diagnosztikai alkalmazásokban, hiszen egyre többféle célú és egyre többféle mérésen alapuló eredményt látunk egy monitoron megjelenő azonos formában. A különböző fajta adatgyűjtésekhez tartozó „képek” tehát nagyon különböző információt hordozhatnak és így a diagnosztikai mondanivaló is teljesen különböző lehet. A VIII.1. ábrán három frontális képet mutatunk be az emberi fejről. Az objektum ugyanaz, a képszerűség is, de más-más fizikai mérés adatait jelenítik meg. Az *a)* ábrán röntgensugárzás abszorpciós együtthatója, a *b)* ábrán protonszűrűség, a *c)* ábrán UH-impulzusok visszaverődésének helye van megjelenítve képi formában. Ebben a fejezetben áttekintjük azokat a mérés technikákat, amelyek képi formában szolgáltatják a mérés eredményét, és megmutatjuk, hogy egyes adatsorok esetén a képi információ milyen diagnosztikai tartalommal bír.



VIII.1. ábra. Az emberi fejről különböző diagnosztikai módszerekkel készített frontális képek. a) CT felvétel (három dimenziós rekonstrukció)



VIII.1. ábra. b) MRI felvétel



VIII.1. ábra. c) UH-kép

1. VIII/1. A képi megjelenítés

A diagnosztikai kép a modern képkalkoló eljárásokban egy képernyőn jelenik meg, azaz a megjelenítendő fizikai mennyiség értékét az ernyő képelemeinek, az ún. pixeleknek (picture element) a fényességévé (kibocsátott fényintenzitásává) alakítják át az eljárás utolsó lépésében. Ez az utolsó megjelenítő egység többféle megoldást jelenthet, de az közös a megoldásokban, hogy a megjelenítés akkor lehetséges, ha a megjelenítendő mennyiséget sikerült elektromos feszültségjelekké (lásd VII/1.1.4.) átalakítani. Az adatokat megjelenítés előtt a legtöbb esetben egy számítógép memóriájába juttatják, amelynek alapján a diagnosztikai értékű információ optimális kinyerése érdekében a számítógépes programok segítségével az adatok ellenőrzése (válogatás, rákeresés érdekes tartományokra, háttérlevonás, több felvétel átlagának, különbségének képzése stb.) elvégezhető a megjelenítés előtt.

Bár a képernyőn megjelenő kép kétdimenziós pixelek hálószerű elrendezése, az egyes pixelekben megjelenített adatok azonban a valóságban nem egy zérus vastagságú sík elemeinek felelnek meg. A mérési eljárásban használt módszerek, pl. sugárzási nyalábok valóságos paraméterei (pl. nyalábméret) ugyanis kijelölik az elem harmadik dimenzióját is. Így a pixelek a valóságban egy reális vastagságú (pl. mm) térfogatelem (volume element) az ún. voxel tulajdonságait jelenítik meg. Ennek gyakorlati jelentősége van pl. akkor, amikor a mérést egymás melletti rétegenként végezzük, és a több réteg formájában nyert adatokat számítógép segítségével egymáshoz illesztve egy makroszkopikus térfogat teljes adathalmazát alakítjuk ki. Ilyenkor az a cél, hogy egy-egy kiválasztott tartományt (pl. szervet, daganatot) részletesen analizáljunk. Így tehát nagyon fontos, hogy a kétdimenziós adatsorok a harmadik dimenzió szempontjából is jól illeszkedjenek.

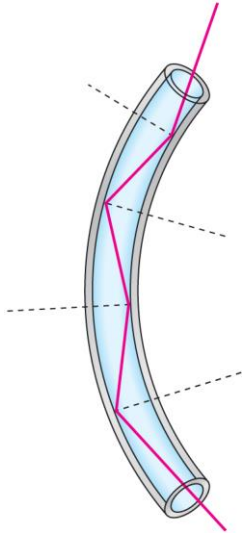
2. VIII/2. Felületi térképek

A legkézenfekvőbb formája a felületi képnek a jól ismert fénykép, amely egy háromdimenziós objektum felületi elemeiről a kamerába szóródó fényintenzitás-eloszlási térképet jelent, egy kétdimenziós felületre vetítve. Az orvosi gyakorlatban a beteg háromdimenziós kiterjedésének többféle fizikai paraméterét is használják 2D felületre vetítve diagnosztikai célra.

2.1. VIII/2.1. Endoszkópia

2.1.1. VIII/2.1.1. Száloptika

Az endoszkópiában is használt száloptika a fény vezetésére szolgál. A fényvezetés a következő elven alapul: ha a fény optikailag sűrűbb közegből halad optikailag ritkább közegbe és a beesési szög nagyobb a határszögnél (vagyis annál a szögnél, amelyhez tartozó törési szög 90°) teljes visszaverődés jön létre (lásd II/2.1.1. rész). Az endoszkópokban olyan fényvezető szálak vannak, amelyek egy optikailag sűrűbb magból és egy azt körülvevő optikailag ritkább köpenyből épülnek fel. Ha a szál belsejében a fénysugár a határszögnél nagyobb szögben éri a határfelületet, azon a fény teljes visszaverődést szenved és a jelenség ismétlődik a belső szál másik oldalán. (VIII.2. ábra) Ideális esetben, ha a szál nem nyeli el a fényt, az gyengítetlenül tovahalad a szálabban sokszorosan visszaverődve a határfelületről. A gyakorlatban a fényvezetés hatásfoka nagymértékben függ az optikai szál minőségétől (tisztasága, homogenitása). Az endoszkópban mind a fény bevezetésére, mind pedig a keletkezett kép kivezetésére felhasználják.

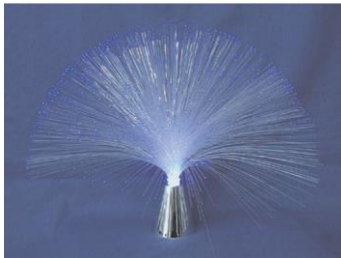


VIII.2. ábra. Fényterjedés az optikai szálban

2.1.2. VIII/2.1.2. Az endoszkópi kép keletkezése

Az optikai szál átmérője néhány μm és az endoszkóppal készített kép egy elemének felel meg. A szálakból (VIII.3. ábra) alkotott rendezett kötegek azonban már alkalmasak makroszkopikus kép továbbítására. Ez a kép közvetlenül látható, ha a másik végén beletekintünk az endoszkópba.

A videoendoszkópok esetében a képet monitoron figyelhetjük meg (VIII.4. ábra). Ezekben a készülékekben a száloptika csupán a megvilágítást szolgálja. A megvilágított belső felületről visszavert fény egy, az endoszkóp belső végébe épített optikán keresztül kisméretű (néhány tized cm^2 -es) CCD- chipre vetül. A CCD-lemez a képelemeknek feszültségjeleket feleltet meg, amelyek az endoszkópba épített kábelben át jutnak ki a szervezet belsejéből. Ez a videojel, amit monitoron lehet megjeleníteni.



VIII.3. ábra. Optikai szálakból készült lámpa



VIII.4. ábra. Videoendoszkóp

2.1.3. VIII/2.1.3. Endoszkópiai eljárások

Az alkalmazás helyétől és módjától függően az endoszkóp lehet merev vagy hajlékony. Merev például a kisebb hasi műtéteknél használatos laparoszkóp (VIII.5. ábra) vagy az ízületek vizsgálatára és kezelésére szolgáló arthroszkóp. Hajlékony többek között a gyomorban használatos gasztroszkóp (VIII.6. ábra), vagy a bronchoszkóp, amellyel a hörgőrendszer tekinthető át. A merev endoszkópok általában 20–30 cm hosszúak, míg a flexibilisek hossza akár több méter is lehet.



VIII.5. ábra. Laparoszkóp



VIII.6. ábra. Gasztroszkóp

Az endoszkópokban a megvilágításra és a kép továbbítására szolgáló részekon kívül egy vagy több ún. munkacsatorna is van. Ezeken keresztül a beavatkozások elvégzésére ollót, csipeszt vagy olyan dróthurkot vezethetnek be, amelybe áramot vezetve úgy használható, mint egy elektromos kés, pl. polipok eltávolítására. Az eltávolított szövetdarabot ugyanazon a munkacsatornán keresztül ki lehet emelni és szövettani vizsgálatra lehet küldeni. Egy másik munkacsatornán keresztül levegőt is fújhatnak az adott testüregbe a jobb látási viszonyok elérése érdekében.

A legújabb, a vékonybelek vizsgálatát lehetővé tevő eszköz az a néhány centiméteres kapszula, amelyet a beteg lenyel (VIII.7. ábra). A kapszula végighalad az emésztőrendszerén, a beépített elem és fényforrás segítségével megvilágítja az előtte levő bélszakaszt és CCD-kamera, valamint egy miniatűr adó segítségével képeket közvetít a páciens által oldaltáskaként viselt videovevőhöz. A készülék 8 órás folyamatos működésre képes. Miután befejezte működését, természetes úton, a széklettel távozik. A vizsgálat befejeztével a képek számítógéppel feldolgozhatók és monitoron megjeleníthetők. Természetesen a kapszula alkalmazása csak képtovábbítást tesz lehetővé, szövetmintavételt, vagy egyéb beavatkozást nem.



VIII.7. ábra. Kapszulás endoszkóp

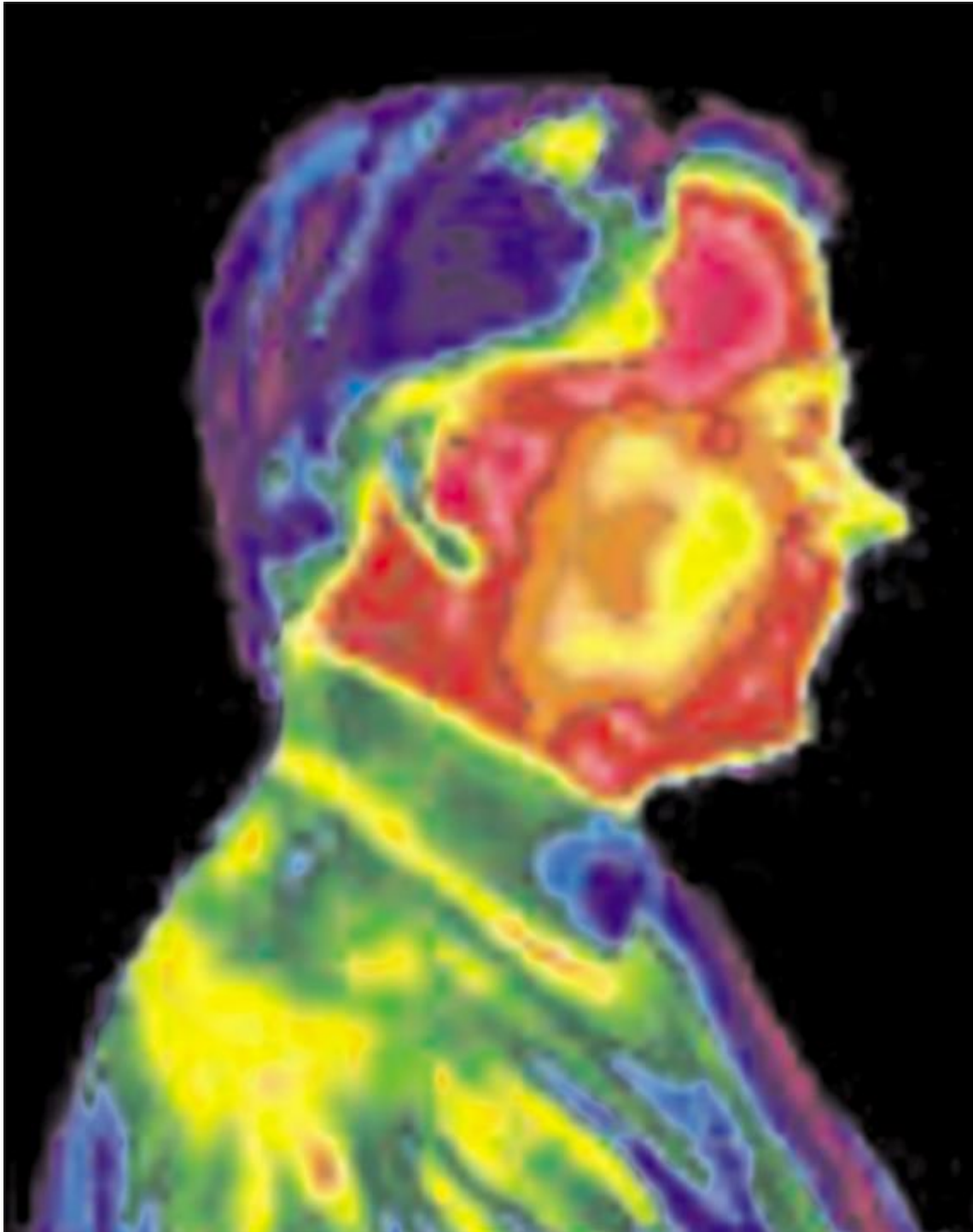
2.2. VIII/2.2. Termográfia

A termográfia a testfelszín hőmérsékletének pontról pontra történő változásáról ad felvilágosítást. A testfelszín hőmérsékleti térképezésére kétféle módszer alakult ki. A **kontakt- vagy lemeztermográfianál** a test felszínére koleszterikus folyadékkristályos filmet helyeznek. A film színéből az alatta levő terület hőmérséklete meghatározható (I/3.4.2. fejezet). A **teletermográfia**, vagy **termovízió** a test által kibocsátott hőmérsékleti sugárzás detektálásán alapul (lásd II/2.2.1.).

Az emberi test hőmérsékletén ($T \sim 310 \text{ K}$) a hőmérsékleti sugárzás emissziós maximuma $10 \mu\text{m}$ körül van. Az infravörös termográfia céljára ezért ezt a hullámhosszat választják. A detektálást végző infrakamera objektívlencséje átlátszó az adott tartományban. Ilyen pl. a germánium vagy a cink-szelenid (ZnSe). A képlemez a fotovezetés elvén alapul, 256×256 vagy még nagyobb számú detektort tartalmaz. Az eljárást főleg gyulladásozó góccok, daganatok kimutatására használják. Ezek hőmérséklete magasabb, mint a környezetüké. Keringési zavar esetében általában a károsodott terület hőmérsékletének csökkenése tapasztalható. A különböző hőmérsékleteknek különböző színeket feleltetnek meg a képen (VIII.8. ábra).

Az utóbbi években az **infravörös tartományú termográfian** kívül az ún. **mikrohullámú termográfia** is alkalmazást nyert. Ezt a módszert az emlőrák diagnosztikájára fejlesztették ki. Az emberi test infravörös emissziójához képest nagyságrendekkel kisebb a mikrohullámú tartományban emittált sugárzás intenzitása, emiatt sokkal érzékenyebb detektorokra van szükség ennek méréséhez. A mikrohullámok behatolási mélysége a testszövetekbe azonban jóval nagyobb, mint az infravörös sugárzásé. Fordított irányban emiatt a mélyebben fekvő részek sugárzása képes kijutni a testfelszínre, és így a mélyebben fekvő szövetek hőmérsékletéről is több információt lehet nyerni. Ezzel párhuzamosan azonban romlik a térbeli felbontóképesség.

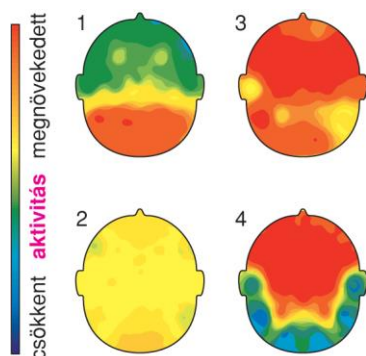
Lehetőség a továbblépésre, ha egyszerre detektálják a sugárzást a cm-es és a mm-es hullámhossztartományban. A cm-es tartományban mélyebbre lehet látni, a mm-esben jobb a térbeli felbontóképesség. A szimultán detektálás egyesíti ezeket az előnyöket.



VIII.8. ábra. Termogram. A melegebb színek magasabb hőmérsékletet jeleznek

2.3. VIII/2.3. Elektromosfeszültség-térképek

A test felszínén regisztrálható elektromos jelek (VII/2. fejezet) alapján térképet készíthetünk a test egy részén valószínűsíthető elektromos potenciál eloszlásáról. Ehhez az adott testtáj felszínén több elektródot kell elhelyeznünk. Az előző fejezetben tárgyaltuk ezeknek a jeleknek a megjelenítését, feldolgozásának problémáit. Ha agyi elektromos tevékenységet vizsgáljuk, a regisztrált EEG-értékeket nemcsak megjeleníthetjük, hanem az egyes pontokon mért jelek alapján agyi potenciáltérképeket is készíthetünk (VIII.9. ábra). Hasonló módszerrel a szív tevékenységét kísérő, a mellkas felszínén mérhető elektromospotenciál-térkép is elkészíthető.



VIII.9. ábra. EEG-görbék alapján készült potenciáltérkép. 1. alacsony θ -hullám-aktivitás, 2. alacsony α -hullám-aktivitás, 3. magas θ -hullám-aktivitás, 4. magas α -hullám-aktivitás

3. VIII/3. Szummációs eljárások

3.1. VIII/3.1. Röntgensugárzás abszorpcióján alapuló módszerek

3.1.1. VIII/3.1.1. Röntgenátvilágítás

A hagyományos röntgenképek a beteg testének a röntgensóvel ellentétes oldalán lévő lumineszkáló ernyőn (röntgenképernyő) vagy röntgenfilmen jönnek létre. A röntgensugár egymás mögött lévő, különböző denzitású (abszorpció együtthatójú) szövetrétegen halad keresztül, intenzitásának gyengítésében valamennyi réteg szerepet játszik:

$$J = J_0 \cdot e^{-(\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 + \dots)}$$

(VIII.1)

ahol μ_k az egyes (pl. k -adik) rétegek abszorpciós együtthatója, x_k ugyanannak a rétegnek a vastagsága.

A röntgenképernyő lumineszcencia-fényének az erőssége, ill. a film feketedése az **eredő denzitástól** függ, amit a

$$\lg \frac{J_0}{J} = (\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 + \dots) \cdot \lg e$$

(VIII.2)

kifejezés ad meg. Más szavakkal: a képeken az egymás mögötti részletek árnyéka egymásra vetül. Ebben az ún. szummációs vagy szuperpozíciós képben a testnek a röntgensugár irányába eső harmadik dimenziója nem bontható fel részleteire.

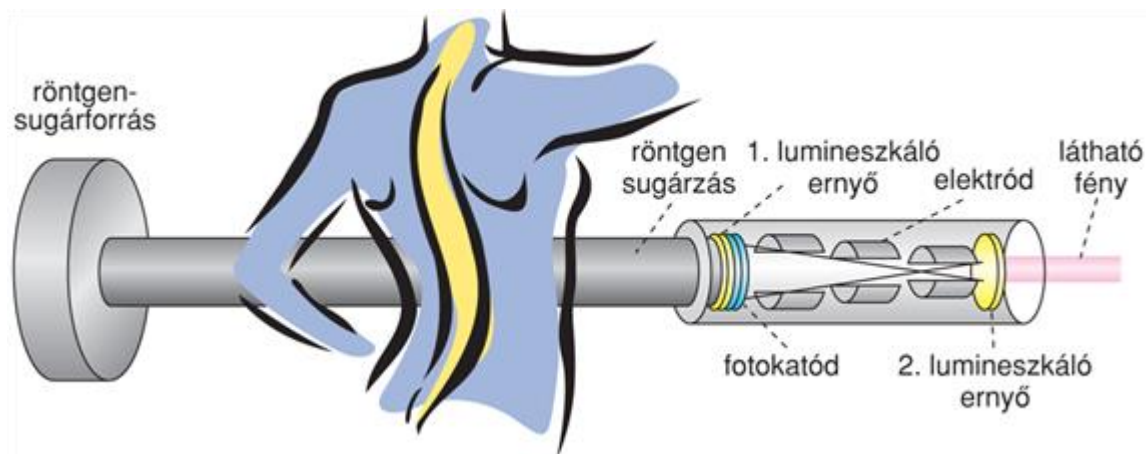
A röntgendiagnosztikai módszerek fejlesztésekor három fő szempont vezérelte a kutatókat:

- a mélységbeli felbontás megoldása,
- a röntgenátvilágítással kapott kép kontrasztjához szükséges sugárdózis csökkentése,
- a röntgenfilmen rögzített kép helyett optikai kép előállítás.

A technikai fejlődés ugyanis már évtizedekkel ezelőtt szolgáltatott olyan elektronikus egységeket (l. félvezetők (VII/1.3.)), amelyek optikai tartományú fotonokat elektromos feszültségjelekké voltak képesek átalakítani (pl. fotoellenállás). Így egy optikai kép elemeinek feszültségjelekké való transzformálásával digitalizálható adatbázishoz jutunk, ami lehetővé teszi a számítógépes adatfeldolgozást és adattárolást.

3.1.2. VIII/3.1.2. Elektronikus röntgenkép-erősítő

A röntgenkép-erősítő megoldja a röntgenkép készítéséhez szükséges sugárdózis csökkentését, valamint a röntgenabszorpciós képet film helyett digitalizálható optikai kép formájában állítja elő. Hátránya az, hogy mivel a képerősítő leképezése jelentősen kicsinyített képet állít elő a röntgenképhez képest, annak térbeli felbontása csökken. A röntgenkép-erősítő vázlatos felépítése a VIII.10. ábrán látható: üvegburában, vákuumban két lumineszkáló ernyő, egy fotokatód és hengersizmetrikus elektródrendszer helyezkedik el. Az átvilágított test képe első lépésben az 1. lumineszkáló ernyőn jön létre, ahol a nyaláb intenzitásával arányos, a test által gyengített sugárzás intenzitásának megfelelő számú fénypont keletkezik. A következő lépésben az egyes pontokból származó lumineszcencia-fény a fotokatód megfelelő pontjára vetül, ahol intenzitásával (fotonszámával) arányos számú fotoelektront vált ki. A katódra és az elektródrendszerre kapcsolt feszültség (25-30 kV) olyan elektromos teret hoz létre, amely a fotokatódból kilépő elektronok számára – amellet, hogy gyorsítja azokat – leképező elektronlencse szerepét tölti be. A felgyorsuló elektronok a 2. lumineszkáló ernyőre jutnak, amelyen az elektronlencse közvetítésével az 1. ernyőn kialakult röntgenkép optikai kép formájában válik láthatóvá. Ez a kép valódi, fordított állású, kicsinyített, és – ami különösen lényeges – a létrehozásában közreműködő elektronok nagy energiája (25-30 keV) következtében a fényereje nagy. E körülmény további képkezelést és feldolgozást tesz lehetővé.

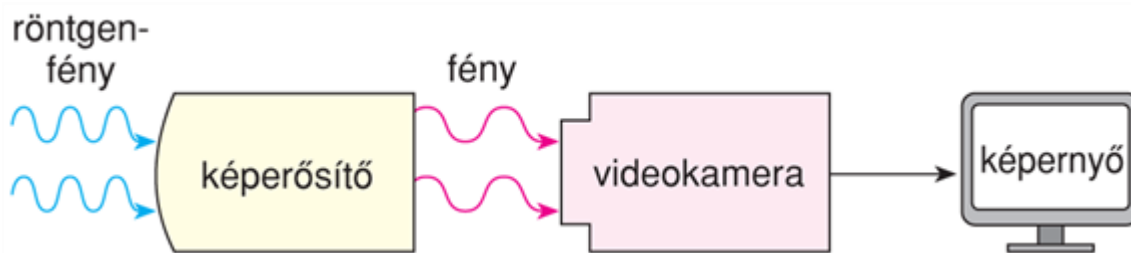


VIII.10. ábra. Röntgenkép-erősítő vázlata

A röntgenkép-erősítő alkalmazása számos előnnyel jár:

- használatával 10-20%-ra csökkenthető a beteg (és az orvos) sugárterhelése a közönséges átvilágítással szemben;
- képerősítő-videokamera-katód sugárcső együttes alkalmazásával elsötétítés nélkül is jól látható a röntgenkép, ami lehetővé teszi különféle orvosi beavatkozások röntgenkontroll közben való végzését (VIII.11. ábra);
- a videokamera jele (videojel) rögzíthető, és akár mozgóképként is visszajátszható;
- digitális röntgenképkalkotást, ill. -kezelést tesz lehetővé.

A képerősítőt gyakran használják az ún. C-karos elrendezésben, amikor is kb. 1 m átmérőjű félkör alakú (C betűre emlékeztető) tartó egyik végén a röntgenső, másik végén a képerősítő helyezkedik el egymással szemben. A C-kar a fekvő páciens bármelyik testrészének tetszőleges irányú átvilágításához beállítható.

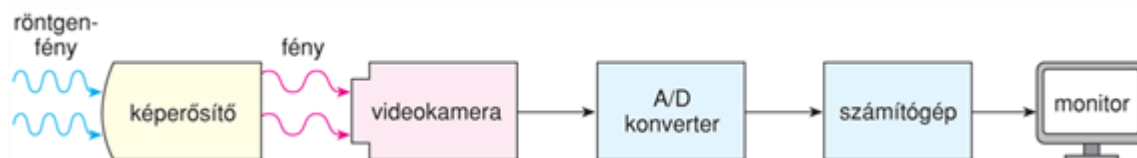


VIII.11. ábra. Röntgenkontroll céljaira felhasználható elrendezés

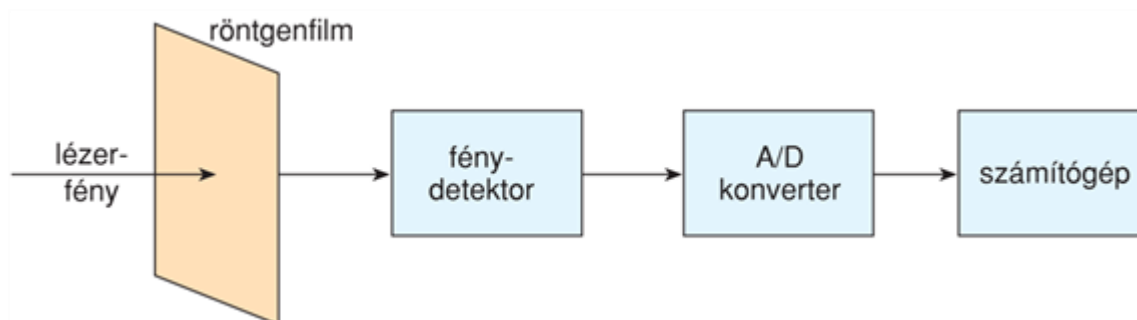
3.1.3. VIII/3.1.3. Digitális röntgenképképzés

A feladat egy lehetséges megoldását szolgálja a VIII.12. ábrán szemléltetett összeállítás: képerősítő–videokamera–A/D konverter–számítógép–képernyő. A számítógépes képfeldolgozás előnyei közül most a kontraszttartomány tetszőleges részének a kiemelését említjük meg.

Filmeken rögzített röntgenképek digitalizálására kifejlesztett szkennerekben (VIII.13. ábra) lézerefény világítja át soronként, pontról pontra a filmet. A pontonként átjutott fény intenzitásával arányos jelfeszültséget egy fényérzékelő detektor (fotodióda vagy fototranzisztor) állítja elő, amelyet A/D konvertálás után számítógépbe juttatnak. Ilyen módon akár régebbi röntgenképek esetén is élvezhetjük a digitális képfeldolgozás előnyeit.



VIII.12. Digitális röntgenkép előállítására alkalmas berendezés sémája

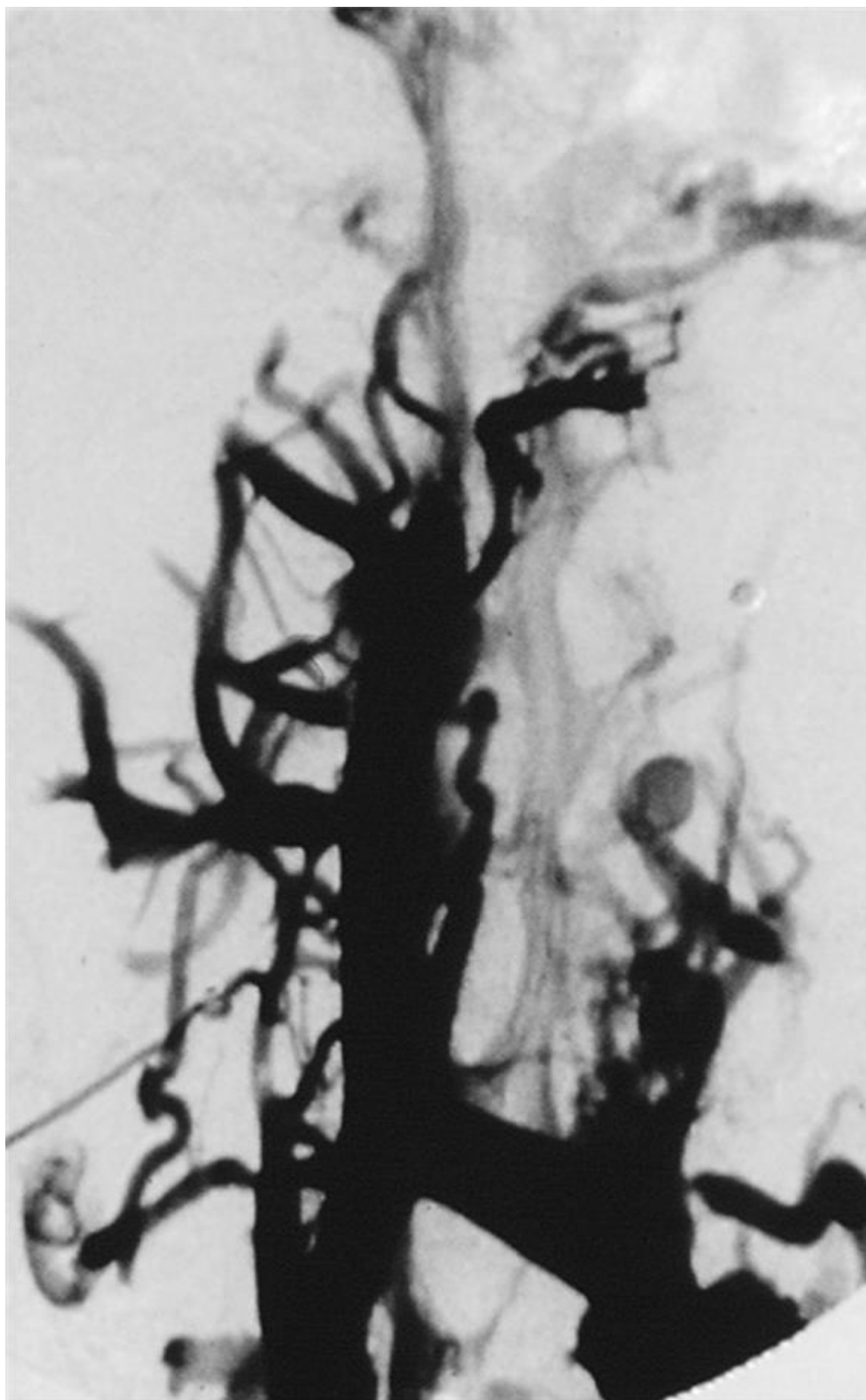


VIII.13. Röntgenképek szkennelésére használható berendezés vázlata

3.1.4. VIII/3.1.4. Digitális szubtrakciós angiográfia (DSA), röviden: digitális angiográfia (DA)

A DSA-módszer a röntgenképerősítő igen fontos gyakorlati alkalmazási területét jelenti. Az angiográfiai diagnosztikai feladatokban ugyanis nem jelent problémát a képerősítő csökkent felbontása, mert a vérerekkel kapcsolatos kérdések megválaszolásához az a felbontás is elegendő. A módszerhez azonban feltétlenül szükséges a számítógépes adatfeldolgozás, amit a képerősítő optikai képe tesz lehetővé.

Az eljárás a következő. A vizsgált erekről (és környezetükről) azonos felvételi pozícióból két képet készítünk: egy ún. bázisképet kontrasztanyag bejuttatása előtt, a másodikat pedig a kontrasztanyaggal együtt. A számítógép képpontonként kivonja a második kép elemeiből az első kép megfelelő elemeit, az intenzitást (mint háttér), és a különbséget jeleníti meg. A különbségi kép így csupán (vagy nagy részben) azokat a tartományokat (vérereket) jeleníti meg, amelyek a kontrasztanyagot tartalmazták. (VIII.14. ábra).



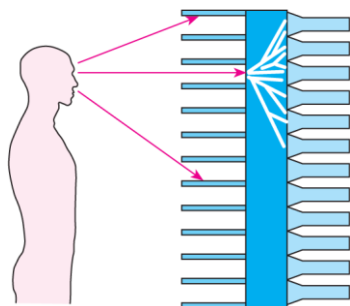
VIII.14. ábra. DSA-kép (www.images.md)

3.2. VIII/3.2. Izotópos nyomjelzéstechnikák: szcintigráfia

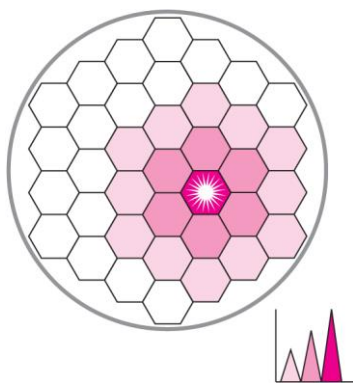
γ -sugárzó radioaktív izotópokat alkalmazhatunk a szervezet metabolizmusának felhasználásával egyes szervek működésének vizsgálatára vagy kóros szövettartományok (tumorok, góccok) kimutatására, lokalizációjára. A γ -sugárzó izotópok azért előnyösek, mert a sugárzás viszonylag kevésbé nyelődik el a szervezetben, és léteznek olyan radioaktív izotópok (pl. ^{99m}Tc), amelyek kémiaiilag ráköthetők a szervezet anyagcseréjében részt vevő molekulákra (pl. glukóz, albumin), és ezáltal bejuttathatók a szervezetbe. Az így radioaktív módon jelölt molekulákat radiofarmakonoknak nevezzük. Megfelelő hordozó- molekula megválasztásával egyes szervek, funkciók szelektíven jelölhetők. Korábban kisméretű szcintillációs kristálydetektorokat (lásd keretes rész) használtak, amelyeket vagy egy adott szerv (pl. pajzsmirigy, vese) közelében elhelyezve az aktivitást az idő függvényében detektálták, vagy léptetve egy adott felületen (szkenelés), annak minden eleméhez tartozó aktivitást mérték (lásd II/3.2.2.). Ma már nagyméretű szcintillációs kristálydetektorokat tartalmazó **gamma-kamerá(ka)t** használnak, amely mozgítás nélkül képes egy nagyobb felületen (~ 50 cm átmérőjű körfelület) aktivitáselosztást meghatározni, és a mérés ismétlésével az időbeli változások a vizsgált tartomány egészére nézve meghatározhatók.

Gamma-kamerával az emberi testbe diagnosztikai céllal bevitt radiofarmakonok bomlását kísérő mindenkori sugárzás kétdimenziós vetületét lehet detektálni. A detektálást szcintillációs kristály segítségével végzik. Ilyen anyag például a NaI, a CsF, a BaF₂. Ezekben az anyagokban a gamma-fotonok becsapódása fényfelvillanásokat eredményez, ami a szcintillációs kristályhoz illesztett fotoelektron-sokszorozó katódjából elektront lök ki.

Ahhoz, hogy a vizsgált szervet leképezzük, definiálnunk kell a térbeli pontokat/tartományokat, ahonnan a meghatározott aktivitás az izotópeloszlási kép egyes elemeit fogja szolgáltatni. Ezt az érzékelőkristály elé helyezett **kollimátor** segítségével lehet biztosítani. A kollimátor nem egyéb, mint a sugárzást elnyelő, elég vastag ólomlemez, amelynek felületére merőlegesen nagyszámú, egymással párhuzamos apró lyukat fűrnak. A szervet elhagyó γ -fotonok közül csak azok érik el a szcintillációs kristályt, amelyek a lyukak tengelyével párhuzamosan vagy csaknem párhuzamosan érkeznek (VIII.15. ábra). Így a kristály felületén a vizsgált szervben található radioaktivitás háromdimenziós eloszlásának kétdimenziós vetületi képe jelenik meg. A jó leképezés érdekében a szcintillációs kristályhoz nem egy, hanem számos fotoelektron-sokszorozót illesztenek (VIII.16. ábra). Erre a célra különleges hatszögletű sokszorozókat fejlesztettek ki, és általában 35–70 darabbal borítják a kamera egyetlen nagy kristályát. A szcintilláció fénye azonban nemcsak egy irányban terjed és a kristály, valamint a detektorok közé helyezett fényvezető rétegben még inkább szétterjed, így egyetlen γ -foton beérkezését több fotoelektron-sokszorozó is érzékeli. Mivel az a fotoelektron-sokszorozó, amelyik a felvillanás közelében helyezkedik el, sokkal több fotont gyűjt be, mint a távolabbiak, a γ -foton becsapódási helye meghatározható. A szcintillációk hely- és időkoordinátái számítógépekben tárolhatók, és a vetületi kép nagyszámú esemény regisztrálása után ún. rekonstrukciós programok segítségével előállítható. Ezek a **szcintigramok** képernyőn szinkódolva megjeleníthetők.



VIII.15. ábra. A gamma-szcintillációs vizsgálatok elve. A radioaktív bomlásból származó fotonok közül csak a szcintillációs kristály elé helyezett kollimátor réseivel párhuzamosan haladók érik el a kristályt. A gamma-fotonok által keltett felvillanásokat a kristályra illesztett foto-elektron-sokszorozókkal detektálják

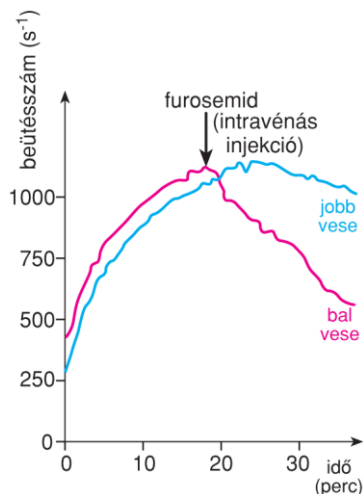


VIII.16. ábra. A szcintillációs kristály és a hozzá csatolt hatszögletű foto-elektron-sokszorozók felülnézetben

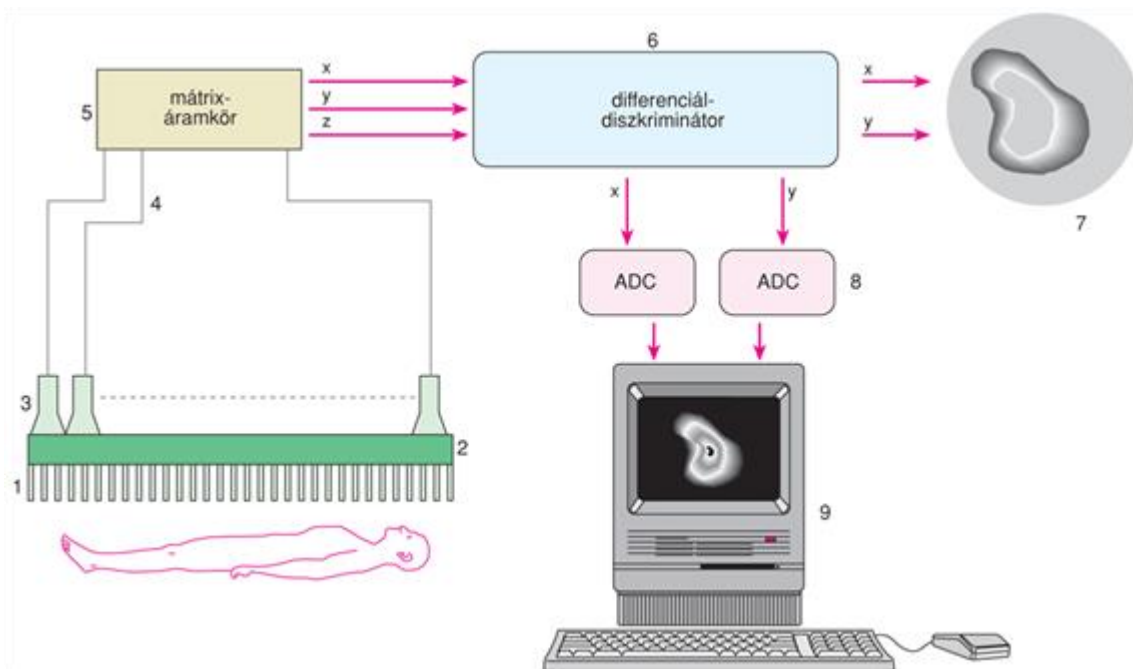
A szcintigramok statikus vagy dinamikus szcintigramok lehetnek. A statikusak egy hosszú ideig tartó felvétel szummációs képeként jelennek meg, míg a dinamikus felvételek mozgóképszerű folyamatfelvételek sorozatai. A folyamatfelvétel bármelyik szcintigramján megjelölhető a vizsgálat szempontjából érdekes területeket, ROI-kat (Region Of Interest), amelyek időbeli aktivitásváltozása grafikon formájában is ábrázolható. A VIII.17. ábrán egy ilyen a vesék működéséről készült ún. renogramot mutatunk be. Bár a γ -sugárzás fotonenergiája nagyobb a röntgendiagnosztika átlagos fotonenergiájánál, és ezért az abszorpció valószínűsége lényegesen kisebb (lásd II/3.1.5. és II/3.2.3. rész), egy-egy radioaktív izotópos diagnosztikai vizsgálat dózisterhelése nem elhanyagolható (pl. pajzsmirigy-szcintigráfia: 5-10 mSv, tumorszcintigráfia: 10-20 mSv is lehet az alkalmazott eljárástól függően).

A VIII.18. ábrán a gamma-kamera egységeit és azok kapcsolatát mutatjuk be.

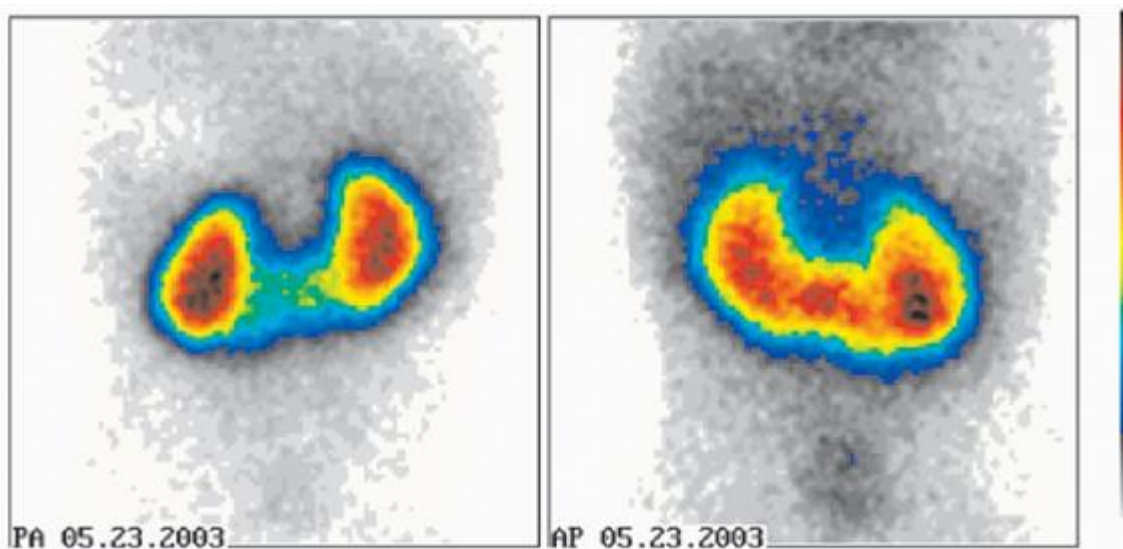
Ha nemcsak a koordinátajeleket, hanem a fotoelektron-sokszorozók kimeneti jeleit is külön-külön digitalizálják, teljesen digitalizált kamerákról beszélünk. Ezekkel lehet a legjobb minőségű szcintigramokat előállítani. A VIII.19. ábra veséről készült szcintigramokat mutat be.



VIII.17. ábra. A vesék működéséről készült. ún. renogram



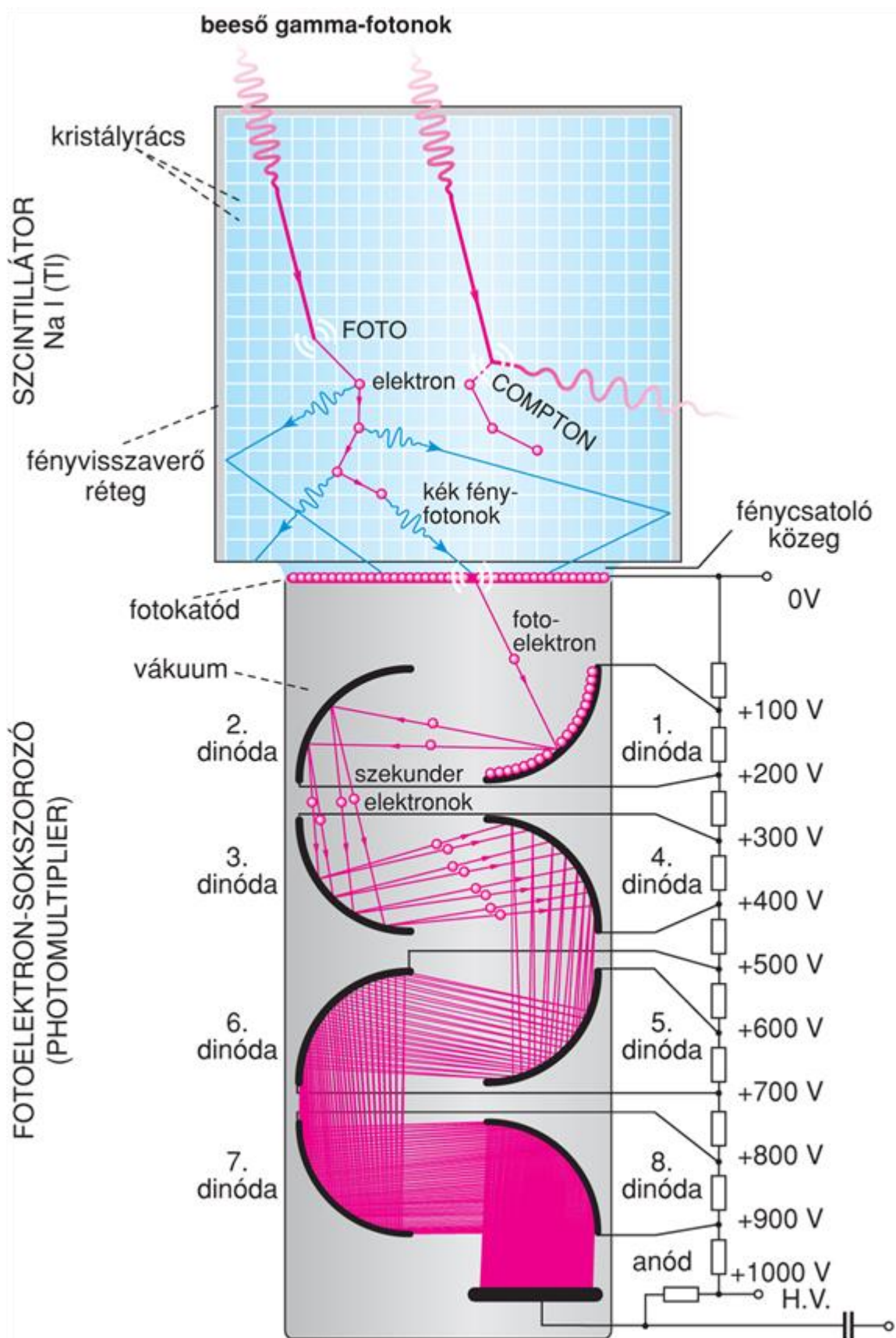
VIII.18. ábra. A szcintillációs gamma-kamera egységei és azok kapcsolata. 1. Kollimátor. Párhuzamosan futó furatokat tartalmazó ólomkorong. A kamera felbontását alapvetően a kollimátor határozza meg. Túlságosan kicsi átmérőjű és hosszú kollimátorok azonban a gyűjtési időt nagyon megnövelik, és az elegendő jel biztosítása miatt a sugárterhelés is nagyon megnő. 2. Szcintillációs kristály. Általában talliummal szennyezett NaI-egy kristály. Technécium leképezéséhez általában 9 mm vastag. 3. A kamera detektorai. Kameratípustól függően 19–100 fotoelektron-sokszorozó van egy kristályra helyezve. 4. Minden egyes fotoelektron-sokszorozó kimenetéről a jeleket az ún. mátrixáramkörbe vezetik. 5. A mátrixáramkör a sok jeltől kiszámolja az X és Y koordinátákat, valamint a becsapódott részecske energiájával arányos Z jelet. 6. Differenciáldiszkriminátor. Innen csak azok a jelek jutnak tovább, amelyek Z jele (energiája) a kiválasztott szűk „ablakba” esik. Így a felbontást lerontó szórt sugárzás kiszűrhető. 7. Tárolócsöves oszcilloszkóp. Ezen az egyes beütések koordinátáinak megfelelő helyen felvillan egy néhány másodperc alatt elhalványuló fénypont. Így kirajzolódik a vizsgált szerv, ami segít a beteg és a kamera megfelelő pozicionálásában. 8. Az X és Y koordinátához tartozó jelszinteket az analóg-digitál jelkonverterek számpárrá alakítják. 9. A számítógép digitalizált képet állít össze, amelynek minden egyes eleme a detektor megfelelő kis részét ért beütések számával egyenlő. Ezek a digitalizált képek képernyőn megjeleníthetők, illetve mágneses vagy optikai háttértárolókra rögzíthetők.



VIII.19. ábra. Statikus veseszcintigráfia ^{99m}Tc DMSA-val a) posterior b) anterior irányból Metz-szűréssel. A képen patkóvese ábrázolódott. (DEOEC Nukleáris Medicina Tanszék, Galuska prof. felvétele)

Szcintillációs kristály és a fotoelektron-sokszorozó

A szcintillációs kristályban egy nagyenergiájú γ - vagy röntgenfoton által fotoeffektus és Compton-effektus (diagnosztikai alkalmazások esetében a párképződéstől eltekinthetünk) útján keltett nagy mozgási energiájú elektron válik szabaddá. Pályája mentén ez az elektron részben újabb, jelentős mozgási energiával rendelkező elektronokat hoz létre, részben elektronokat gerjeszt és így csökken az energiája. Minél kisebb a mozgási energia, annál nagyobb a gerjesztés valószínűsége. A szcintillációs kristályokban a gerjesztett elektronok nagy hatásfokkal, lumineszcencia révén adják le fölös energiájukat. Végeredményben egy nagyenergiájú foton, sok látható fényfotont vált ki. Mivel a folyamat nagyon rövid idő alatt lezajlik, egy fényfelvillanást (szcintilláció) érzékelünk. A keletkezett fényfotonok száma arányos a γ - vagy röntgenfoton által átadott energiával. Fotoeffektus esetében ez gyakorlatilag megegyezik a fotonenergiával, Compton-effektus esetében annál kisebb.



A keletkezett látható fényfotonokat a fotoelektron-sokszorozó alakítja át elektromos jellé. A fotokatódból fotoelektromos hatásra elektronok szakadnak ki. A cső belsejében légtüres tér van, hogy ütközések ne akadályozzák a szabad elektronok mozgását. Az anód és a katód közé nagy pozitív feszültséget kapcsolunk úgy,

hogy a közöttük elhelyezett elektródák az anód felé egyre növekedő feszültség van. Az elektródák elrendezése biztosítja, hogy a szabaddá váló elektronok először az első elektróda felé gyorsulnak. Mikor elérik ezt az elektródot mozgási energiájuk elegendően nagy (pl. 100 V esetén 100 eV) ahhoz, hogy újabb elektronokat legyenek képesek szabaddá tenni. Így egy elektron több új elektródot képes kiváltani (elektronsokszorozás). Ezek gyorsulnak a következő elektróda felé, ahol megismétlődik az előbbi folyamat. Így mire elérik az anódot, a nagyon sok elektron (az eredetinek 10^{10} - 10^{12} -szerese) jelentős nagyságú elektromos áramot hoz létre. Mivel a fényimpulzus nagyon rövid, így ez az elektromos impulzus is az. A folyamatban egy elektromos impulzus megfelel egy γ - vagy röntgenfotonnak. Az impulzus nagysága (amplitúdója) arányos az átadott energia nagyságával, vagyis fotoeffektus esetében a fotonenergiával. Compton-effektus a fentieknek megfelelően kisebb amplitúdójú elektromos impulzusokat hoz létre.

4. VIII/4. Tomográfiai módszerek

A tomográfia elnevezés a „tomos” görög szóból ered, ami réteget/sík szeletet jelent. Az elnevezés lefordítva arra utal tehát, hogy az ide sorolt módszerek az élő szervezet egy sík szeletéről, legtöbbször keresztmetszeti szeletéről szolgáltatnak információt, mégpedig grafikus módon, kép formájában. A családba tartozó egyes módszerekben más-más fizikai paraméter értéke szabályozza a monitoron megjelenő kép elemeinek fényességét, és/vagy színét. A tomogramok tehát egy-egy fizikai paraméter értékének a metszeti síkban/rétegben érvényes eloszlását mutatják. Az egyes módszerekben a szervezeten kívül végzett fizikai mérésekből más-más módon lehet az egyes rétegelemekre jellemző, a kép részleteit szolgáltató paraméterértékeket meghatározni. Vannak olyan fizikai jelenségek (pl. ultrahangimpulzus reflexiója), amelyek természetéből adódóan a mérést úgy lehet megtervezni, hogy az egyes képelemekhez tartozó fizikai paraméterértékeket (pl. ultrahang reflexióképesség) közvetlenül mérni lehessen. Ezeket a módszereket „**Direkt tomográfiai módszerek**” címen soroljuk fel és tárgyaljuk. Más esetekben csupán a rétegelemek tulajdonságainak együttes hatása figyelhető meg a mérési irányok mentén. Ilyen esetekben megfelelően nagy számú jól tervezett módon végrehajtott mérés elvégzése után kapott egyenletrendszer (amelyben a réteg elemeire jellemző paraméterértékek az ismeretlenek) matematikai megoldása után lehet a képelemek adatait meghatározni. Ezek a módszerek az ún. CT módszerek, azaz **számított tomográfiai módszerek**.

VIII.1. megjegyzés. *Elnevezések: NMRI, MRI, MR.* Az atommag-mágneses rezonancián alapuló képkalkító eljárás betűkombinációs elnevezése az angol nyelvű terminológia fordításaként NMRI lenne (Nuclear Magnetic Resonance Imaging). A módszer diagnosztikai bevezetésekor azonban úgy tűnt, hogy a betegekben félelmet vált ki a „Nuclear” szó, mert tévesen ionizáló sugárzással összefüggő módszer benyomását keltette. Emiatt elhagyták ezt a szót az eljárás nevéből, és így MRI-re rövidült. A magyar orvosi gyakorlatban azonban ez a betűkód is túl hosszúnak tűnt, legtöbbször az „I” lemarad a végéről, és csak MR-ként emlegetik.

4.1. VIII/4.1. Mágneses magrezonanciás képkalkítás, MRI – Direkt tomográfia 1.

Az NMR-spektroszkópia (X/4. fejezet) modern és sokoldalú klinikai alkalmazása az ún. mágneses magrezonanciás képkalkítás (Magnetic Resonance Imaging, MRI). Az MRI módszerben a képelemek egyenként kerülnek mérésre, és háromféle fizikai paraméter alapján is megjeleníthetők. Ezek a következők: egy adott fajta mag spinsűrűsége (legtöbbször protonszűrűség), és elektromágneses sugárzás elnyelése révén orientált magspinek kétféle, orientációvesztéshez tartozó relaxációs ideje. A módszer képes a lágy szövetek (agyszövet) részleteinek megjelenítésére **noninvazív** módon anélkül, hogy a beteget ionizáló sugárzások károsító hatásának tennék ki. A módszer alkalmas az anyagcsere-folyamatok jellemzésére is: „funkcionális” MRI.

4.1.1. VIII/4.1.1. Az MRI alapvető mérési elve

Az MR-képkalkítás során a helytől függő információ kinyeréséhez a nagy feloldású NMR-spektroszkópiánál a minta teljes keresztmetszetében a mágneses magrezonancia (X/4.1. alfejezet) egyidejű létrehozásához megkívánt nagy intenzitású és igen nagy homogenitású H_0 külső mágneses teret speciális módon „eltorzítjuk”, nevezetesen a H_0 tér mellett azzal egy irányban, illetve arra merőleges tengelyek mentén szigorúan lineárisan változó mágneses segédtereket (mágneses tér gradienseket) vezetünk be.

A képkalkító eljárás első lépéseként a vizsgálandó objektumon – például emberi testen – belül egy gerjesztésre kiválasztott mintaszületet jelölünk ki a H_0 külső mágneses térrel egyező irányban (z tengely) alkalmazott télerősség-gradiens bekapcsolásával. Ha ilyen körülmények között a vizsgált objektumot a rezonanciafeltételnek megfelelő frekvenciájú rádiófrekvenciás térrel sugározzuk be, a továbbiakban csak az objektum z tengelyre

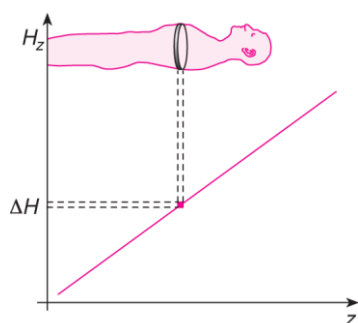
merőleges irányban elhelyezkedő, vékony szeletéből detektálhatunk NMR-jelet, mivel csak az itt elhelyezkedő protonokra teljesebb a rezonanciafeltétel:

$$hf_0 = g_N \cdot \mu_N \cdot H_0,$$

(VIII.3.)

ahol g_N a mag g-faktora, μ_N a magmagneton, H_0 a külső mágneses tér térférsége (lásd X/4.1. fejezet).

Szigorúan lineáris mágneses tér gradiens alkalmazása esetén a mintaszelet vastagsága a besugárzásra használt rádiófrekvenciás jel frekvenciabizonytalanságától (sávszélesség), illetve a rezonanciafeltétel szerint annak megfelelő mágneses tér bizonytalanságtól (ΔH) függ (VIII.20. ábra).

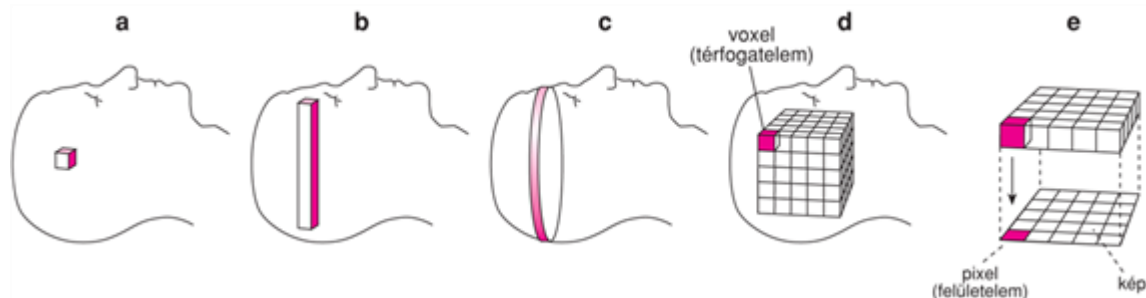


VIII.20. ábra. A mágneses magrezonanciás képképzés (MRI) első lépéseként a vizsgálandó objektumon, például emberi testen belül gerjesztésre kiválasztott mintaszeletet jelölünk ki a külső mágneses térrel egyező irányban (z tengely) változó mágneses tér alkalmazásával

4.1.2. VIII/4.1.2. A szekvenciális pont módszer

A legegyszerűbb MR képképző módszer, a szekvenciális pont módszer esetén a H_0 külső mágneses tér által kitérített z irányra merőleges x és y tengely menti további, időben gyors egymásutánban alkalmazott mágneses tér gradiens bevezetésével egy ún. érzékeny térfogatelem (voxel) definiálható a vizsgált objektum belsejében tetszőleges helyen. Az alkalmazott három mágneses tér gradiens hatására a mintán belül NMR-rezonancia csak az így kiválasztott voxelben jön létre megfelelő besugárzási frekvencia használata esetén (VIII.21a ábra). A mintát körülvevő tekercsekben detektálható, spinsűrűséggel arányos NMR-jel így kizárólag ebből a mm^3 nagyságrendbe eső térfogatról származik. A gradiens meredekségének egymástól független változtatásával az érzékeny térfogat az emberi testen belül mozgatható, és a vizsgált mag spinsűrűségének térbeli eloszlása a testen belül meghatározható. A módszer egyszerűsége vitathatatlan, elterjedésének főként lassúsága vetett gátat.

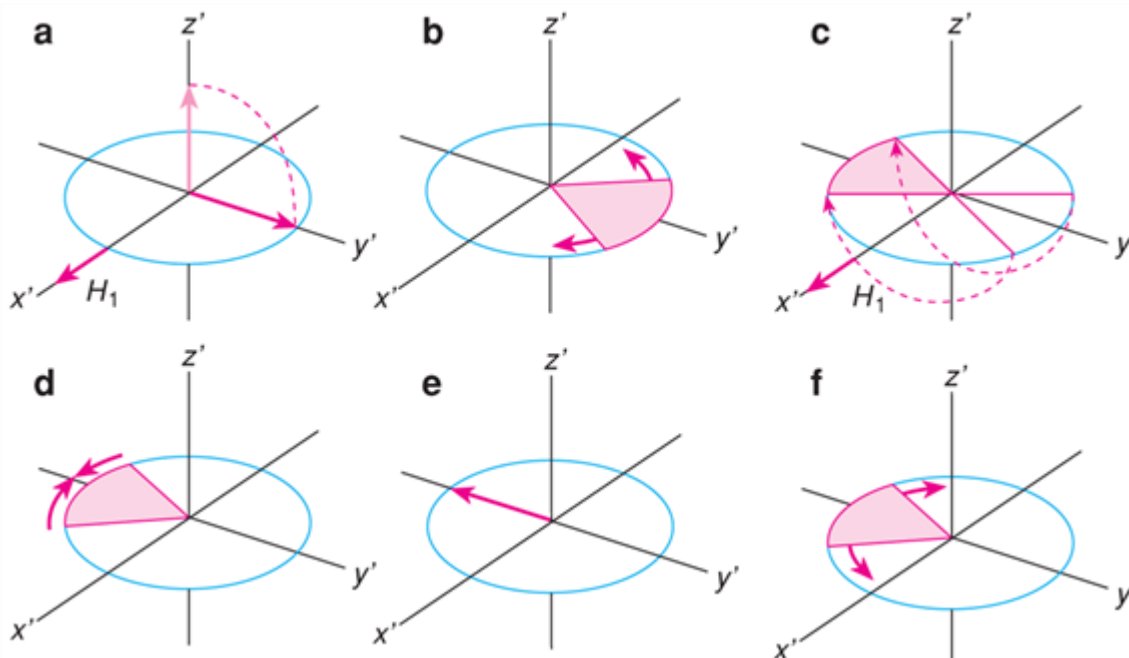
A térfogat elemként való letapogatáson kívül létezik olyan NMR mérési eljárás, amely segítségével egyidejűleg lehet előállítani NMR-jelet a testen átmenő egyenes mentén elhelyezkedő n térfogatelemből Fourier-transzformáció segítségével. Ez a módszer természetesen jóval gyorsabb az előzőnél (VIII.21b ábra).



VIII.21. ábra. A pontról-pontra való letapogatáson a) kívül létezik olyan NMR mérési eljárás, amelynek segítségével egyidejűleg lehet előállítani NMR-jelet a testen átmenő egyenes mentén elhelyezkedő n térfogatelemből Fourier-transzformáció segítségével b). A kétdimenziós Fourier-transzformáció (2DFT) segítségével a minta kiválasztott síkjában elhelyezkedő nn térfogatelemből származó NMR-jel egyidejű észlelése is lehetséges. Az objektum kiválasztott síkjában elhelyezkedő voxelek d) spinsűrűsége, vagy relaxációs idő értékei a vizsgálat eredményeként előálló kétdimenziós, síkbeli kép látótételemeinek (pixel) jellemzőiben tükröződnek e)

Spin-echo szekvencia

Ahhoz, hogy kizárólag a vizsgált minta NMR-tulajdonságait vizsgálhassuk, meg kell szabadulnunk a képképzést hátrányosan befolyásoló számos körülménytől (mágneses tér inhomogenitás, jelgyengülés). A probléma kiküszöbölésére a modern MRI-készülékek a Hahn által 1955-ben bevezetett spin-echo impulzusszekvenciát alkalmazzák (lásd 1. ábra). A módszer az előzőekben tárgyalt különböző rádiófrekvenciás impulzusok kombinált, időben egymást követő ún. szekvenciális alkalmazását feltételezi. A Hahn-féle spin-echo szekvencia egy 90° -os impulzussal kezdődik, amelyet meghatározott várakozási idő (τ) után egy 180° -os impulzus követ (lásd X/4.1. alfejezet). A jelnek megfelelő echót az első impulzus végétől számított 2τ idő elteltével észleljük. Az előbbi impulzus-szekvencia alatt a következő történésekkel kell számolnunk, amennyiben a X/4.1. részben bevezetett forgó koordináta-rendszerből végezzük a megfigyelésünket.

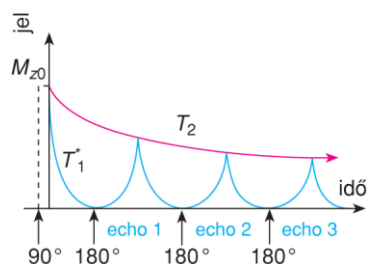


1. ábra. A Hahn-féle spin-echo szekvencia részletei

A szekvencia első tagját képező 90° -os impulzus (H_1) következtében a minta/szövet mágnesezettség vektorát az egyensúlyi z' tengellyel párhuzamos helyzetéből leforgatjuk az x',y' síkba, az y' tengellyel párhuzamos helyzetbe (1a ábra). A 90° -os impulzus (H_1) megszűnése után a minta különböző helyein lévő és különböző lokális mágneses teret érző spinek az ideálshoz (alap-rezonanciafrekvencia) képest mindkét irányban kissé eltérő körfrekvenciával fognak precessálni, ennek megfelelően fokozatosan eltávolodnak az y' tengelytől, egymáshoz képesti fázisukat fokozatosan elvesztik (1b ábra). Adott várakozási idő (τ) után egy 180° -os impulzus (ismét H_1 , azonban 2-szer hosszabb ideig) alkalmazásával a széttartó spinsapat átforgatható a negatív y' tengely irányába (1c ábra), ahol korábbi fázisvesztésük irányát megőrzik és ennek megfelelően a nyílak irányában elkezdnek egymáshoz közeledni (1d ábra). A közeledő spinsereg az „átfordításukat” követően pontosan τ idő elteltével újra fókuszálódik a negatív y' tengely mentén erős jelet (echo) indukálva a detektortekercsben (1e ábra). A jel alakját illetően egy emelkedő fázissal kezdődik, majd maximális értékének elérése után nullára csökken.

A spinek az 1e ábrán szemléltetett helyzet után ismét defokuszálódnak (1f ábra), és a fenti folyamatot a τ időközök betartva megismételve újabb és újabb echók észlelhetők (2. ábra). Az egymást követő echók

amplitúdója a mintát/szövetet jellemző spin-spin relaxációs időnek megfelelő exponenciális függvény szerint csökken.



2 ábra. A Hahn-féle spin-echo szekvencia során a mágnesszűtség újra fókuszálódik erős jeleket (echók) indukálva a detektortekercsben. Az egymást követő echók amplitúdói a mintát/szövetet jellemző spin-spin relaxációs időnek megfelelő exponenciális függvény szerint csökkennek

4.1.3. VIII/4.1.3. A kétdimenziós Fourier-transzformációs (2DFT) módszer

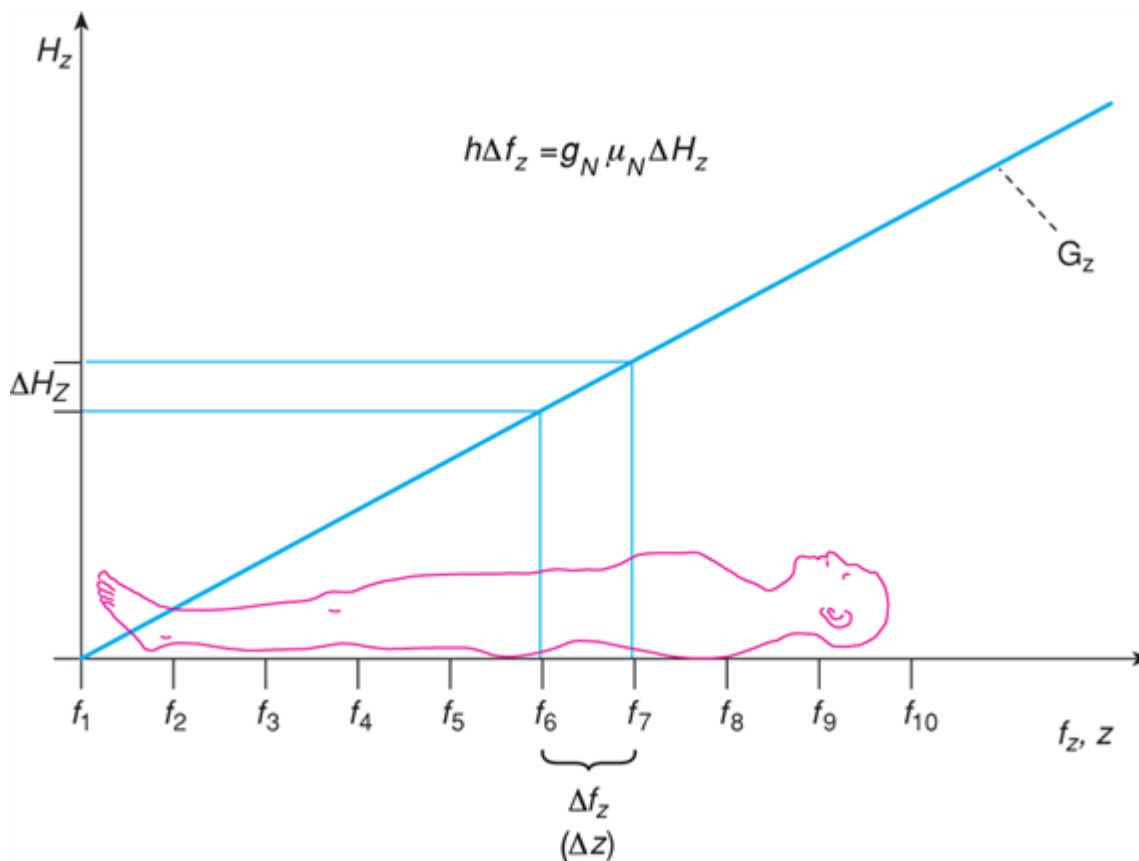
A módszer segítségével a minta kiválasztott síkjában elhelyezkedő $n \cdot n$ térfogatelemből származó NMR-jel egyidejű észlelése is lehetséges, amelynek során a vizsgált síkbeli proton (vagy más NMR-mag) spinsűrűség-eloszláshoz jutunk. Ezt a módszert planáris (síkbeli) képkalkotásnak nevezik (VIII.21c ábra). A vizsgálat eredményeként előálló kétdimenziós, síkbeli kép $n \cdot n$ látótérelomból (pixel) áll, amelyek adott kód szerint az objektum kiválasztott síkjában elhelyezkedő térfogatelemek (voxel) spinsűrűség vagy relaxációs idő értékeit tükrözik mintegy a térfogatelemek alaplapjára kivetítve (VIII.21d, e ábra). Az NMR-paraméterek értékeinek pixelek szerinti megjelenítésében fekete-fehér sötételési, illetve színskálás kódolási eljárásokat alkalmaznak. A napjainkban elterjedt MRI-készülékek szinte kizárólag a kétdimenziós Fourier-transzformáció elvén működnek, ennek megfelelően a továbbiakban csak ennek részleteit tárgyaljuk.

A szekvenciális pont módszer által szolgáltatott spinsűrűség-eloszláson túlmenően a 2DFT MRI olyan vizsgálati módszer, amely az emberi test különböző részeit jellemző eltérő spin-spin és spin-rács relaxációs tulajdonságokat is képes megjeleníteni, és így képes az abból fakadó diagnosztikai lehetőségeket kiaknázni.

4.1.4. VIII/4.1.4. Az axiális irányú mágneses tér által kiválasztott szelet voxeleinek elkülönítése

A vizsgálati térfogaton (emberi testen) belüli térbeli tájékozódásra, a szekvenciális pont módszerhez hasonlóan, a 2DFT MRI-eljárás során is három egymásra merőleges mágneses tér gradienst alkalmaznak. A gradiensek alkalmazása időben elkülönült, egymást követő.

Először, a korábbiakban leírt módon, a vizsgálandó objektumon, például emberi testen belül egy gerjesztésre kiválasztott mintaszeletet jelölünk ki a szeletkijelölő gradiens segítségével. A vizsgált térfogatelemeket (voxeleket) tartalmazó mintaszelet általában a H_0 külső mágneses térrel egyező irány (z tengely) mentén, arra merőlegesen helyezkedik el. Ennek megfelelően a szeletkijelölő gradiens segítségével az emberi testen belül a z irány mentén tájékozódhatunk. A z tengely mentén a különböző helyekhez különböző NMR-rezonanciafrekvenciák tartoznak. A két fizikai mennyiség, a hely és a frekvencia közötti összefüggést a mágneses tér gradiensértéke teszi egyértelművé. A vizsgálat számára kijelölt szelet vastagságát a szeletkijelölő gradiens meredeksége és a besugárzó rádiófrekvenciás tér sávzsélessége határozza meg a rezonanciafeltétel szerint (VIII.22. ábra).

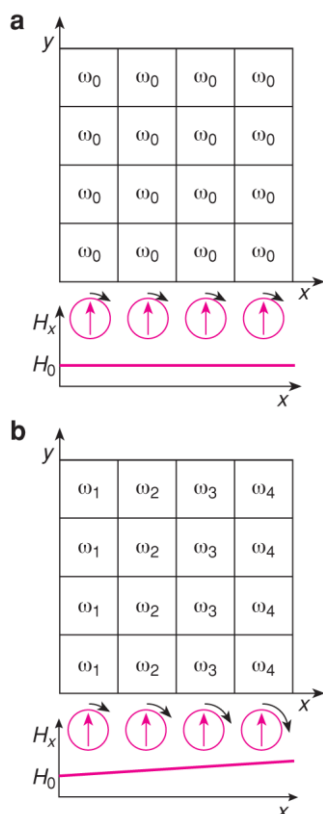


VIII.22. ábra. Az MRI-vizsgálat során gerjesztésre kiválasztott mintaszletet jelölünk ki a szeletkijelölő gradiens, G_z segítségével, így annak segítségével az emberi testen belül a z irány mentén tájékozódhatunk. A z tengely mentén a különböző helyekhez eltérő NMR-rezonanciafrekvenciák tartoznak. A két fizikai mennyiség, a hely és a frekvencia közötti összefüggést a mágneses tér gradiensértéke teszi egyértelművé. A vizsgálat számára kijelölt szelet vastagságát a szeletkijelölő gradiens meredeksége és a besugárzó rádiófrekvenciás tér sáv szélessége, ΔH_z határozza meg a rezonanciafeltétel szerint

A kijelölt mintaszleten belül a 2DFT MRI-módszernél az egymásra és a z tengelyre merőleges frekvencia és fázis szerinti kódolást megvalósító további két mágneses tér gradiens segítségével tájékozódhatunk. Ezek a gradiensok a később részletezendők szerint a mintaszlet voxeleinek oszlopai és sorai mentén jelölik ki az adott pillanatban vizsgált voxel helyét.

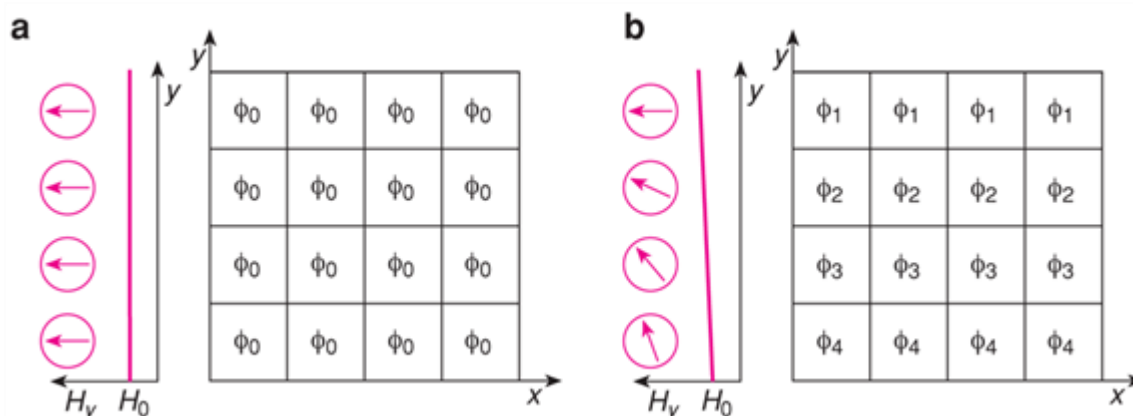
A frekvencia szerinti kódolás megértéséhez tudnunk kell, hogy további gradiens hiányában a szeletkijelöléssel egyidejű NMR-gerjesztő impulzus alkalmazása esetén a szelet összes voxelében elhelyezkedő minden egyes magspin azonos ω_0 körfrekvenciával fog precesszálni, mivel a mágneses tér erőssége az összes voxelben azonos, H_0 értékű (VIII.23a ábra).

A mintaszleten belül a szeletkijelölő gradiensre merőlegesen bekapcsolt frekvenciakódoló gradiens hatására a különböző oszlopokban elhelyezkedő voxelek NMR-rezonanciafrekvenciái egymástól eltérő értéket vesznek fel (VIII.23b ábra). A rezonanciafeltételnek megfelelően a mágneses tér növekedésével a precessziós frekvencia nő. A lineáris frekvenciakódoló mágneses tér gradiens következtében az oszlopok helye és az oszlopokban érvényes NMR-frekvencia között egyértelmű kapcsolat áll fenn. A különböző oszlopokat azonosító eltérő precessziós frekvenciák csak a frekvenciakódoló gradiens élettartama alatt állnak fenn, a gradiens kikapcsolása után röviddel a frekvenciakülönbségek megszűnnek. Ebből egyenesen következik, hogy a magspinek frekvenciakódolt oszlop szerinti elhelyezkedésének kiolvasására a frekvenciakódoló gradiens fennállása alatt kell sort keríteni.



VIII.23. ábra. A szeletkijelöléssel egyidejű NMR gerjesztő impulzus alkalmazása esetén a szelet összes voxeljében elhelyezkedő minden egyes magspin azonos ω_0 körfrekvenciával fog precesszálni, mivel a mágneses térerősség az összes voxelben azonos H_0 értékű a). A szeletkijelölő gradiensre merőlegesen bekapcsolt frekvenciakódoló gradiens hatására a különböző oszlopokban elhelyezkedő voxelek NMR-rezonanciafrekvenciái eltérő értéket vesznek fel. b)

A frekvencia szerinti kódolás folyamatának felvázolása során szándékosan eltekintettünk egy lényeges jelenségtől, nevezetesen attól, hogy az alkalmazott mágneses tér gradiens időtartama alatt a különböző frekvenciával precesszáló spinok egymáshoz képest eltérő mértékben fordulnak el. A nagyobb körfrekvenciájú precesszió ugyanis azonos idő alatt nagyobb mértékű elfordulást eredményez. Ezt a jelenséget használják ki a mintaszületen belüli különböző sorokban elhelyezkedő magspinok azonosítására a harmadik, a másik kettőre merőleges ún. fáziskódoló gradiens alkalmazásával. Amennyiben a fáziskódoló gradiens alkalmazása előtt az összes magspin azonos elfordulási szög helyzetben volt (VIII.24a ábra), a fáziskódoló gradiens hatására, annak időtartama alatt ez az állapot megváltozik. A magspinok fázishelyzetét jellemző szögelfordulások a mágneses tér gradiens mentén különböző értéket vesznek fel (VIII.24b ábra). A lineáris fáziskódoló mágneses tér gradiens következtében a sorok helye és a sorokban kialakult fázishelyzet között egyértelmű kapcsolat áll fenn. Fontos megjegyezni, hogy a fáziskódoló gradiens kikapcsolása után a különböző sorok között kialakult fáziskülönbségek nem szűnnek meg. Ennek megfelelően az oszlop szerinti spinhelyzetek azonosítását a fáziskódoló gradiens kikapcsolása után végzik.



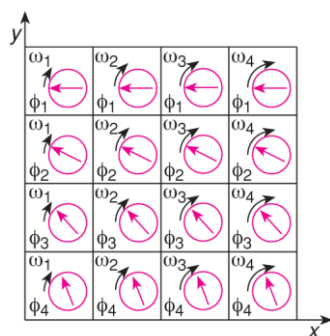
VIII.24. ábra. A mintaszelenen belüli, különböző sorokban elhelyezkedő magspinek azonosítására a szeletkijelölő és a frekvenciakódoló gradiensekre merőleges, ún. fáziskódoló gradienst alkalmaznak. A fáziskódoló gradiens alkalmazása előtt az összes magspin azonos elfordulási szög helyzetben helyezkedik el a). A fáziskódoló gradiens hatására, annak időtartama alatt ez az állapot megváltozik. A magspinek fázishelyzetét jellemző szögelfordulások a mágneses tér gradiense mentén különböző értéket vesznek fel b)

A magspinek kombinált frekvencia és fázis szerinti kódolása megteremti a lehetőséget a vizsgálati síkban az oszlop és sor szerinti mátrixszerű hely meghatározására az x, y derékszögű koordináta-rendszerben (VIII.25. ábra). Az idő függvényében megmért és rögzített NMR-jelekből a frekvencia- és fázisinformációk meghatározása a 2D Fourier-transzformáció segítségével megy végbe.

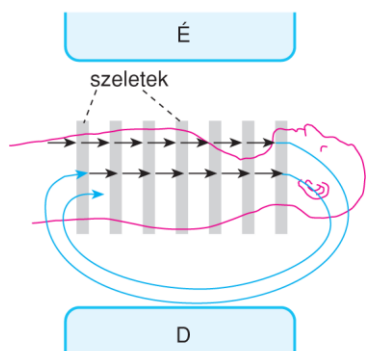
A teljes vizsgálati mátrix letapogatása viszonylag hosszú időt vesz igénybe, ennek megfelelően az MRI-vizsgálatok egyik fő törekvése a vizsgálati idő csökkentése. A vizsgálati idő csökkentésére a leírt impulzusszekvencia magától kínálta a lehetőséget, ugyanis két szeletkiválasztó gerjesztő impulzus alkalmazása között – mint azt már korábban taglaltuk – viszonylag hosszasan (0,4–1,8 s) várakoznunk kell a spin-rács relaxáció folyamatának végbemenetelére várva.

E holtidő alatt, amelyet egy adott szelet vizsgálata során nem lehet elkerülni, a vizsgált szelet melletti, NMR-szemponthól érintetlen területeken hasznos vizsgálatok végezhetők. A fejlesztés végeredményeként alakult ki a modern MRI-készülékekben használatos ún. „többszelet”-technika, amelynek során a kizárólag egy szeleten belüli vizsgálódás helyett szeletről szeletre való előrehaladás is végbemegy (VIII.26. ábra). A vizsgálati ciklus végén így az összes szelet mágneses magrezonanciás képe a rendelkezésünkre áll.

Az MR-képképzéssel nyerhető információ lényegesen különbözik a röntgensugárzást felhasználó módszerek által előállított képtől. Míg a röntgensugárzás elnyelésén alapuló módszer képelemeinek fényessége lágy szöveteknél leginkább a megfelelő voxel sűrűségére jellemző (VIII/4.3. alfejezet), az MR-képben a kontrasztot az NMR-paraméterek, a spinenzitás (elsősorban protonszűrűség), és a relaxációs idők (T_1 , T_2) szolgáltatják. Az MRI-képképzés során a kontraszt kialakulása az alkalmazott impulzusszekvencia paramétereinek változtatásával befolyásolható. Így alakítható ki, hogy a közvetlenül mérhető indukált feszültségjelek pixelenként főként melyik (pl. T_1 vagy T_2) paraméterre legyenek jellemzőek.



VIII.25. ábra. A magspinek kombinált, frekvencia és fázis szerinti kódolása megteremti a lehetőséget a vizsgálati síkban (x, y) oszlop és sor szerinti, mátrixszerű helymeghatározásra

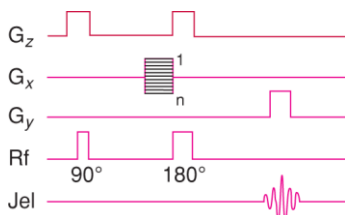


VIII.26. ábra. A modern MRI-készülékekben használatos időkímélő „többszelet”-technika, amelynek alkalmazásával a spin-rács relaxációs idő eltelte alatt szeletről szeletre való előrehaladás is végbemegy

A vizsgált szeletből származó MRI-kép megalkotására spin-echo-val.

E folyamat során a mágneses tér gradiens impulzusok és rádiófrekvenciás impulzusok összetett kombinációit kell alkalmaznunk folyamatosan változó paraméterekkel. Az egy képelemhez tartozó voxelből származó információ kinyeréséhez szükséges teendőket az ábra foglalja össze. Első lépésként a szeletkijelölő gradienssel (G_z) egy időben egy 90° -os rádiófrekvenciás impulzussal a vizsgálandó szeleten belüli összes magspint gerjesztett állapotba hozzuk. Következõnek a fázis szerinti kódolás megvalósítására, azaz a vizsgálati mátrixon belüli sor kiválasztására bekapcsoljuk egy adott intenzitással a G_x gradienst. Röviddel ezt követõen alkalmazzuk a Hahn-féle spin-echo szekvencia második, 180° -os rádiófrekvenciás impulzusát. E hatásnak szeletspecifikusnak kell lennie. Ennek érdekében a 180° -os impulzus alatt ismételt bekapcsoljuk a szeletkijelölõ G_z gradienst. A folyamat utolsó lépéseként alkalmazzuk a frekvenciakódoló G_y gradienst a vizsgálati mátrixon belüli oszlop kiválasztására. Ezt a Hahn-féle elsõ spin-echo megjelenésének idõpontjára idõzítjük. Az echo egyben a vizsgálat hasznos végeredménye, a kiválasztott voxelből származó fázis- és frekvenciakóddal modulált információ.

A teljes szeletet képviselõ mátrix letapogatásához a már részletezett folyamatot a mátrixban kijelölt voxelek számának megfelelõen meg kell ismételni, miközben a fázis- és frekvenciagradiensek amplitúdója lépésről lépésre változik. Valójában a szeletkijelölést követõen alkalmunk nyílik egy teljes oszlop letapogatására, amikor is az elõbbieken részletezett impulzusszekvenciának csak a szeletkijelölõ impulzus után következõ részét ismételjük meg úgy, hogy a fáziskódoló gradiens értékét lépésről lépésre változtatjuk a frekvenciakódoló gradiens változatlan értéke mellett. A következõ oszlopra való áttérésnél a frekvenciakódoló gradiens értékét is egy lépcsõvel megnöveljük, és az oszlopon belüli sorok letapogatására a fáziskódoló gradiens összes lehetséges értékét megismételjük.



A vizsgált szeletből származó MRI-kép megalkotása során mágneses tér gradiens impulzusok és rádiófrekvenciás impulzusok összetett kombinációját kell alkalmaznunk folyamatosan változó paraméterekkel

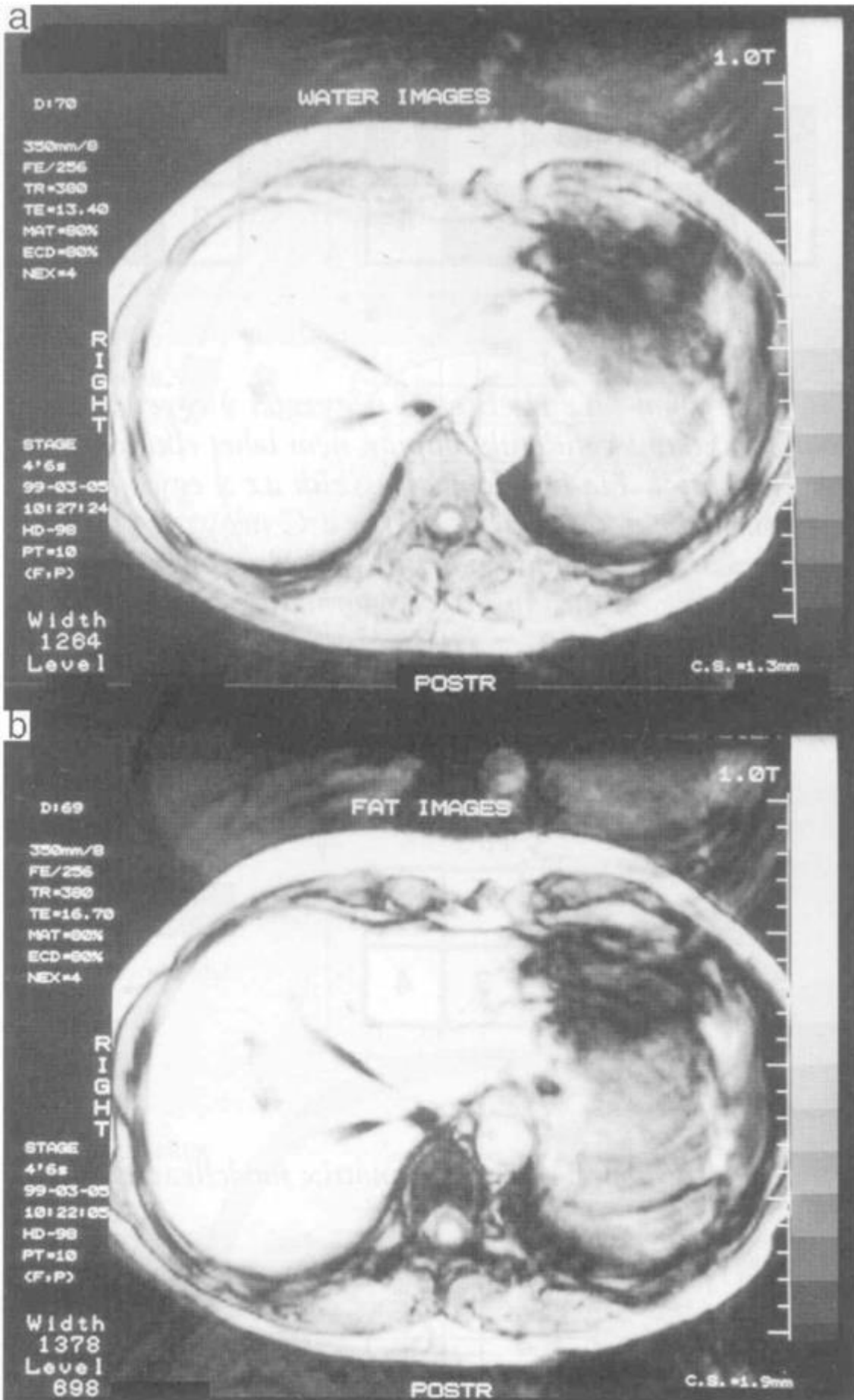
4.1.5. VIII/4.1.5. Az MRI speciális területei és technikái

A módszer a problémák igen széles körében alkalmazható. Különösen nagy segítséget jelent például agyi és egyéb lágyzöveti tumorok kimutatására, figyelembe véve, hogy a vízben gazdagabb szövetek protontónusú képen jól elkülöníthetők. Az MRI a koponyaûr és a gerincvelõ kóros folyamatainak diagnosztizálására különösen alkalmas, hiszen a központi idegrendszert körülvevõ nagy röntgensugár-elnyelõ képességgel rendelkező csontok itt a képképzést nem befolyásolják. A rendezett szerkezetû szövetekben (izom, máj) a rendezetlenhez képest rövidebb spin-rács relaxációs idő a T_1 tónusú képen azonosítható, valamint tapasztalat szerint a daganatszövetekben megnyúlt spin-spin relaxációs idő a T_2 tónusú képen észrevehető.

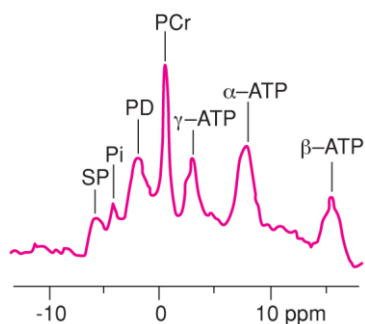
A mágneses magrezonancia képképzés modern és fejlődés alatt álló területe a **kémiai eltolódás képképzés** (Chemical Shift Imaging). Ez az eljárás kihasználja, hogy a különböző kémiai környezetben lévő magspin precessziós frekvenciája eltérő, és így az eltérő kémiai környezetben elhelyezkedő magoktól származó jelek elkülöníthetők és külön-külön képként jeleníthetők meg. Protonmágneses képképzés esetén (VIII.27. ábra) az adott testrészen elhelyezkedő víz (felül) és zsírszöveti eredetű jelek (alul) különíthetők el.

Az NMR-módszer egy speciális változata az ún. **mágneses rezonancia spektroszkópia**, amikor az emberi test felületére helyezett tekercsek segítségével az annak belsejében lejároló anyagcsere-folyamatok követhetők nyomon. E módszer keretében főként a ^{31}P -tól származó mágneses magrezonancia jelek detektálásáról van szó, és ennek kapcsán például meghatározhatók a test kiválasztott pontján az ATP, az ADP, a kreatin-foszfát és az anorganikus foszfátmolekulák koncentrációi (VIII.28. ábra). A jelcsúcsok arányainak megváltozása tipikusan jellemzi a különböző szövetek, például a szívizomszövet-sérülés (ischaemia) kapcsán történt működésváltozását.

Az ún. **funkcionális MRI-** (fMRI-) módszert S. Ogawa írta le 1990-ben, és azóta nagy figyelmet kapott az agyi funkciók vizsgálatában. Az ötlet lényege az, hogy a vérben levő hemoglobin oxy- és deoxyállapotához eltérő mágneses tulajdonságok tartoznak. Ha a stimulus nyomán az agy egy területén idegi aktivitás alakul ki, ez fokozott vérellátással és így az oxyHb-mennyiség növekedésével jár. Ez a spin-spin relaxációs idő növekedéséhez vezet, azaz az indukciós feszültségjel a mérés időpillanatában a deoxyállapothoz képest megnövekszik. A stimulus után a jel visszaáll a nyugalmi állapotba. A módszer tehát nem jár különleges technikai feltételekkel, nem kíván paramágneses jelölőanyagokat, teljesen natív körülmények között végrehajtható. Az MRI-kép felbontása alapján az egyes funkciók agyi területei igen nagy pontossággal kiválaszthatók és jól vizsgálhatók. Mivel a módszer az agyi funkciót a vérellátáson keresztül vizsgálja, a módszer a **BOLD** nevet kapta a „Blood Oxygen Level Dependent signal” kifejezés kezdőbetűi alapján.



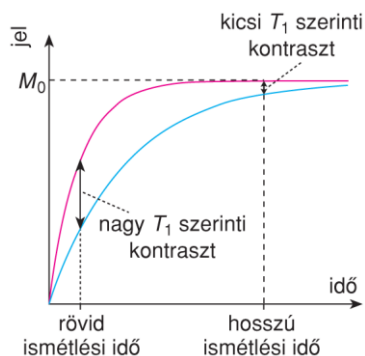
VIII.27. ábra. Protonmágneses képképzés esetén a kémiai eltolódás képképzés segítségével az adott testrészen elhelyezkedő víz (felül) és zsírszövet eredetű jelek (alul) különíthetők el



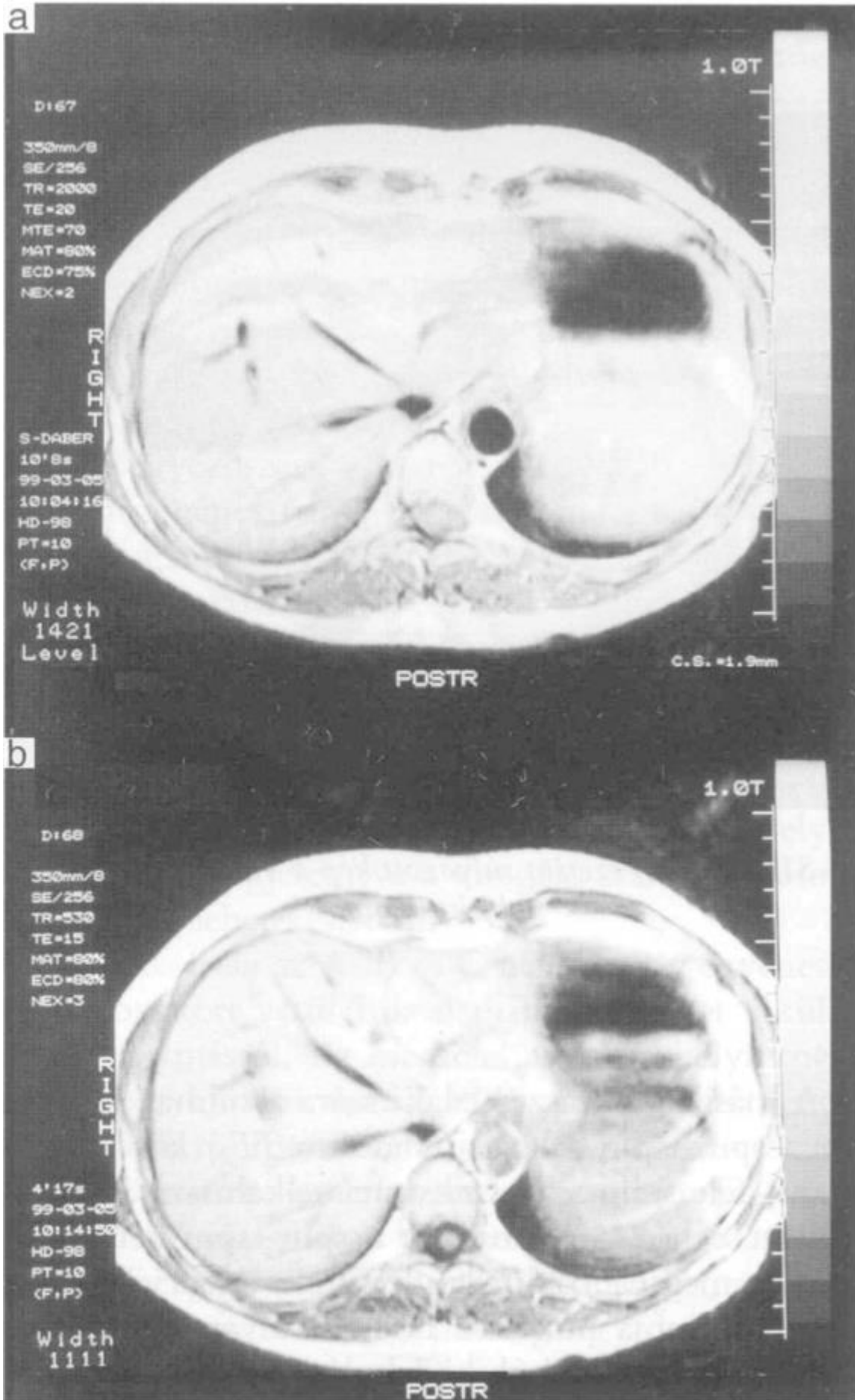
VIII.28. ábra. Emberi fejből származó ³¹P mágneses rezonanciaspektrum

Az MRI-kép kontrasztjának kialakítása

Az MRI-képképzés az egymást követő 90°- és 180°-os impulzusból álló Hahn-féle spin-echo szekvencia meghatározott számú ismétléséből áll. Az egyes ismétlések között mágneses magrezonancias jel (echo) keletkezik, amely feszültséget indukál a detektortekercsben. A keletkező jel amplitúdója függ a ciklus elején rendelkezésre álló, z irányba mutató eredő mágneszettség-vektor, M_z nagyságától. Könnyen belátható, hogy az echo amplitúdója a maximális értéknél kisebb lesz, amennyiben az előző ciklus alatt valamilyen hatás során az M_z vektor amplitúdója lecsökken. Az M_z vektor maximális értékét és egyben egyensúlyi állapotát a spin-rács relaxáció- folyamata során szerzi vissza, ezért a különböző testszövetek eltérő spin-rács (T_1) relaxációs ideje hatással van a mintaszövet különböző elemeiből (voxel) detektálható echoamplitúdókra. E hatás eredményeként alakul ki az MRI-képeknek az emberi test belső szerkezetét tükröző T_1 szerinti kontrasztja. Az MRI-kép kontrasztja a T_R repetíciós idő változtatásával mesterségesen befolyásolható (1. ábra). A 2. ábrán spinsűrűség (a) képhez képesti kontrasztfokozódás látható az előbbi hatás következtében (b). A T_1 relaxációs idővel súlyozott felvételek készíthetők. A T_1 szerinti súlyozott felvételek különösen alkalmasak a különböző légyszöveti daganatok, így az agytumороk kimutatására. A jelenség alapja az az általános észlelés, amely szerint a daganatos szövetek spin-rács relaxációs ideje durván másfélszerese a normál szövetek hasonló értékének.

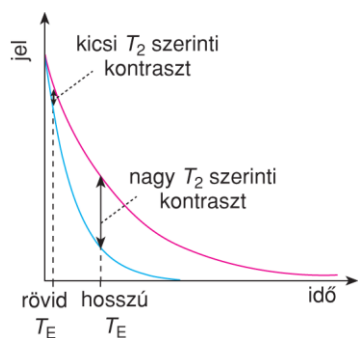
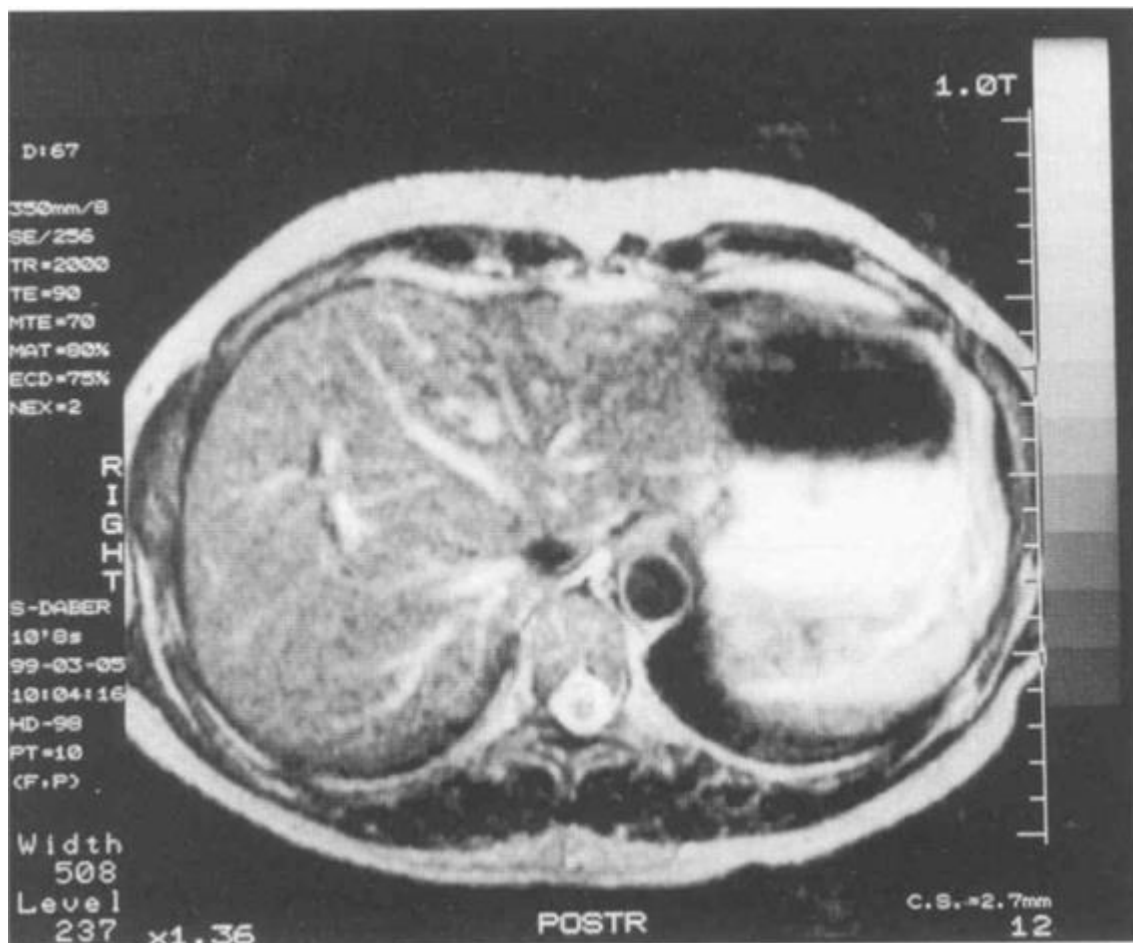


1. ábra. A T_1 szerinti kontraszt befolyásolása az ismétlődési idő változtatásával



2. ábra. Normál spindenzitású kép (a) és T_1 szerint súlyozott kép (b) összehasonlítása

A másik kontraszt kialakítására alkalmas paraméter a spin-spin relaxációs időhöz (T_2) kötődik. A Hahn-féle spin-echo szekvencia alkalmazásával előállított echók amplitúdója a spin-spin relaxációs időnek megfelelő időállandóval exponenciális függvény szerint a nullához tart. E folyamat során az egymást követő echók kialakulása közötti időt (T_E) a kísérletező határozza meg a 90° - és a 180° -os rádiófrekvenciás impulzusok közötti időkülönbség beállításával. A T_E echoidó ugyanis pontosan a két rádiófrekvenciás impulzus között eltelt idő kétszerese. Rövid echoidó kiválasztása esetén a jelcsökkenés mértéke közel azonos a mintaszeleten belül elhelyezkedő különböző T_2 relaxációs időekkel rendelkező szövetfélésegekben, amennyiben viszont az echoidót növeljük, a T_2 szerinti kontraszt fokozható (3. ábra). A T_2 szerinti súlyozással az MRI-felvételen egyes anatómiai részletek a normál spinsűrűséget tükröző képhez képest kihangsúlyozhatók (4. ábra).

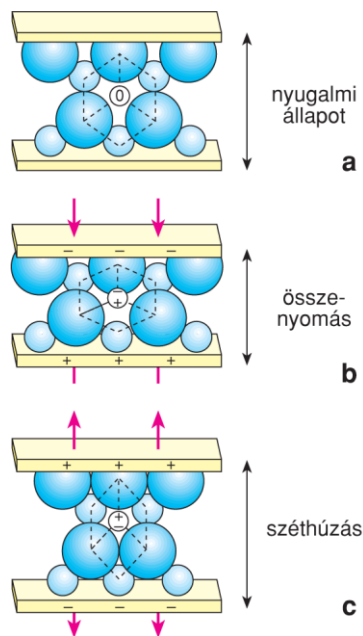
3. ábra. A T_2 szerinti kontraszt befolyásolása a T_E echoidó változtatásával4. ábra. T_2 súlyozott kép

4.2. VIII/4.2. Ultrahangos képkalkotás – Direkt tomográfia 2.

4.2.1. VIII/4.2.1. Piezoelektromos hatás, inverz piezoelektromos hatás

Az UH előállítására piezoelektromos tulajdonsággal rendelkező kristályból (pl. kvarc) alkalmasan kimetszett darabot, vagy megfelelő előkészítést követően a piezoelektromos jelenséget mutató kristályokhoz hasonlóan viselkedő kerámiaplakát (pl. ólom-cirkonát-titanát: PZT) alkalmaznak. A megfelelő kezelés magas hőmérsékleten, erős elektromos térrel történő orientálást jelent.

A (direkt) **piezoelektromos jelenség** lényege az, hogy az ilyen lapka alkalmas felületein töltésszétválás tapasztalható, ha mechanikailag deformálják (VIII.29. ábra). Így az ott elhelyezett elektródok között feszültség mérhető. A jelenség visszafelé is lejátszódhat (**inverz** piezoelektromos hatás): elektromos térben (azaz rákapcsolt feszültség hatására) megváltozik a lapka vastagsága. Ha a lapkára – amely megfelelő elektródrétegekkel van ellátva – váltakozó feszültséget kapcsolunk, a vastagságváltozás periodikusan követi a feszültség változását, mégpedig ugyanolyan frekvenciával, mint amilyen a feszültség változik. Amennyiben ez a frekvencia az UH-frekvenciatartományába esik, a kristálylapka UH-t bocsát ki a vele érintkező közegbe. Ezek az anyagok tehát mechanikai deformáció – elektromos feszültség konverzióra képesek mindkét irányban, azaz kettős **transzducer** funkciót láthatnak el. Az UH-diagnosztikában használt UH-forrás sugárzást kibocsátó elemeként használt piezoelektromos lapka – az adás és a vétel időbeli szétválasztása esetén (*l.* pulzusecho) – tehát egyúttal UH detektálásra is alkalmas: a közegből visszaverődött UH-rezgésre elektromos feszültségjellel válaszol, amely erősítve, feldolgozva a diagnosztikai értékű információt közvetíti az orvos felé.



VIII.29. ábra. Piezoelektromos kristály. a) A pozitív és negatív töltések súly-pontja egymásba esik. b) Nyomás, ill. c) széthúzás hatására a kristály deformálódik, a töltések súlypontja szétválk, azaz feszültség keletkezik.

VIII.2. megjegyzés. A piezoelektromos jelenséget 1880-ban a Curie testvérek, Pierre és Jacques fedezték fel. piezosz (piesmos [ógörög]) = nyomás, szorítás

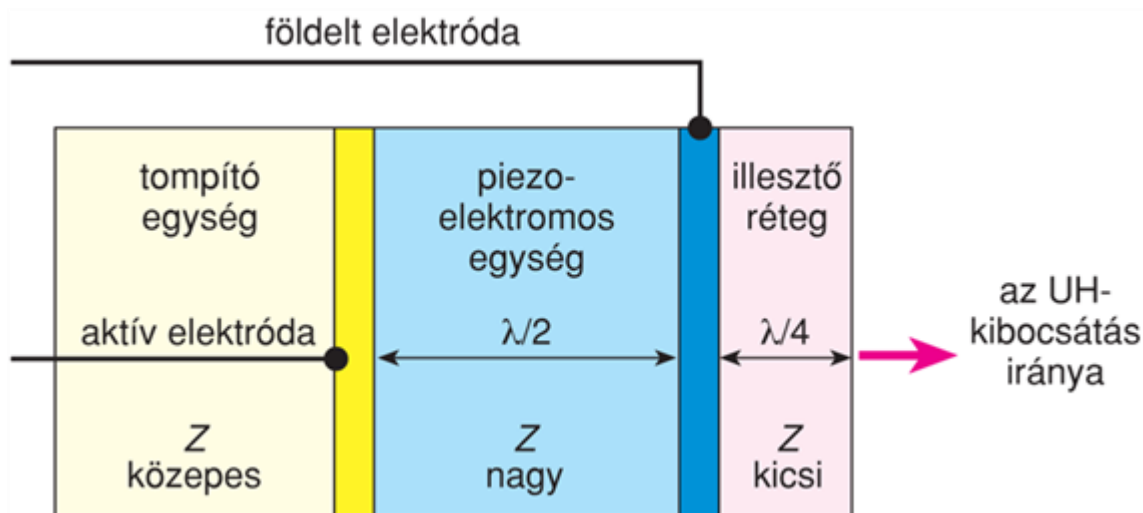
4.2.2. VIII/4.2.2. Az UH forrás felépítése

Egy UH-forrás egy UH-frekvenciájú váltakozó feszültségforrásból (VII/1.6. fejezet) és egy elektromechanikus rezgésátalakítóból (transzducerből) áll. A transzducer **aktív egysége** a piezoelektromos jelenséget mutató lapka (VIII.30. ábra). A jó hatásfokú átalakítás feltétele a **rezonancia**, azaz, hogy a lapka ún. saját frekvenciája megegyezzen a gerjesztő feszültség frekvenciájával. A lapka legkisebb sajátfrekvenciájú rezgése (a húr alakuló legkisebb frekvenciájú rezgéshez hasonlóan) akkor valósul meg, ha a lapka vastagsága megegyezik a létrehozni kívánt UH hullámhosszának felével. Minél nagyobb frekvenciájú UH-ot kívánunk létrehozni, annál vékonyabb lapkára van szükségünk (jellemzően néhány száz μm , *l.* VIII.1. példa), ami így fokozottan törékennyé válik.

Az aktív egységet az UH kicsatolási irányában részben védelmi okokból egy **illesztőréteg** követi. A vastagságát úgy választják meg, hogy a réteg külső felületéről visszaverődő, majd az aktív elem és az illesztőréteg belső

határáról újra visszaverődő hullám az eredeti hullámmal fázisban legyen ($d = \lambda/4$). Az illesztőréteg akusztikus impedanciáját (Z) pedig úgy kell megválasztani, hogy az aktív egység és a testszövet (kb. víz) akusztikus impedanciája között legyen (II.4. táblázat). Így érhető el a maximális energiakicsatolás.

Az aktív egységet az UH-kicsatolással ellentétes irányában egy **tompító-egység** fedi. Ebben az irányban a cél az UH-energia elnyelése, ezért olyan anyagot választanak, amelynek UH-abszorpcióképessége nagy. A tompító-egység impedanciája kisebb, mint az aktív egység impedanciája. Az energiaelnyelés hatásfoka kapcsolatban van az UH-impulzus frekvenciájának eltekintésével (sávszélesség). Ha ezen egység nagy hatásfokkal tompítja az UH-energiát, akkor a sávszélesség nagy, ha pedig az energia tompítás hatásfoka kicsi, akkor a sávszélesség is kisebb.



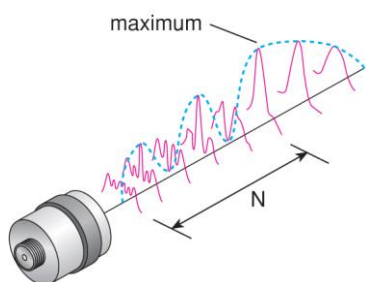
VIII.30. ábra. A transzducer egység felépítése. Tompító egység, aktív elektróda (sárga), aktív (piezoelektromos) egység, földelt elektróda (kék), illesztőréteg (rózsaszín).

VIII.1. példa. Az ólom(P)-cirkonát(Z)-titanát(T) – PZT lapka vastagsága (d), ha a létrehozni kívánt UH frekvenciája 3 MHz és az UH sebessége a PZT-ben 3791 m/s (II.4. táblázat):

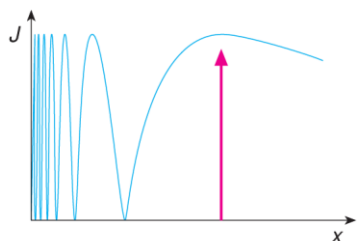
$$d = \frac{\lambda}{2} = \frac{c}{2f} = \frac{3791}{2 \cdot 3 \cdot 10^6} = 632 \mu\text{m}$$

Nyomásinhomogenitások az ultrahangnyalámban

A nyomásinhomogenitások miatt az ultrahang intenzitása ($\sim p^2$) a nyalámban sem axiális, sem pedig laterális irányban nem állandó. Tengelyirányban (axiálisan) a közel térben nagyon ingadozó (1. ábra kék szaggatott vonal, ill. 2. ábra, mindkét helyen a transzducer és a nyíllal jelzett pozíció között). A távolságban pedig az ottani nyalábkiszélesedés miatt csökken (1. és 2. ábra, a nyíllal jelzett hely után). A tengelytől laterális irányban távolodva az intenzitás alapvetően csökken (1. ábra, piros folyamatos görbék). A közel térben több helyi maximummal rendelkező görbe szerint változik (1. ábra, 5 db piros görbe az N-nel jelölt tartományban), míg a távolságban monoton csökkenés tapasztalható (1. ábra, 3 db piros görbe a N-nel jelölt tartomány határánál, ill. attól távolabb).



1. ábra. Az UH-nyaláb „perspektivikus” képe. N a közel- és távotér határa. A közeltérben laterális irányban piros folyamatos görbe szerint változik az intenzitás, axiális irányban pedig a szaggatott kék görbe szerint



2. ábra. Az UH-nyaláb intenzitásának változása axiális irányban. A nyíllal jelzett hely a közel és távotér határa

4.2.3. VIII/4.2.3. Az UH-nyaláb kialakulása és tulajdonságai

Az UH sugárzó lapka felületének minden pontja azonos fázisban, azonos amplitúdójú rezgést végez. Az UH térbe belépő nyaláb elemi gömbhullámok elhajlása és interferenciája eredményeként alakul ki (I. Huygens–Fresnel elv, II/2.1.3. fejezet). Minthogy a sugárzó lapka átmérője csupán néhányszorosa a hullámhossznak, a sugárzó közegben, az ún. **közeltérben** (Fresnel zóna) az elhajlási és interferenciajelenségek mind az UH tengelyének irányában (**axiális** irány), mind pedig arra merőlegesen (**laterális** irány) erős nyomás inhomogenitásokra vezetnek (lásd keretes rész), amelyek a sugárzótól távolabb, az ún. **távotérben** (Fraunhofer zóna) már elmaradnak. A közeltér és távotér határa r^2/l távolságra van a $2r$ átmérőjű lapkától (I. VIII.2. példa).

UH-nyalábról valójában csak folyamatos UH-sugárzás (pl. folyamatos hullámú Doppler-módszer, VIII/4.2.9. rész.) esetén beszélhetünk. Az UH-diagnosztikai eljárások többségénél azonban rövid időtartamú, mindössze 2–4 periódusnyi UH-impulzusokat sugárzunk a testbe (l. később VIII.32. ábra). Impulzusok esetén nyaláb alatt azt a térrészt értjük, amelyben az UH-impulzus végigszalad, és amelyben az impulzus pillanatnyi lokális paraméterei a tényleges nyalábnak megfelelően alakulnak. Az impulzus néhány periódusnyi rezgésének az amplitúdója nem állandó, hiszen az UH-frekvenciás feszültséggel gerjesztett lapkának először rezgésbe kell jönnie, majd le kell csillapodnia.

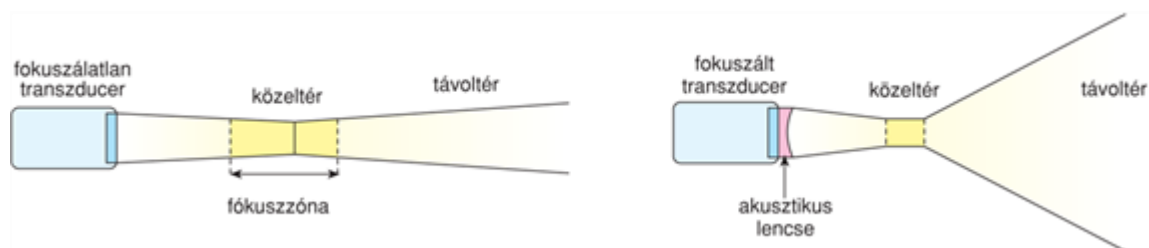
A rövid UH-impulzus nem egyetlen frekvenciával, hanem egy frekvenciasávval jellemezhető, amely annál szélesebb, minél kevesebb periódusból áll az impulzus, a sávzélesség az alkalmazott impulzushosszak esetén a jellemző UH rezgési frekvencia (f_0) 50%-át is kiteheti. Az egyetlen helyett sok frekvenciának köszönhetően a közeltérbeli erős inhomogenitás elkenődik.

A nyalábkeresztmetszet a közeltér-távotér határán csökken, ez **természetes fókuszáltságnak** tekinthető. A nyalábátmérőnek döntő szerepe van a feloldóképesség alakulásában, ezért különféle módszereket dolgoztak ki a fókuszálás javítására.

VIII.2. példa. A közel és távotér határa (r^2/l) vízben, 3 MHz frekvencián, 10 mm-es lapkaátmérő esetén, 50 mm, 20 mm-es lapkaátmérő esetén pedig 200 mm.

Az UH-nyaláb fókuszálása

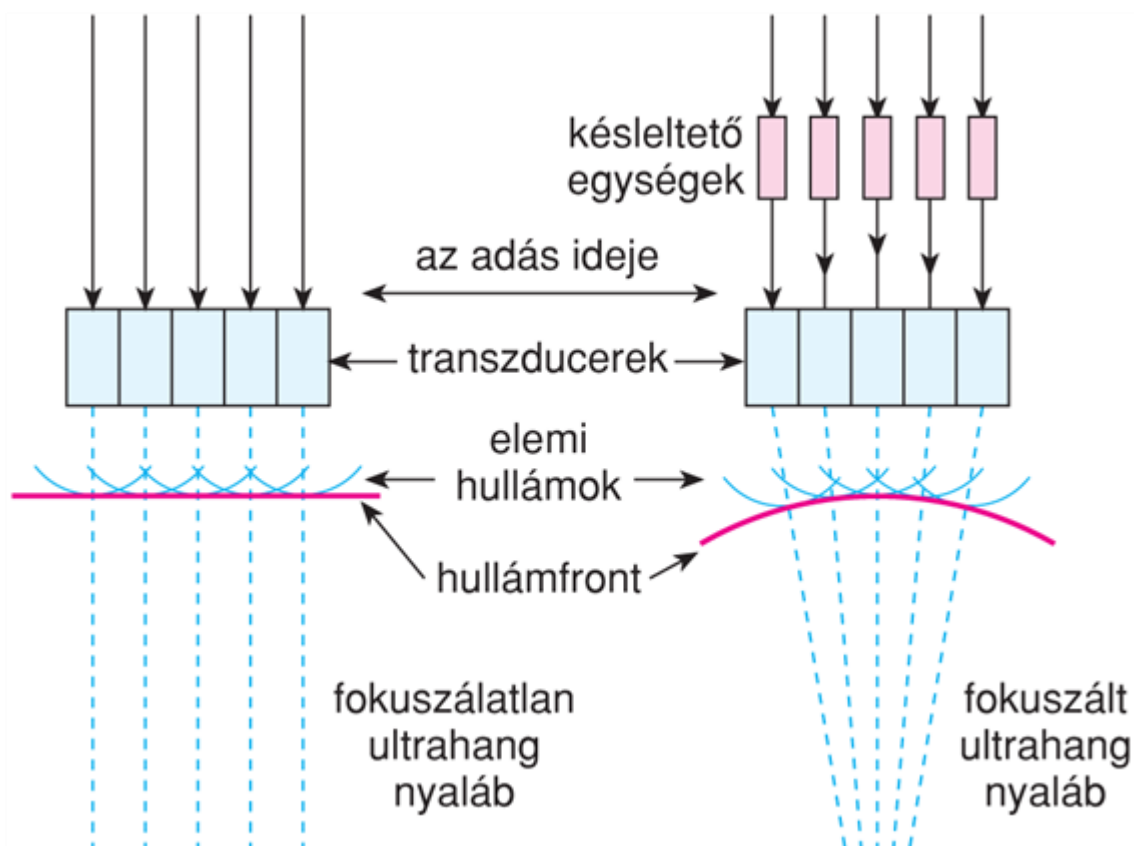
I. *Fixfókusz-megoldások.* Siktárcsa-alakú helyett homorú gömbfelületűre alakított sugárzót alkalmazva, vagy a siktárcsát akusztikai gyűjtőlencsével kiegészítve jobb fókuszálás – és jobb felbontás – érhető el (1. ábra). Ugyanez azonban a fókuszrégió közelebb kerül a forráshoz, a nyaláb divergenciája pedig a fókuszrégió után nagyobb, mint a fókuszálás nélküli, ami azt is jelenti, hogy szűkebb az a fókuszrégió, amelyen belül jó feloldás várható, más kifejezéssel élve romlik a mélységélesség.



1. ábra. Fókuszáláskor a nyaláb divergenciája nő a távotérben és romlik a mélységélesség

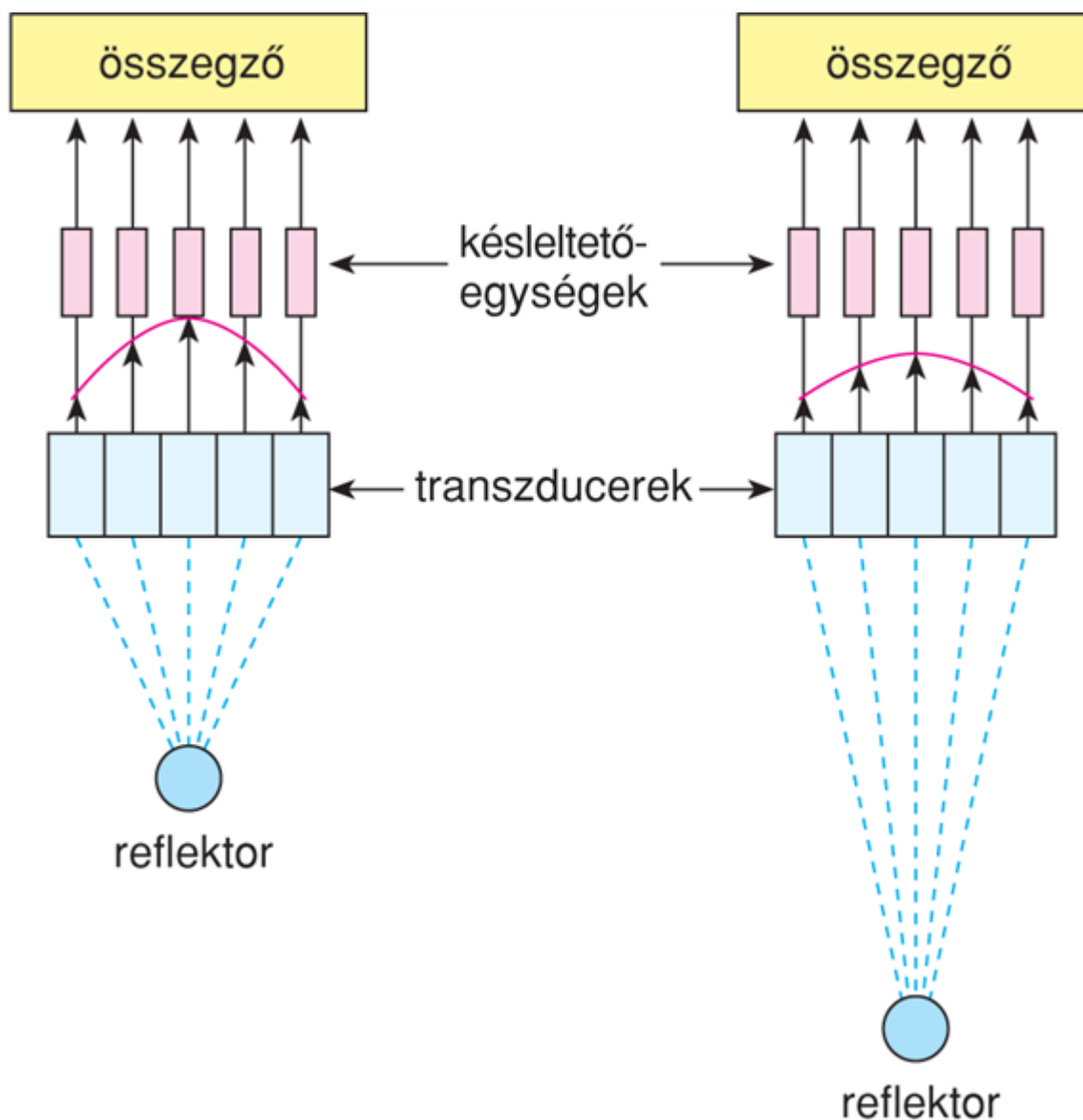
II. Elektronikus fókuszálás. Az elektronikus fókuszálás nagy előnye, hogy a fókuszstartományt különböző mélységekre lehet beállítani. Az egyik elrendezési lehetőség a gyűrűs többelemű sugárzó, amely egymástól elektromosan elszigetelt koncentrikus elrendezésű kerámiagyűrűből áll (a középső valójában korong).

Fókuszálás adáskor (2. ábra). Mindegyik gyűrű saját csatornán kapja a gerjesztő feszültséget, de közös feszültségforrásból, a csatornák közös belépési pontján. Az egyes gyűrűk csatornái elektronikus késleltető tagot is tartalmaznak, úgy, hogy a gyűrűk kívülről befelé haladva egyre nagyobb késéssel kapják a gerjesztést. Az egyes gyűrűkből induló hullámok interferenciája a rendszer tengelyének egy pontjában eredményez maximális hangnyomást, ezen fókuszpont távolsága a késleltetési időktől függ. A nyaláb divergenciája a fókuszon túli tartományban mérsékelt, ennek köszönhetően nagy a mélységelesség. A késleltetési idők elektronikus szabályozásával állítható be a fókuszstartomány mélysége („zone focusing”).



2. ábra. Elektronikus fókuszálás sugárzáskor

Fókuszálás detektáláskor (3. ábra). Egyetlen, a fókuszpontban lévő reflektálórészletről visszaérkező jel előbb éri el a vevő közepét, és bizonyos időeltéréssel egymás után az egyes gyűrűket. Az egyes gyűrűk jelei tehát egyre növekvő fáziskéséssel jelennek meg az előbbi csatornák gyűrűhöz kapcsolódó végén, de az előbb említett késleltetések következtében azonos fázisban találkoznak a csatornák közös pontján, és megfelelő nagyságú jelfeszültséget eredményeznek. Fókuszon kívüli helyről visszaérkező jelek – a távolságviszonyok miatt – nem azonos fázisban találkoznak a csatornák közös pontján, és interferenciájuk eredménye nem erősítés, hanem gyengítés.

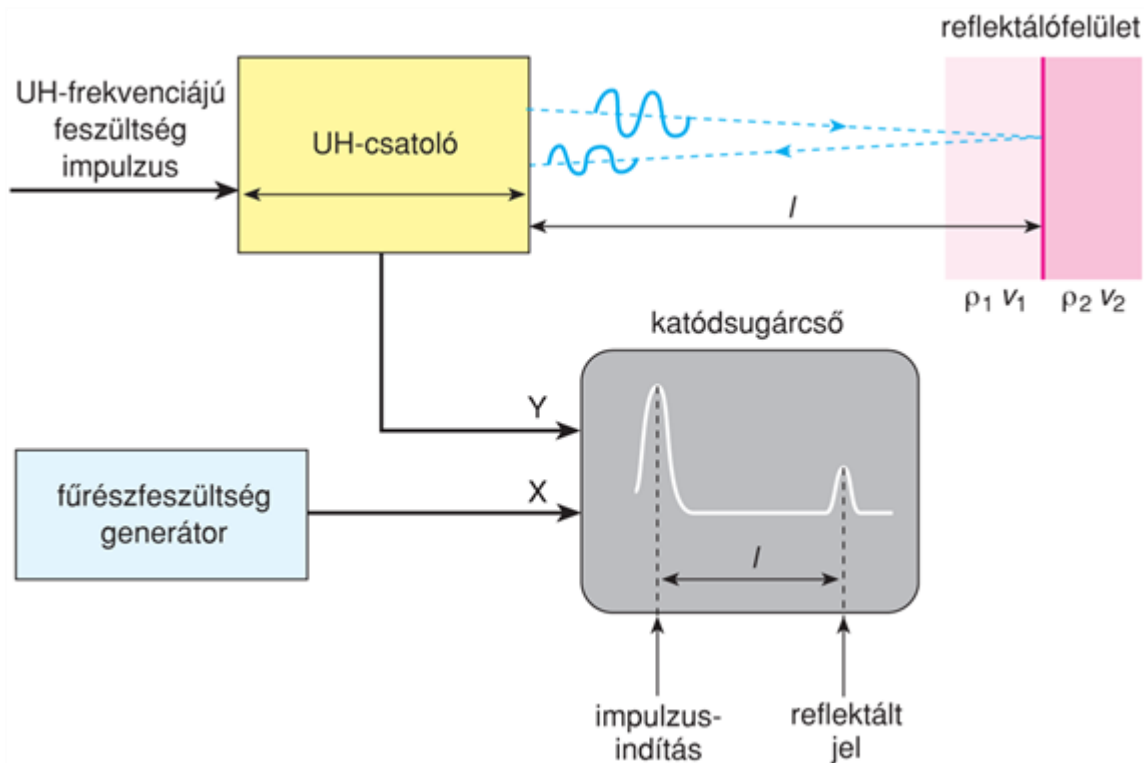


3. ábra. Elektronikus fókuszálás detektáláskor

Dinamikus fókuszálás. Az impulzusadások közötti vételi szünetben az egymás mögött, különböző mélységben fekvő reflektáló felületek jelei időbeli eltolással érkeznek a gyűrűkhöz. Ez lehetővé teszi azt, hogy a csatornák késleltetését elektronikusan vezérelve a vételi fókusz az éppen kívánt mélységre álljon.

4.2.4. VIII/4.2.4. Impulzus-echo módszerek, UH-képek

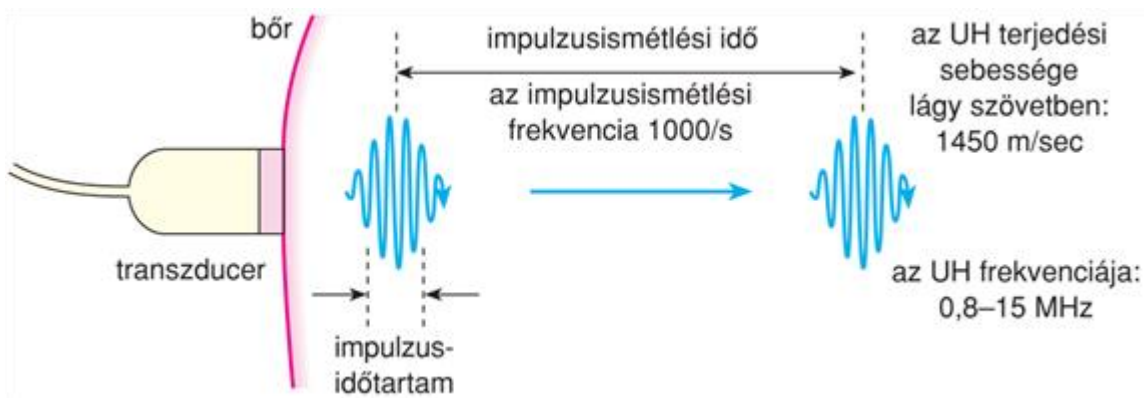
Az ehomódszerekben a nyalábban érkező sugárzás periodikusan előállított, rövid ideig tartó UH-rezgéscsomagokat (ún. impulzusokat) tartalmaz (l. VIII.31. ábra). Minden egyes UH-impulzus után elegendően hosszú szünet következik, amely elegendő ahhoz, hogy a testből visszaérkező visszavert jelek felfogása megtörténjen, mielőtt az újabb impulzus elindul. A katódsugárcsőön megjelenítjük mind a kibocsátott, mind a visszavert UH-impulzus elektromos megfelelőjét. A katódsugárcső x irányú eltérítő feszültségének periódusidejéből és az ultrahang közegbeli sebességének ismeretében a visszaverő felület távolsága az UH-csatolótól meghatározható.



VIII.31. ábra. Ultrahangecho keletkezése és felhasználása távolság meghatározására

Az UH-impulzusok jellemzői

A hang terjedési sebessége és a reflektálófelületek távolsága (néhány cm) alapján a szükséges szünet időtartamára ms nagyságrend adódik. Magának az impulzusnak a hossza ennél lényegesen rövidebb kell hogy legyen, ami a μs -os tartományt jelenti. A vizsgálathoz használt UH frekvenciájának megválasztásánál ezt és egyéb szempontokat is tekintetbe kell venni. Ezek eredményeképp a diagnosztikában leggyakrabban az 1–10 MHz ($1 \text{ MHz} = 10^6 \text{ Hz}$) fordul elő. Ebből következik, hogy az UH-impulzus időtartama (pulzusidő) alatt csupán néhány rezgés lejátszódására van lehetőség, úgy, ahogy azt a VIII.32. ábrán szemléltettük. (Az intenzitásról l. VIII.3. Megjegyzés.)



VIII.32. ábra. Az UH-impulzus jellemzői

A megjelenítés alapelve

A hagyományos megjelenítőeszköz a katódsugárcső (VII/1.5.1. fejezet). Bár a modernebb megjelenítők fokozatosan háttérbe szorítják, az egyszerűség és a jobb érthetőség kedvéért az UH képkeltési eljárásokat a katódsugárcső működési elvén keresztül mutatjuk be.

Emléztetünk arra, hogy a katódsugárcső segítségével az időben változó mennyiség megjelenítése szokásos módon úgy történik, hogy az x eltérítő lemezpárra (periodikus, lineáris felfutású) ún. fűrészfeszültséget kapcsolnak, amelynek eredményeképpen a lumineszkáló ernyőn a világító pont egyenletesen balról jobbra halad, majd a kép jobb széléről visszaugrik az elejére és ez a mozgás periodikusan ismétlődik. Ezzel egyidejűleg a megjelenítendő jelet az y eltérítő lemezpárra kapcsolják. (Ebben a módban nincs jelentősége annak, hogy a világító pont mennyire fényes.)

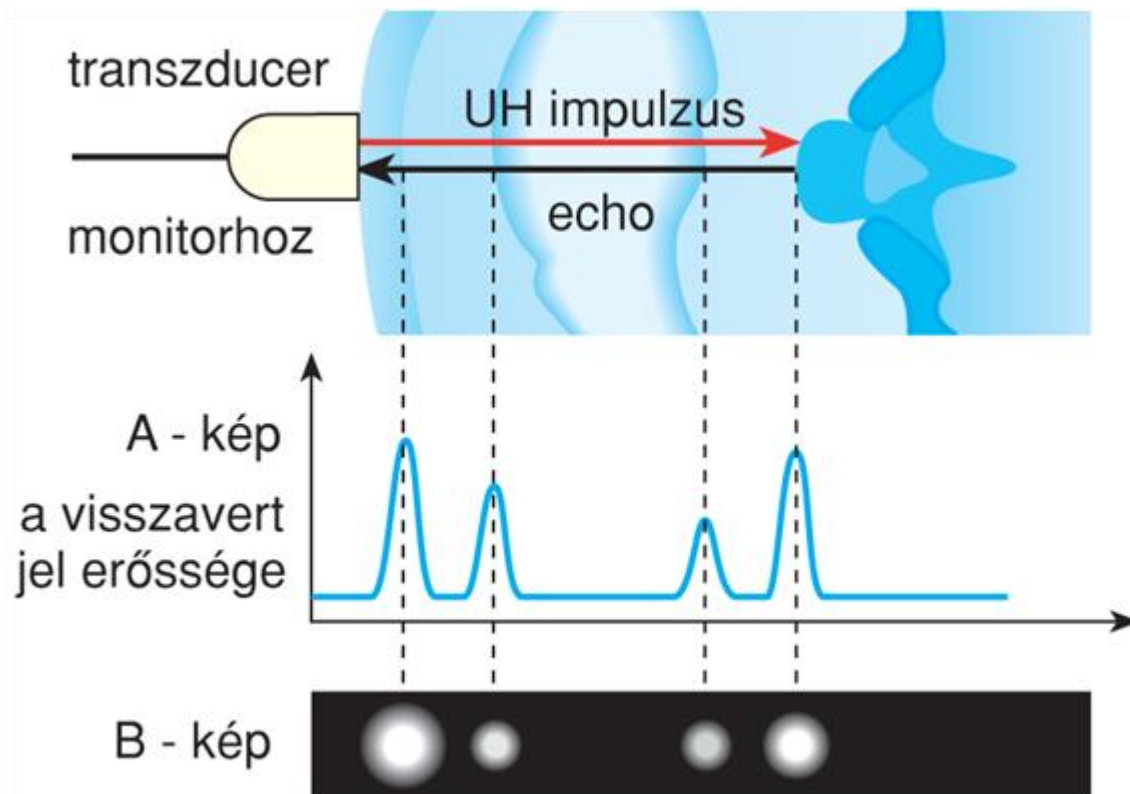
Képek (kétdimenziós) megjelenítése esetén az x irányú lemezpárra kapcsolt fűrészfeszültség mellett az y irányú lemezpárra lépcsős fűrészfeszültséget kapcsolnak. (A lépcső időbeli hossza megegyezik az x irányú fűrészfeszültség periódusidejével.) A világító pont így sorról sorra végigpásztázza a teljes képernyőt. A kétdimenziós kép a világító pont fényességének változtatásával valósul meg. Bistabil a kép, ha a képpontok fényessége csak kétféle érték lehet; szürketónusos vagy **gray-scale** a kép, ha a katódsugár intenzitása több fényességfokozatot tesz lehetővé.

VIII.3. megjegyzés. Az *UH-impulzussorozat intenzitása*. A II/2.4.3. pontban már szó esett arról, hogy az UH alkalmazásokban a sugárzás intenzitásának határt kell szabni a túl nagy nyomásingadozások elkerülésére. (A szöveti károsodások szempontjából az sem lehet közömbös, hogy hányszor történik meg a nyomásingadozás, azaz hogy mekkora az impulzus időtartama a rezgésidőhöz viszonyítva.) Az előírásokban megadott intenzitás határértékek mindig átlagértékek, de az impulzusjelek paramétereit tekintve nem mindegy, hogy ezeket milyen fajta átlagolással kaptuk. A diagnosztikában általában használt határérték 10 mW/cm^2 , azonban előfordulnak olyan orvosi előírások is, amelyek 100 mW/cm^2 -t engednek meg (ez a korábban bemutatott becslések alapján nem jelent még túl nagy nyomásfluktuációt). A táblázati adatok (lásd II. fejezet, II.4. táblázat) helyes értékeléséhez azonban mindig meg kell nézni, milyen átlagolásra vonatkoznak. Az említett határértékek az ún. „peak temporal average” értékek, ami azt jelenti, hogy a sugárzás teljes periódusidejére átlagoltak beleértve tehát mind a pulzus, mind a szünet időtartamát. Mivel azonban a szünet hossza 1000-szerese is lehet a pulzusidőnek, ez azt jelenti, hogy az UH- rezgések jelenléte idején ennél az értéknél 1000-szer nagyobb a tényleges intenzitás, amit „peak pulse average”-nek neveznek. Ez gyakorlati szempontból igen lényeges különbség!

Egydimenziós A-képek, távolságmérés

A módszer neve az „**amplitúdó**” szóra utal, ugyanis ebben a módszerben a készülék detektor oldala az echo jelek amplitúdójával arányos amplitúdójú egyenfeszültség impulzusokat állít elő, és ezek vezérlik a katódsugárcső katódsugarának y irányú kitérését. A mérés keskeny nyalábot előállító, rögzített helyzetű UH-fejjel történik, tehát az echojelek egyetlen irányra vonatkoznak. A kibocsátott UH-impulzussal szinkron indul a katódsugár x irányú eltérése. A különböző mélységű felületekről egymás után visszaérkező UH-impulzusok a képernyőn az x irány mentén (időtengely) egymás után jelennek meg (VIII.33. ábra középső rész, VIII.33. ábra alsó rész). A katódsugár x irányú mozgásának sebességét ismerve az egyes echojelek visszaérkezési ideje az induló jelhez képest közvetlenül leolvasható a készülék képernyőjéről. A mérés fő információtartalma tehát az egyes echojelek beérkezési ideje (t_1, t_2, \dots), emellett a képen látható impulzusok nagyságából (amplitúdójából) az egyes echojelek amplitúdójára is következtethetünk. Ez utóbbi paraméter – amint azt már tárgyaltuk – az egyes közegek akusztikus impedanciájától, a szóródási jelenségektől és az abszorpció mértékétől függ. Az amplitúdó nagyságát ritkán használják fel diagnosztikai célokra, a visszaérkezési idők azonban az UH terjedési sebességének (c) ismeretében megadják a visszaverő felület d távolságát a sugárzótól: $ct = 2d$.

Ily módon az echót okozó felületek egymástól mért távolsága meghatározható: pl. $d_{12} = d_2 - d_1$.



VIII.33. ábra. Középső ábra: A-kép. Alsó ábra: egydimenziós B-kép

Egydimenziós B-kép mint átvezetés az összetettebb képekhez

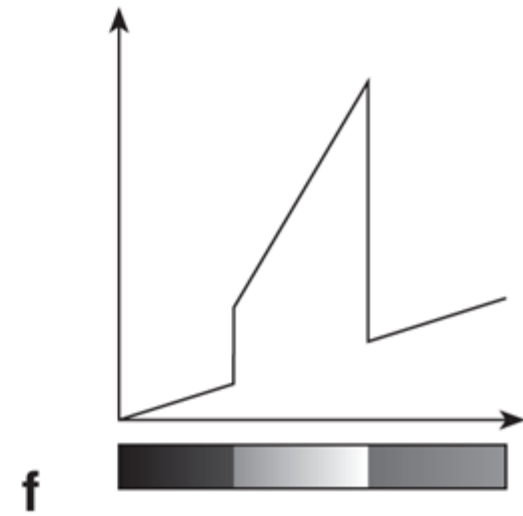
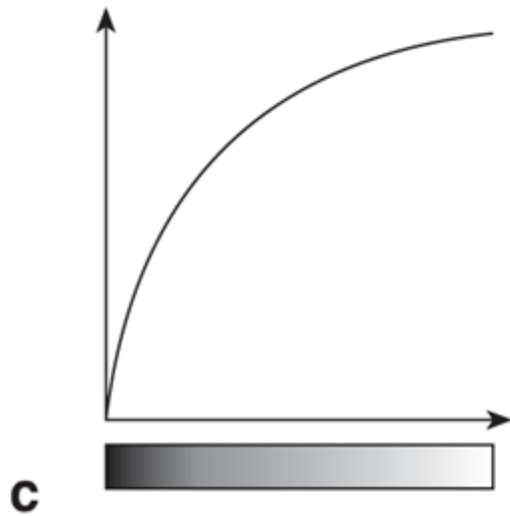
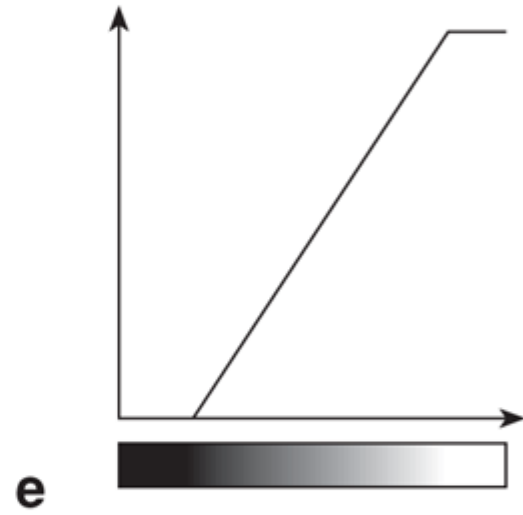
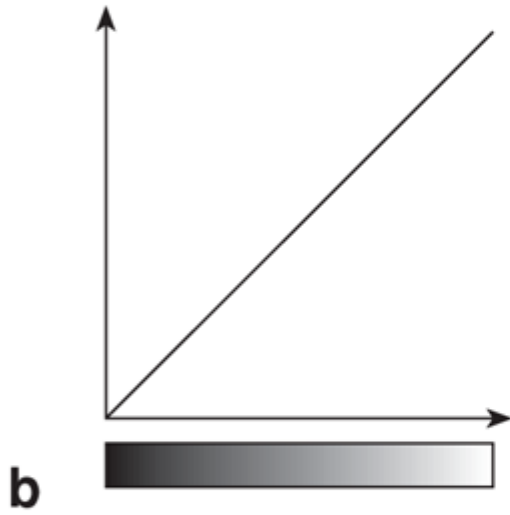
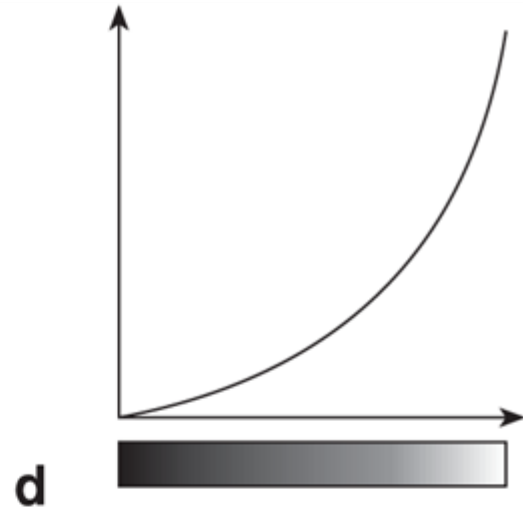
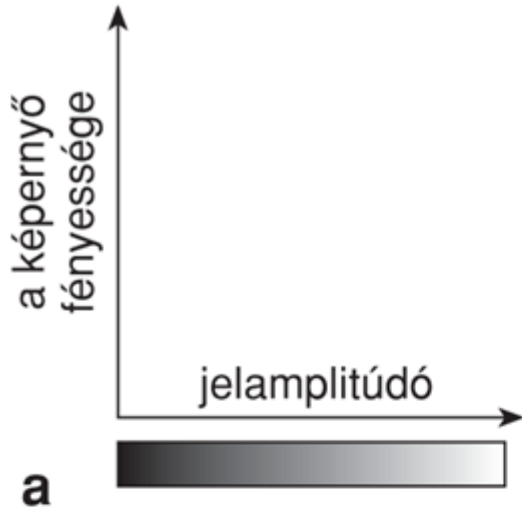
A módszer nevét a „**brightness**” (fényesség) szó alapján kapta, mivel ebben az esetben a visszavert UH-impulzusok nagysága nem a katódsugár kiterítését, hanem a képpont fényességét határozza meg (VIII.33 ábra alsó rész). Az ábrázolásmód úgy is felfogható, hogy a jelfeszültséget egy – a papír/monitor síkjára merőleges – z tengelyre vesszük fel. Ez katódsugárcsőben az elektronáram szabályozásának felel meg. Ilyenkor az y irányú eltérítő elektródákra nem kapcsolunk feszültséget (vízszintes egydimenziós B-kép). A nyert képről ugyancsak leolvasható az echo jelek beérkezési ideje, azaz távolságmérésre is használható. Az egydimenziós B-képet 90° -kal el lehet forgatni (függőleges egydimenziós B-kép). Ilyenkor az x irányú eltérítést szabályozó elektródákra nem kapcsolunk feszültséget. Mivel mindkét esetben maradna egy kihasználatlan dimenzió, önállóan nem használjuk az egydimenziós B-képet. Benne van viszont a továbbfejlesztés lehetősége (TM-kép, ill. kétdimenziós B-kép).

Szürketónusos megjelenítési technikák, gamma-függvények

Az elvileg korlátlan számú tónusból (fényességi szintből) csak erősen korlátozott számút tudnak a megjelenítőeszközök megjeleníteni (pl. 256-ot), a szemünk pedig ennél is kevesebbet tud érzékelni. Szokás azt mondani, hogy a szem 16 ($= 2^4$) szürke fokozat között tud különbséget tenni. (Az értékek 2 hatványára „kerekítettek”, mivel a digitális eljárásokban ezeknek kitüntetett szerepük van.)

A szürketónusos megjelenítésnél lehetőség van arra, hogy a jelamplitúdó és a fényességi fokozat között a legkézenfekvőbb és legegyszerűbb egyenes arányosság [lineáris függvény, b) ábra] helyett más függvény szerinti megfeleltetést használjunk. Ezeket a függvényeket γ - vagy gamma függvény néven szokás emlegetni. Az alulról homorú γ görbe [c) ábra] esetén — az egyenes arányossághoz képest — a kisebb amplitúdó tartományok több, a nagyobb amplitúdó tartományok kevesebb szürke fokozattal ábrázolódnak. Fordított a helyzet az alulról domború γ -görbe esetén [d) ábra]. Ekkor a nagy echoamplitúdók tartománya a kedvezményezett, azaz a nagyobb amplitúdójú jelek válnak el jobban egymástól. További kiemelési lehetőségek közül két „ablakos” módszert említünk meg. Az e) ábra szerinti γ -függvény esetén mindazon echoamplitúdók, amelyek egy beállítható alsó határérték (elnyomási szint, „rejection”) alatt vannak, feketével, amelyek pedig egy szintén beállítható felső határérték (telítési szint, „saturation”) fölött vannak, fehérrel ábrázolódnak. Így a szürke tartomány fokozatai felhasználhatók a két határérték közötti jelamplitúdókra. Ennél a módszernél a γ -függvény monoton marad. Az f) ábra esetén a két határérték között (egy „ablakban”) az értékek kiemelődnek ugyan, de a

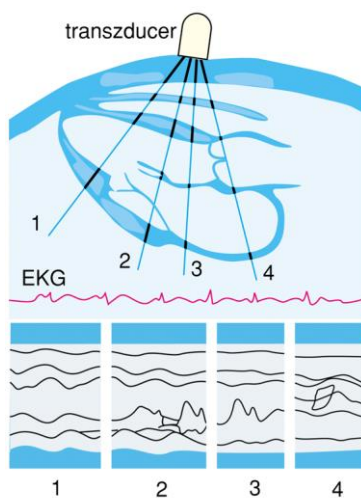
felső határérték feletti értékek közel kerülnek az alsó határérték alatt levő értékekhez. A γ -függvény monotonitása elvész, így ez a módszer kellő óvatossággal használandó.



Megjegyezzük, hogy az általunk leírtak ún. negatív ábrázolásnak felelnek meg (sötét alapon világos képpontok). A módszer fordítottja is lehetséges (világos alapon sötét képpontok), de mivel az ennek megfelelő megoldások értelem szerint a leírtakból kikövetkeztethetők, ezt a változatot nem tárgyaljuk. A helyes kontrasztot általában nehéz beállítani, ezért gyakorlati szempontból előnytelen az ábrázolási módok cserélgetése.

TM-mód (M-mód)

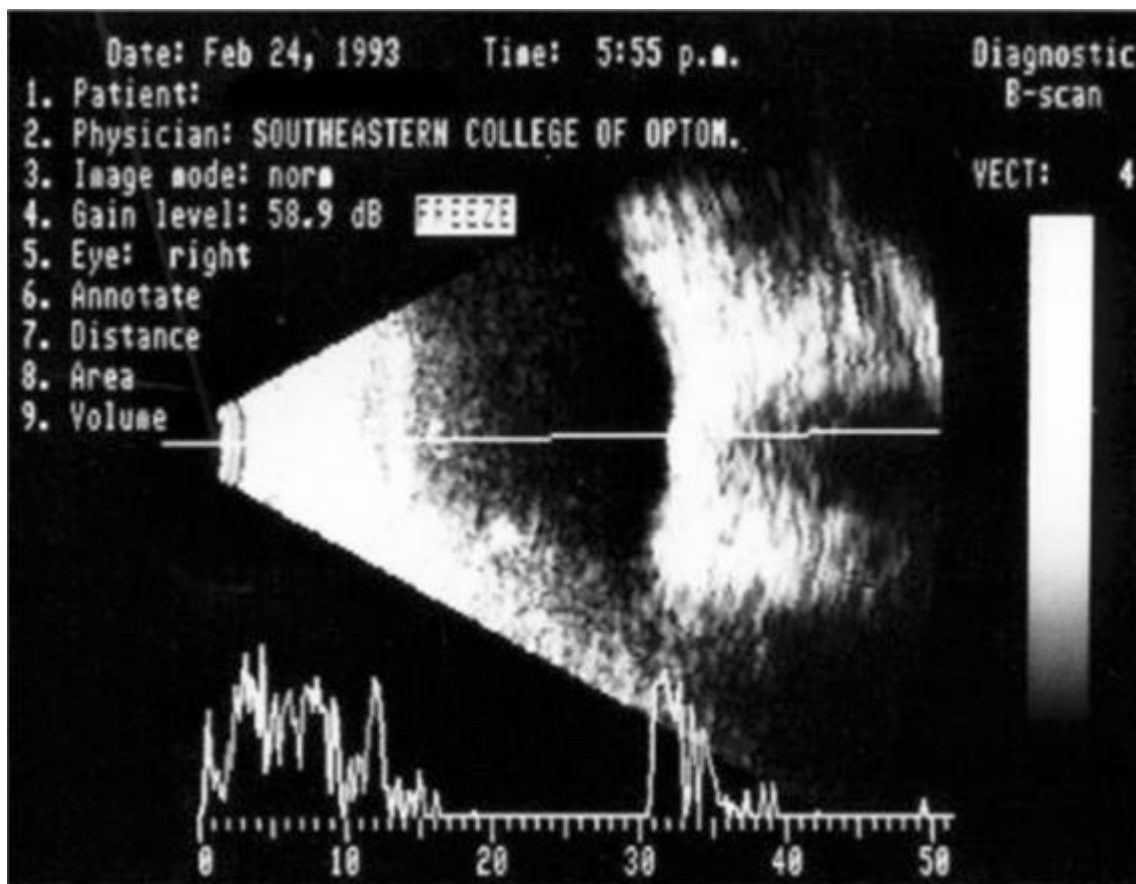
Tipikusan kardiológiai alkalmazásokban szokás olyan vizsgálati irányt választani, amikor valamely reflexió (vagy több reflexió is) a mérési irányba eső mozgó felületről, pl. szívbillentyűről történik. Ilyen esetben a visszaverő felület mozgása láthatóvá tehető és diagnosztikai célra felhasználható. Az eljárásban a kibocsátott UH-impulzus után kapott echojelsorozatról az előző pontban leírt módon y irányú (függőleges) B-képet készítünk. A következő UH-impulzus echojeleiről készített B-képet a képernyőn az előzőkhöz képest x irányban kissé elcsúsztatva helyezzük el, és így tovább. A képernyőn így reális időskálán kirajzolódik a reflektálófelület mérési irányba eső mozgása. A kiértékelés segítésére szokás az UH-felvétellel párhuzamosan regisztrált EKG-görbét is megjeleníteni a képernyőn (VIII.34. ábra). A módszer elnevezésében a T betű az időbeliségre (time), az M a mozgásra (motion) utal.



VIII.34. ábra. TM-kép és készítése

Kétdimenziós B-kép, UH-tomográfia

A kétdimenziós B-kép felfogható egydimenziós B-képek sorozataként. A tomográfia elnevezés arra utal, hogy ebben a módszerben az UH segítségével a test valamely síkmetszetéről készítünk képet. A kiválasztott síkban különböző irányokban egydimenziós echomérést végzünk, azaz valamilyen elv szerint „végigpásztázzuk” ezen metszeti síkot (VIII.34. ábra felső rész, VIII.35. ábra felső rész). A pásztázás módjáról l. a következő pontot. Az egyes mérési irányokban kapott echosorozatokat egydimenziós B-képként jelenítjük meg. Az egymás után következő mérési irányok B-képei olyan geometriai alakban jelennek meg a képernyőn, amilyen alakban az UH-nyalábbal a test kiválasztott síkját végigpásztázzuk.



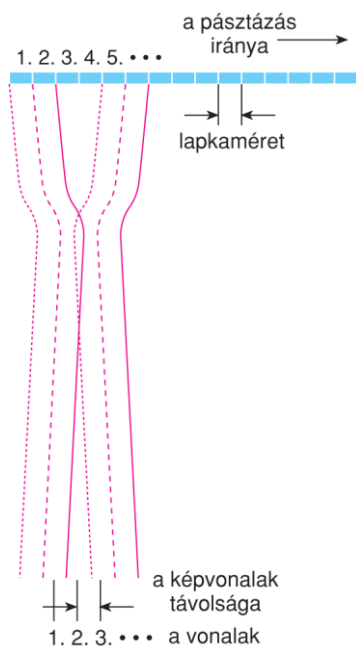
VIII.35. ábra. Szem UH-os vizsgálata. Kétdimenziós B-kép és A-kép

4.2.5. VIII/4.2.5. A pásztázás megoldásai

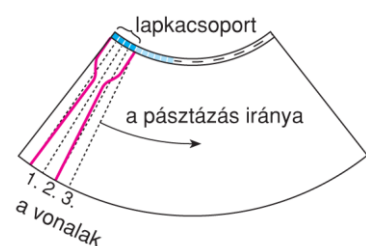
A **pásztázás** minden esetben fókuszált nyalábbal történik. A vizsgálati irány változtatása vagy mechanikus módon (a sugárzó mozgásával), vagy elektronikus módon történhet.

A **mechanikus pásztázás** egyik megoldásában az adóvevő mérőfejben egyetlen piezokerámia, vagy egy „annular array” úgy végez egy – a sugárzás irányára merőleges – tengelyen rezgőmozgást, hogy az egymás után kibocsátott UH-impulzusok végigpásztáznak egy legyező alakú síkot (szektorszken). Egy másik megoldás három sugárzót alkalmaz, ezek egymáshoz képest 120° -kal elfordított helyzetben közös tengely körül forogva egymás után kerülnek sugárzó helyzetbe, és forgás közben pásztázzák végig ugyanazt a szektort. Egy körülfordulás alatt tehát három pásztázás történik. A mechanikus pásztázásos módszerek ma már elavultnak tekinthetők.

Az elektronikus módszerek UH átalakító sorokat (transducer array) alkalmaznak. A „**linear array**” egyenes mentén (VIII.36. ábra), a „**curved array**” körív mentén (VIII.37. ábra) egymás mellé épített nagyszámú (pl. 512) kerámialapka. Az UH-impulzust keltő feszültségjel – egyetlen egydimenziós B-képvonal létrehozásához – egyszerre több (pl. 5-10 db) lapkát érint (l. VIII.36. ábra). A lapkák meghajtó csatornáiban késleltető egységek vannak, és ezért az UH-kibocsátás egy program szerint vezérelhető fáziseltolással következik be. Ezen hullámok interferenciája alakítja ki a fókuszálás helyét. A következő egydimenziós képvonal kialakításához egy elemmel eltolódik a gerjesztés (egy lapka kimarad – egy lapka belép), tehát az egymással párhuzamos képvonalak távolsága a lapkamérettel egyezik meg. A „linear array” módszernél a kép téglalap alakú. A „curved array” esetében hasonlóképpen történik a pásztázás, de a kép gyűrűszegmens alakú (l. VIII.37. ábra).



VIII.36. ábra. Sokelemes „linear array”



VIII.37. ábra. Sokelemes „curved array”

4.2.6. VIII/4.2.6. UH-képek feloldóképessége

A feloldási határt ama két pont közötti távolsággal jellemezhetjük, amelyeket az UH segítségével még különálló pontokként detektálhatunk. A felbontóképesség ezen távolság reciproka (minél nagyobb az értéke, annál jobb a helyzet).

A **sugárirányú (axiális) feloldási határ** az impulzushossztól függ: elvileg az impulzushossz fele az axiális feloldás határa, mivel ekkor éppen érintik egymást az egymás mögötti helyekről induló echók. A gyakorlatban szokásos impulzushosszak mellett az axiális feloldás a hullámhossznak mintegy másfélszerese, tehát 3 MHz esetén kb. 0,75 mm.

Az axiális feloldási határnál a **laterális** (az axiális irányra merőleges) **feloldási határ** mindig nagyobb (azaz rosszabb), mivel ez utóbbi gyakorlatilag azonos a nyalábátmérővel. A laterális felbontás ezért a fókuszrégióban a legjobb, a távotérbeli részletekre viszont a távolság növekedésével romlik a nyaláb szétterülése következtében.

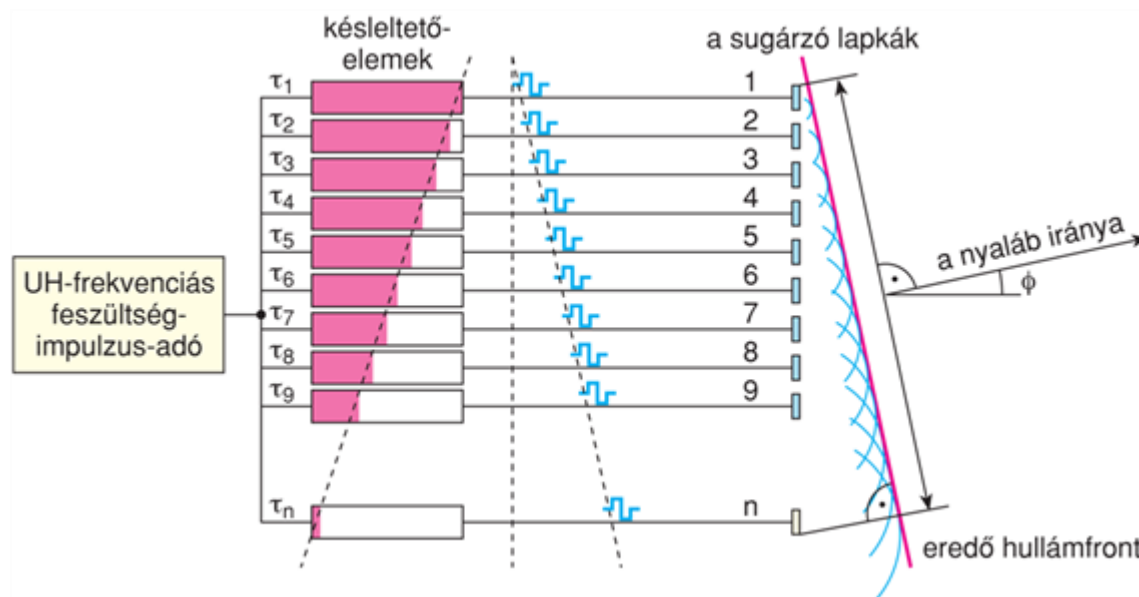
A fókuszbeli laterális felbontást a nyaláb fókuszálásával lehet javítani. A nyaláb átmérője az f fókusz táv és a D ultrahang-forrás átmérő (illetve a vételi fókusz és a vételi detektorátmérő, azaz apertúra) arányával, az ún. F -számmal arányos ($F = f/D$), és arányos az UH hullámhosszával is. A fókuszrégióbeli d nyalábátmérő tehát, ami a laterális felbontásnak is mértéke $d \approx \lambda/fD$, pontosabban: $d = 1,22\lambda F$. A gyakorlatban $F = 1,5$ -nél kisebb érték nem érhető el, ezért a laterális felbontás a hullámhossznak néhányszorosa – néhány mm – lehet.

A nyaláb **természetes fókuszáltsága** is biztosít bizonyos laterális felbontást. Korábban láttuk, hogy a természetes fókusz táv szintén függ a sugárforrás-lapka átmérőjétől és a hullámhossztól. Így erre az esetre alkalmazva a formulát az adódik, hogy a felbontás a lapkaátmérőnek kb. harmadrészevel egyenlő, tehát 15 mm-es sugárzóátmérő esetén 5 mm-nyi (l. VIII.3. példa).

VIII.3. példa. Amennyiben f -el jelöljük a természetes fókusz távolságot, az a korábbiak szerint: $f = D^2/(4\lambda)$, ahol D a sugárzást kibocsátó lapka átmérője. Így a laterális feloldási határ:

$$d = 1,22\lambda \frac{f}{D} = 0,305D$$

A lineáris B-kép-sorozat felvétele tisztán fázistolással: „phased array”-módszer



Az elektronikusan irányított nyalábbal történő pásztázásnál („phased array”) aviszonylag kis elemszámú (pl. 128) lineáris elrendezésű lapkacsoportnak minden eleme mind az adásban, mind a vételben közreműködik minden egyes B-képvonal létrehozásában. Ha a lapkák egyenletesen növekvő késleltetéssel kapják a gerjesztőfeszültséget, az elemi hullámok eredője síkhullám lesz, amelynek haladási iránya a késleltetés mértékével szabályozható, tehát így egy körcikket (szektort) lehet végigpásztázni.

4.2.7. VIII/4.2.7. Háromdimenziós rekonstrukció

A 2D metszeti B-képek sorozatával a test egy kiválasztott térfogatának összes térfogateleméről adatokat gyűjthetünk. Az adatok alapján a teljes térfogat 3D rekonstrukciója elvégezhető. Mivel az UH-képben a fényességelemek a reflektáló felületek helyét jelzik (és függenek az impulzusokat közvetítő) különböző akusztikus keménységű szövetartományok elnyelőképességétől is, a reflexióképesség képelem fényességbe való konvertálásának megfelelő diszkriminátorok (lásd VII/1.4.3.) alkalmazásával elérhető, hogy az összetartozónak tekintett pontokon kívül más (többnyire kisebb) reflexióképességgel bíró pontok nem ábrázolódnak. Itt nem részletezett eljárással (számítógépes programmal) a felismeréshez szükséges árnyékolást is társíthatnak a megjelenítéshez (VIII.38. ábra).

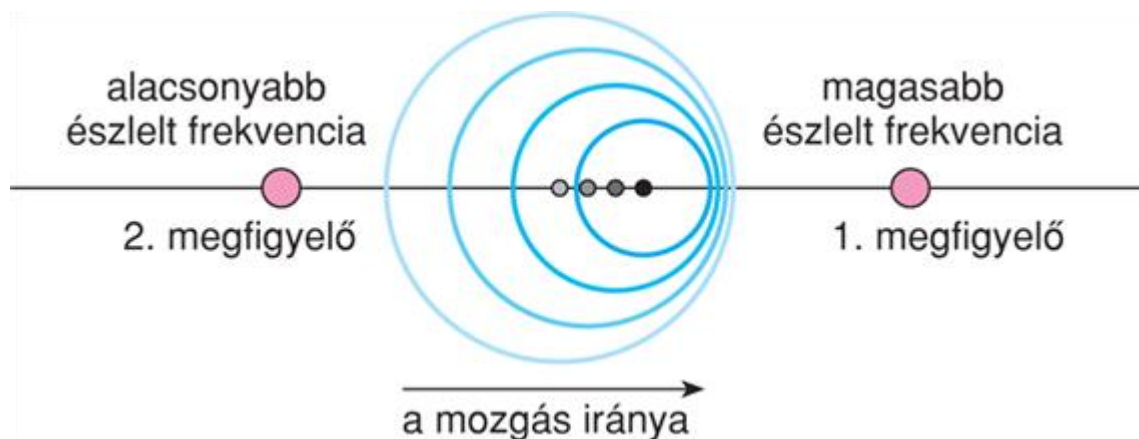


VIII.38. ábra. Magzat arcfelületének rekonstrukciója 2D képekből

4.2.8. VIII/4.2.8. Doppler-módszerek

Doppler-effektus

Számos UH-diagnosztikai módszer használja ki a Christian **Doppler** által 1842-ben leírt jelenséget: ha a hullámforrás és a megfigyelő mozognak egymáshoz képest, akkor a megfigyelő az eredeti frekvenciától különböző frekvenciát észlel. Ez a jelenség észrevehető mind az elektromágneses hullámoknál, mind pedig a mechanikai hullámoknál – így természetesen az UH-nál is. Kvalitatíve: a frekvencia növekszik, ha a hangforrás és a megfigyelő közelednek egymáshoz és csökken, ha távolodnak egymástól (VIII.39. ábra).



VIII.39. ábra. Doppler-effektus

Ez az oka annak, hogy az álló gyalogos a közeledő mentőautó szirénájának hangját magasabbnak, a távolodót mélyebbnek érzi a mentőautóban ülők által észlelthez képest. Kvantitatíve kicsit különbözik egymástól a mozgó forrás – álló megfigyelő ill. az álló forrás – mozgó megfigyelő esetét leíró képlet. Ez azt jelenti, hogy általában nem elegendő a forrás és a megfigyelő relatív sebességét tekintetbe venni. Ha azonban olyan esetek vizsgálatára szorítkozunk, amikor a forrás és a megfigyelő egymáshoz viszonyított relatív sebessége (v) lényegesen kisebb, mint a hullám terjedési sebessége (c), akkor a két képlet eltérése nagyon kicsi és a gyakorlatban bármelyik használható. Az UH-diagnosztikában előforduló esetekben ez a feltétel mindig teljesül. Természetesen ilyenkor az egyszerűbbet (álló forrás – mozgó megfigyelő) szokás használni:

$$f' = f \left(1 \pm \frac{v}{c} \right), \quad (\text{VIII.4.})$$

ahol f' az észlelt frekvencia és f a forrás frekvenciája. A (+) előjel a közeledésre, a (-) előjel a távolodásra vonatkozik. Az f' és az f közötti különbséget szokás f_D -vel jelölni és **Doppler-eltolódásnak** vagy – félrevezetően – Doppler-frekvenciának (shiftnek) hívni:

$$f_D = f' - f = \frac{\pm v}{c} f.$$

(VIII.5.)

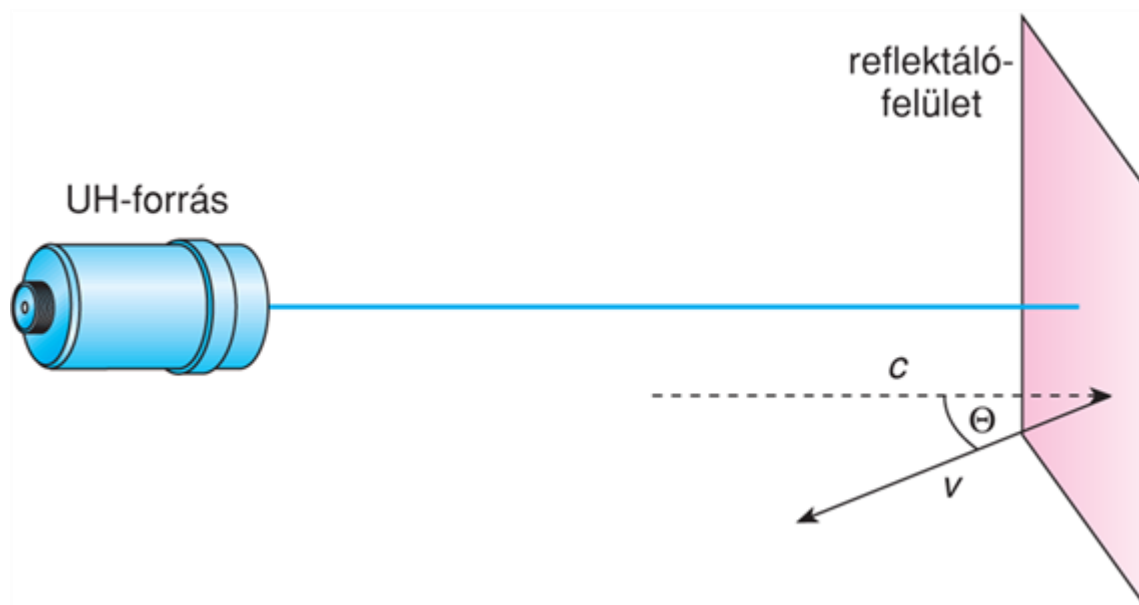
Mozgó reflektáló test

Ha egy test v sebességgel mozog az álló forráshoz képest majd pedig ugyanezen test visszaveri a hangot, mint v sebességgel mozgó másodlagos forrás, akkor ez a Doppler-eltolódásnál $2v$ látszólagos relatív sebességnek felel meg, azaz $|f_D| = (2v/c)f$. (Az abszolút értéket a továbbiakban elhagyjuk.) Ha a v és c irányok egymással Θ szöget zárnak be (VIII.40. ábra), akkor az eltolódás mértéke csökken: v -nek csak a c irányába eső vetülete számít, azaz v helyére $v \cos \Theta$ kerül:

$$f_D = \frac{2v \cos \Theta}{c} f, \quad \text{ill} \quad v = \frac{c}{2f \cos \Theta} f_D$$

(VIII.6.)

Ezáltal lehetővé válik mozgó struktúrák sebességének meghatározása az UH frekvenciájának Dopplereeltolódásából.



VIII.40. ábra. UH visszaverődése mozgó felületről



Christian Doppler (1803–1853). Matematikus és fizikus a csillagok színén töprengve jutott a később róla elnevezett elv megfogalmazásához

Vörösvértetek mint szórócentrumok

A Doppler-módszer klinikai alkalmazásai közül kiemelkedik a **véráramlás** vizsgálata. A nem diszperz folyadékok belsejéből nincs UH-reflexió, a vér azonban plazmába diszpergált alakos elem szuszpenzió. Az UH a mozgó alakos elemeken **szóródik**, azaz az UH-ot az alakos elemek, mint másodlagos pontforrások minden irányba szórják, így a transzducer felé is, a (VIII.4.)-nek megfelelő frekvenciaeltolódással. A vér UH-szórócentrumai a vörösvértetek. A továbbiakban a szokásoknak megfelelően a szóródásra is használjuk a nem teljesen helyes visszaverődés kifejezést.

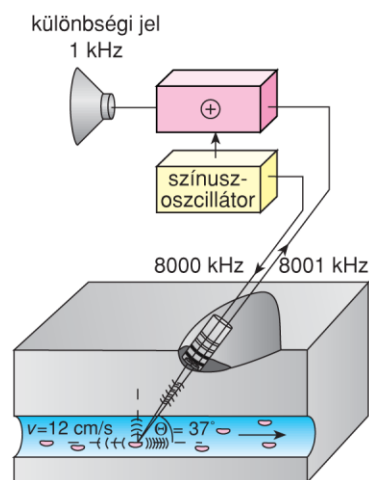
4.2.9. VIII/4.2.9. A Doppler-effektus gyakorlati felhasználása

Egydimenziós CW-berendezés áramlási átlagsebesség mérésére

A folyamatos hullámú (continuous wave, CW) Doppler-berendezés transzducere két kristályt tartalmaz, melyek közül az egyik az adó, a másik pedig a vevő (VIII.41. ábra). A vevőre folyamatosan érkező jel az eredője mindazon szóródott jeleknek, amelyek az adott irányba folyamatosan kisugárzott UH-útjába kerülő erekből származnak. Ezért ez az eljárás akkor használható, ha a penetrációs mélységen belül van kiemelkedő jellel bíró ér. Így az eredmény is erre az érre vonatkozik.

A legegyszerűbb áramlási sebességmérő készülék csak az átlagos sebesség **nagyságát** tudja megadni. A mérés lényege az, hogy a feldolgozó egységben összeadódik (hullám-szuperpozíció) a kibocsátott (pl. 8000 kHz-es) és az ettől (nem túl nagy mértékben) különböző frekvenciájú (pl. 8001 kHz-es) visszaszórt hullám és megjelenik a $8001 \text{ kHz} - 8000 \text{ kHz} = 1 \text{ kHz}$ frekvenciájú Doppler-jel. Ez a **lebegésként** ismert jelenség: Két egymástól kevéssé különböző (hang)hullám szuperpozíciójakor megfigyelhető periodikus amplitúdóingadozás frekvenciája megegyezik a két rezgés frekvenciájának különbségével. A Doppler-eltolódás a **hangfrekvenciás** tartományba esik (példánkban éppen 1 kHz), azaz egy hangszórával hallhatóvá tehető. Bizonyos elrendezéssel az áramlási sebesség **irányát** (közeledő vagy távolodó) is meg lehet határozni. Ekkor a visszaszórt hullámot nem az eredeti frekvenciájú (pl. 8000 kHz) hullámmal, hanem annál pl. 5 kHz-el nagyobb (8005 kHz) frekvenciájú **referencia**hullámmal szuperponáltatjuk. Így zérus áramlási sebesség esetén 5 kHz frekvenciájú a jel. Ha az áramlás sebességének az UH sugárnyaláb irányába eső vetülete a transzducer felé mutat (közeledés), akkor a visszazórt megnövekedett frekvenciájú (pl. 8001 kHz) hullám és a referenciahullám (8005 kHz) különbsége 4 kHz-es jelet jelent. Távolodáskor a visszazórt hullám az eredetinel kisebb frekvenciájú (pl. 7999 kHz), azaz a referenciával képzett különbségi jel 6 kHz-es lesz. Megjegyezzük, hogy ezen eljárás esetén a referenciától való eltéréseket hallható hanggá alakítva a közeledésnek a hang mélyülése, a távolodásnak a hangmagasság növekedése felel meg, ami fordítottja a Doppler-alapjelenségnél említett példának (közeledő ill. távolodó mentőautó szirénájának hangja).

A CW-berendezés komoly hátránya, hogy nem nyújt mélységi információt. Előnye, hogy a mérőeszköz kicsi, olcsó és könnyen kezelhető. Megfelelő gyakorlat esetén a hangszórával hallható hanggá alakított Doppler-eltolódásból diagnosztikai információ nyerhető.



VIII.41. ábra. Egydimenziós CW-berendezés sémája

Egydimenziós impulzus-Doppler-módszer (pulse Doppler-PD)

A PD-berendezésben az adás és a vétel időben elkülönül, ezért a transzducer azonos. A visszaszórt hullámokból csak egy beállított időintervallumban ((idő)kapun belül) beérkezett jelek szuperponálódnak a kibocsátott jellel. A kapu pozícióját (az adás és a vétel kezdete közötti időtartamot) és hosszát (a vétel kezdete és vége közötti időtartamot) változtatva a mért területnek a transzducertől való távolságát (mélységét), ill. a kiterjedését változtatjuk.

Doppler-görbe

Kétdimenziós normál B-képen beállítható a Doppler-nyaláb iránya, a kapu helye és hossza. Mérhető az értengely és az UH-nyaláb irányának szöge, így kiszámítható az áramlási sebesség. Ennek időbeli változását mutatja az ún. Doppler-görbe (VIII.42a és c ábra). A kapu hossza általában olyan, hogy az általa definiált területen belül a vér áramlási sebessége egy adott időpillanatban sem állandó. Azaz egyetlen sebesség helyett egy sebességeloszlás szerepel (pl. az ér közepén nagyobb az áramlási sebesség, a falhoz közel pedig kisebb). Ez azt jelenti, hogy a transzducerből kijövő – időben szinuszosan változó – UH a különböző sebességgel mozgó vörösvértesteken szóródva ugyan periodikus jelként, de nem egy adott frekvenciájú szinuszos jelként érkezik vissza, ugyanis az elemi – a különböző sebességek miatt – különböző frekvenciájú szóródott hullámok a térben összegződnek. A visszaverődött jel frekvencia analízise (Fourier felbontása, lásd VII/1.1.3. rész) válik szükségessé. Ez a felbontás és az adójellel való összehasonlítás eredményez egy Doppler eltolódásifrekvencia-spektrumot. A valóságban a helyzet még bonyolultabb. Mivel az egyes pulzusok mindössze 1-2 periódus

hosszúak, kielégítő frekvenciaanalízis csak pulzussorozatokból kapható. Jelfeldolgozási szempontból fontos paraméterré válik a pulzusok ismétlődésének frekvenciája (lásd VII/1.4.1.)

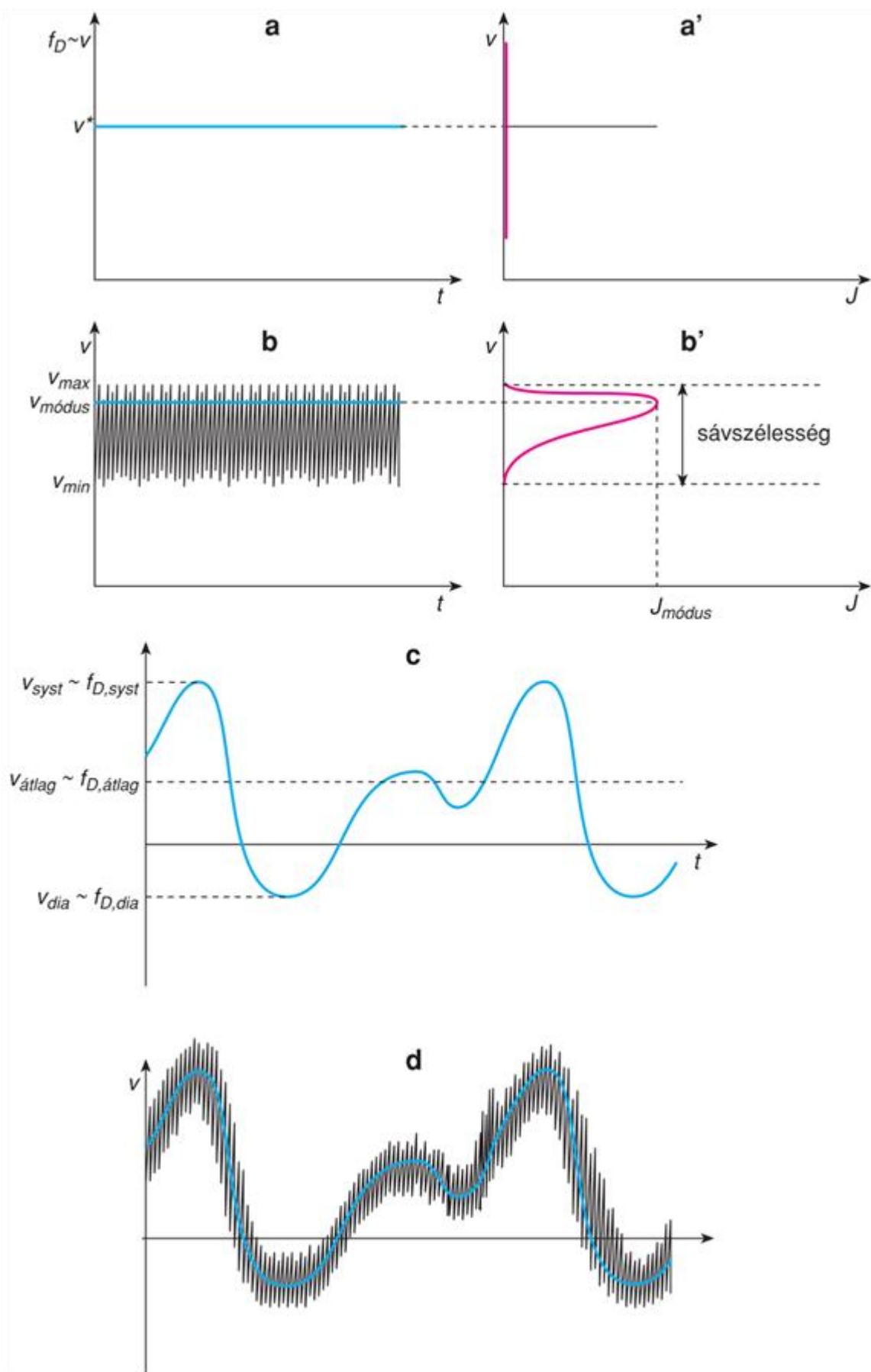
A Θ szög ismeretében a frekvencia spektrum átkonvertálható sebesség spektrummá, de a jelentős szöghiba (*I.* keretes rész) miatt gyakran meghagyják frekvencia spektrumnak. Ezt a spektrumot szokták ábrázolni egy speciális egydimenziós B képként. Ez a lineáris B-kép attól speciális, hogy a térbeli tengely helyett Doppler eltolódásifrekvencia- (ill. sebesség) tengely van. A fényesség pedig arra jellemző, hogy az adott sebességgel mozgó vörösvértestből mennyi van. Elegendően gyors mintavételezés esetén ábrázolható ezen spektrum időbeli változása, ezt szintén szokás Doppler-görbének (nem egészen helyesen Doppler-spektrumnak) nevezni.

A Doppler-görbe értelmezése

Az értelmezéssel összefüggő problémákat a VIII.42. ábra alapján tárgyaljuk. A VIII.42a és b ábrán az áramlási sebesség látható az idő függvényében. Mindkettő időben állandó áramlást mutat be, VIII.42a: az áramlás a kapun belül egy állandó áramlási sebességgel (v^*) jellemezhető, VIII.42b: a sebességek egy jellemző érték körül oszlanak el. Ez lehet pl. $v_{\text{módusz}}$, ahol a módusz a legnagyobb gyakorisággal előforduló értéket jelenti. Az a függőleges tartomány (sávszélesség), amelyen belül a VIII.42b. ábrán a sebességek ábrázolódnak, függ egy beállítási paramétertől. Ez pedig az a dinamikatartomány, amelyet a még ábrázolt Doppler-echojel intenzitásának ($J_{\text{szélső}}$) és a legnagyobb Doppler-echojel intenzitásának ($J_{\text{módusz}}$) hányadosa határoz meg. [Pl. ha -18 dB-es érték alatt már nincs sebesség megjelenítés, ez azt jelenti, hogy a tartományok széleinek (a legkisebb és legnagyobb sebességek intenzitásainak) és annak az intenzitásnak az aránya, amely ahhoz a sebességhez tartozik, amely sebességgel mozgó vörösvértestből legtöbb van $1:63$ -hoz ($-18 = 10\lg(J_{\text{szélső}}/J_{\text{módusz}}) = 10\lg(1/63)$]. A sávok szélességének összehasonlítása akkor lehetséges, ha az ábrázolt dinamikatartományok (a dB értékek) azonosak.

A VIII.42a' és b' ábrák vízszintes tengelyeire a Doppler-echojel intenzitását vettük fel. Ezt az információt a VIII.42a és b ábrának megfelelő megjelenítésben a fényesség tartalmazza. A VIII.42b'-ről látható, hogy a függvény (amely a sebesség eloszlásfüggvénynek felel meg) nem szimmetrikus, hanem a nagyobb sebességek felé ferde: a vörösvértestek inkább a nagyobb sebességű áramlásban vannak. (Ilyen ábrázolás csak akkor lehetséges, ha az áramlási viszonyok időben állandóak.)

A VIII.42c és d ábrák időben változó sebességű áramlásokat mutatnak be. VIII.42c: az áramlás a kapun belül azonos áramlási sebességgel jellemezhető, de az értéke függ az időtől. VIII.42d: a sebességek egy jellemző érték körül oszlanak el és a jellemző érték függ az időtől. Ha a görbe a pozitív tartományban van, akkor az a transzducer felé áramló, ha negatív, akkor a transzducertől eláramló folyadékra felel meg. Definiálható egy átlagos áramlási sebesség a görbe alatti terület alapján (az egy periódus alatt szállított vér mennyisége az időben változó esetben ugyanannyi, mintha végig az átlagos érték lenne a sebesség).



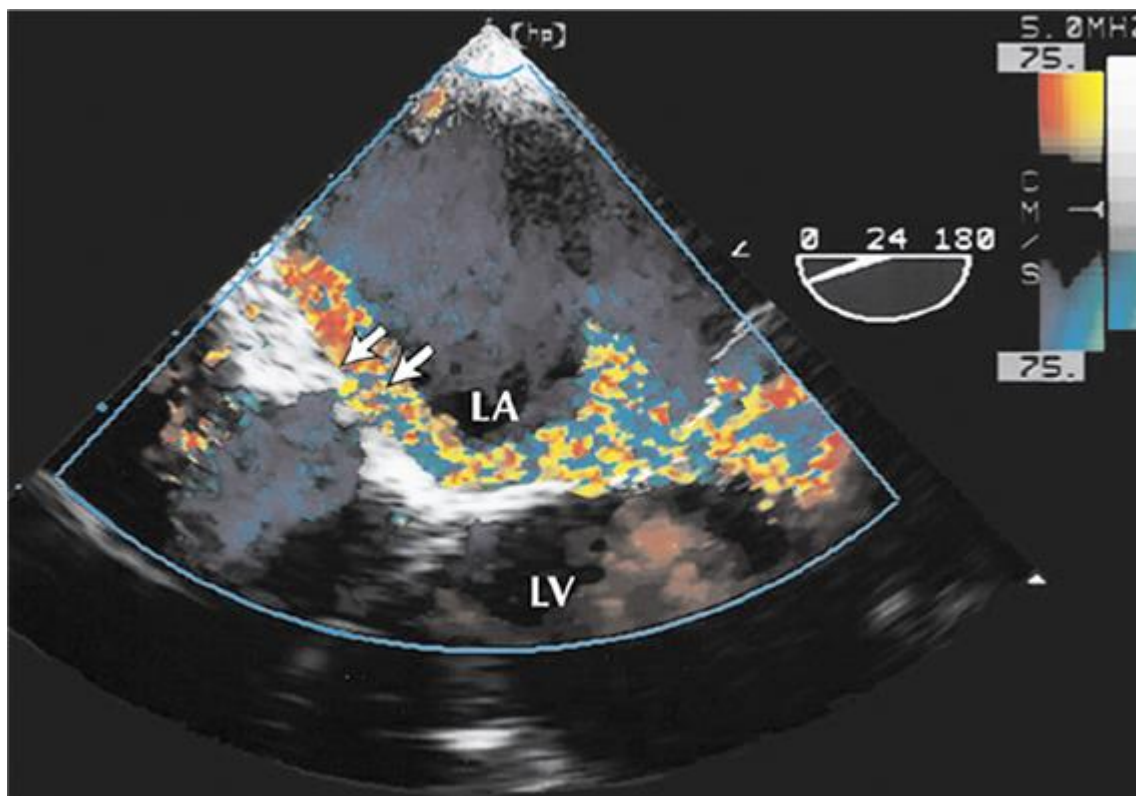
VIII.42. ábra. Doppler-görbék

Duplex megjelenítés

A Doppler-nyaláb tengelyét és a kaput is feltüntető kétdimenziós B-kép és a Doppler-görbe együttes ábrázolása a duplex kép. Ennek a módszernek a magzati és placentáris keringés tanulmányozásában egyedülálló szerepe van.

Színkódolt (color) Doppler-módszer

A kétdimenziós B-kép szűrkeskálás megjelenítése Doppler-információval kombinálódhat: ha egy területen belül transzducer felé való mozgás (pl. véráramlás) történik, akkor szokásosan az a terület meleg színnel, ha a transzducertől távolodó irányú mozgás történik, akkor hideg színnel ábrázolódik (VIII.43. ábra). Az eljárás neve: color Doppler. A kép tartalmaz információt a sebesség nagyságára is. A konvenció a következő: kisebb sebességeknek sötétebb, nagyobb sebességeknek világosabb árnyalatok felelnek meg. A szkennelés minden egyes irányára igaz: a transzducerben adás után időkapu sorozatban (multigate) dolgozódnak fel a különböző mélységekből visszaérkező impulzusok. Ha nincs frekvenciaeltolódás, akkor az adott irányban és mélységben szürke skálán jelennek meg az echojelek, ha van, akkor színesben.

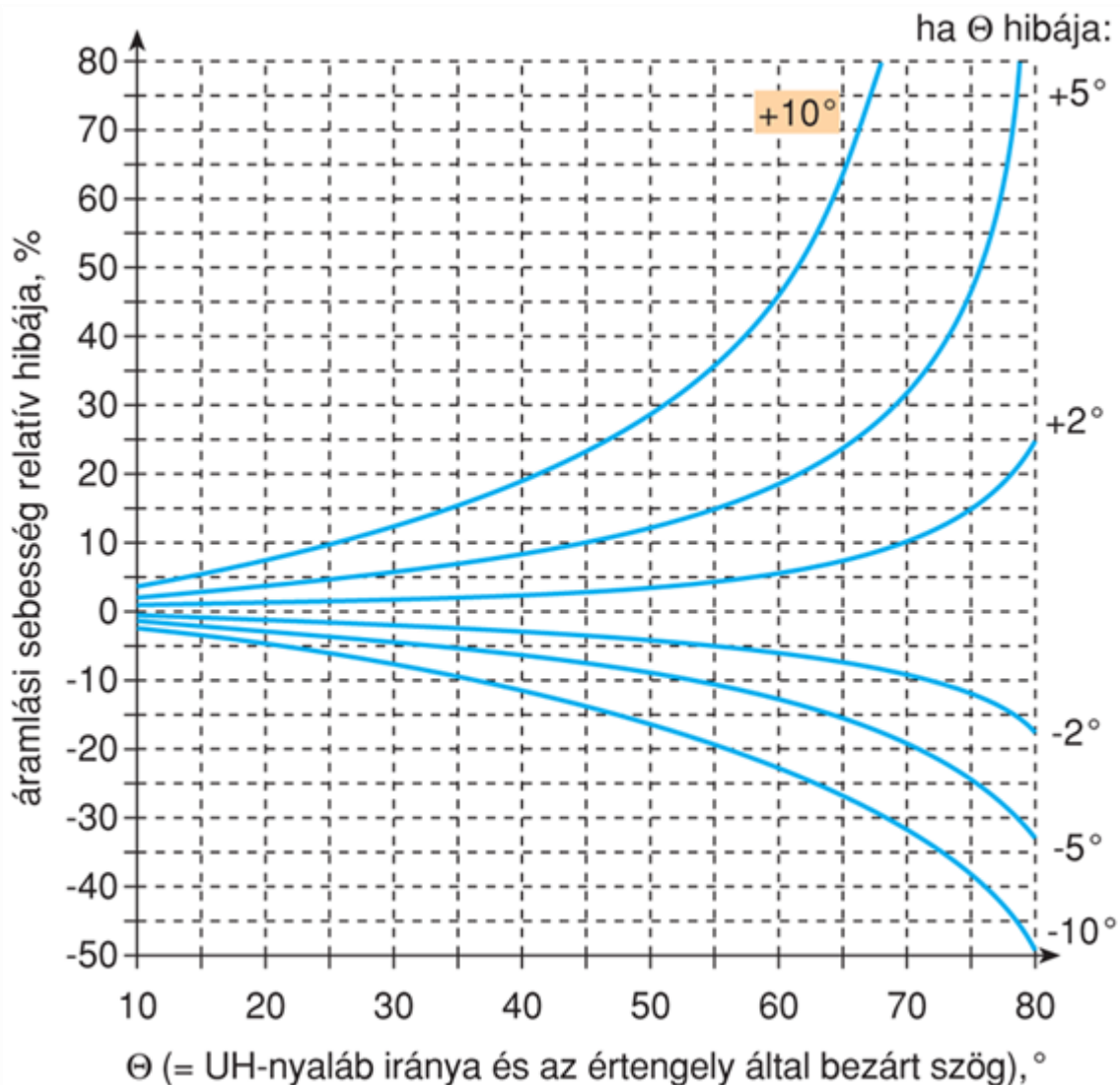


VIII.43. ábra. Színkódolt Doppler-UH kép (www.images.md)

VIII.4. megjegyzés: BART: blue away red towards

Jelfeldolgozási megoldások, problémák

Szöghiba. Adott áramlási sebesség esetén a legnagyobb Doppler-eltolódást akkor kapjuk, ha az UH-nyaláb iránya és az értengely által bezárt szög (Θ) zérussal egyenlő (VIII.6a képlet: f_D maximális, ha $\cos\Theta = \cos 0^\circ = 1$). Másik szélső esetben a $\Theta = 90^\circ$, ekkor nincs frekvencia eltolódás ($f_D = 0$, ha $\cos\Theta = \cos 90^\circ = 0$). Ezért minél kisebb szögbeállítással kell dolgozni. Tanács: Θ semmiképpen ne legyen nagyobb, mint 60° . A gyakorlatban Θ értéke meglehetősen pontatlanul ismert. Az 1. ábrán látható, hogy a (VIII.6b) alapján meghatározott áramlási sebesség értékekben milyen hibát okoz a Θ mérésének a hibája Θ különböző értékei esetén. Pl. 60° -os Θ értéknél a szög meghatározás 5° -os túlbecslése a valóságosnál 18% -kal nagyobb, 5° -os alulbecslése (az ábrán: ha Θ hibája -5°) a valóságosnál 13% -kal kisebb véráramlási sebesség értéket eredményez. Ugyanezen 60° -os szög esetén a szög meghatározás $+10^\circ/-10^\circ$ -os hibája $+46\%/-22\%$ -os sebesség meghatározási hibának felel meg.



1. ábra. Szöghiba

Félkvantitatív módszerek. Ha nehézségekbe ütközik az értengely és a Doppler-nyaláb szögének (Θ) meghatározása, akkor marad a Doppler eltolódási frekvenciák használata (f_D). Ezekből szokás néhány olyan mutatót meghatározni, amelyek jellemzik a keringést, és nem függenek Θ -tól. Ilyenek:

- **S/D arány:** a szisztolés és diasztolés Doppler-frekvencia aránya, $S/D = f_{D,\text{sys}}/f_{D,\text{dia}}$, ami megegyezik a szisztolés és diasztolés alatti áramlási sebességek arányával
- **rezisztenciaindex:** a szisztolés és diasztolés Doppler-frekvencia különbsége osztva a szisztolés Doppler-frekvenciával, $RI = (f_{D,\text{sys}} - f_{D,\text{dia}})/f_{D,\text{sys}}$
- **pulzatilitási index:** a szisztolés és diasztolés Doppler-frekvencia különbsége osztva az átlagos Doppler-frekvenciával, $PI = (f_{D,\text{sys}} - f_{D,\text{dia}})/f_{D,\text{átlag}}$

Az UH-frekvencia kiválasztása. A Doppler-vizsgálathoz használt UH-frekvencia kiválasztásánál alapvetően két szempontot kell figyelembe venni: a sebességmeghatározás felbontását és az echojel detektálhatóságát. Annál jobb felbontású a mérés, minél nagyobb a frekvencia, hiszen a Doppler eltolódás mértéke (VIII.5.) szerint arányos a frekvenciával. Ugyanakkor azonban a szövetek abszorpciója, szórása is erősödik a frekvencia növelésével, ami az echojel detektálhatóságát veszélyeztetheti. A két ellentétes szempont eredménye egy közepes frekvenciaérték, ami függ az ér elhelyezkedésétől. d mélységben levő ér esetén az optimális frekvencia kiválasztására hasznos lehet az alábbi összefüggés: $f_{\text{optimális}} = 9(\text{MHz cm})/d$.

Az ultrahangos leképezés hibalehetőségei. A műtermékeket úgy foghatjuk fel, mint a leképezés során keletkezett hamis, félrevezető információt. Ez lehet olyan visszaverődés, amelyhez nem tartozik valódi tárgy, vagy pedig az echo hiánya, amikor egy tárgy jelen van, és a kapott kép nem fedi a valóságot. Az UH-nyaláb ferde beeséséről és annak hatásáról a II/2.3.2. szakaszban volt szó.

Nagyon gyakran előfordul, hogy több, számunkra fontos képlet egy vonalba esik a szkennelés során. Feltéve, hogy a bevitt ultrahangnyaláb nem túlságosan nagy hányada verődik vissza az első tárgyról, általában elegendő intenzitás marad, hogy a mögöttes területeken lévő objektumokat is leképezze. Sokszor azonban a közeli tárgy olyan erősen visszaverő, hogy nem marad elegendő intenzitás a mögöttes tárgyak láthatóvá tételére. Ilyenkor azt mondjuk, hogy ezek a képletek az **erősen visszaverő objektum árnyékában** vannak. A képen egy sötét terület látható, pedig onnan visszhangoknak kellene érkezniük. Ilyen hatás gyakran észlelhető levegővel vagy csonttal határolt felszínnek mögött. A nyilvánvaló hátrányok mellett az árnyékjelenség néha hasznos is lehet, például az epekövek diagnosztizálásában sokszor segítség a vizsgáló számára. Ilyenkor a tárgy mögötti árnyék leleplezi azt mint erősen visszaverő közeget, amely nagyon eltér a mögöttes epehólyag falától. Ha az árnyék nagyon hátrányos, akkor bizonyos trükköket is be lehet vetni. Például a vizsgálat elvégezhető egy másik síkban, vagy a nemkívánatos „levegősákok” a gyomorban meg lehet szüntetni a beteg itatásával. Persze a jelenség fordítottja is előfordulhat: a kép „kivilágosodása” is észlelhető lehet, amikor a nyaláb egy olyan területen halad keresztül, amelynek az abszorpciója kisebb, mint a környezetéé. Ez oda vezet, hogy a képen egy világos folt látszik, mely akár telítésbe is futhat, ezáltal teljesen lehetetlenné téve a kép elemzését. Ilyenkor csökkenthetjük az erősítést, vagy használhatunk más elektronikus kompenzációs lehetőséget. A kivilágosodásnak lehet diagnosztikai értéke: ha például egy homogén szilárd vagy folyadékkal telt struktúra kerül a nyaláb útjába, annak gyengítési tényezője általában kisebb a kevesebb reflexió miatt, így mögötte sokszor kivilágosodás észlelhető.

Néha, ha sok erősen visszaverő felület kerül a nyaláb útjába, többszörös visszaverődés is jelentkezhet (l. 2. ábra). Ez akár oda is vezethet, hogy a tárgy képe többször is megjelenik. A jelenség viszonylag könnyen kiszűrhető, mert a kép pontos periódusos ismétlődésének valószínűsége kicsi, ezért természetellenes jelenség.



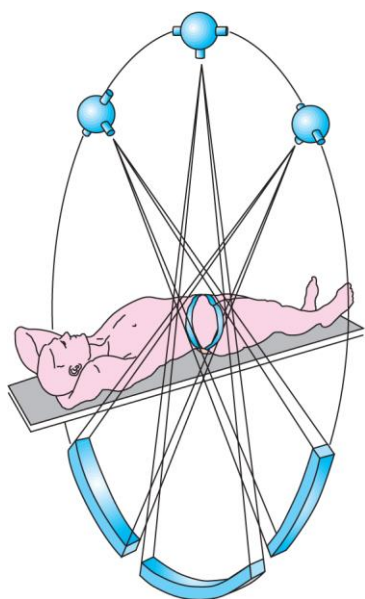
2. ábra. Példa többszörös visszaverődésre. A levegővel telt csövet jelen esetben 6-szor lehet látni.

Nyquist-határ. A pulzus Doppler-készülék egyik jellemzője a pulzus ismétlődési (repetíciós) frekvencia (PRF). Egy adott PRF meghatározza azt a mélységet, ahonnan a következő pulzus indulása előtt még visszaérkezhet jel. Kielégítő mélységi jelhez tehát nem szabad túl nagy PRF-et választani. A túl alacsony PRF viszont behatárolja a

legnagyobb mérhető Doppler-frekvenciát. A Nyquist nevéhez fűződő **mintavételezési tétel** alkalmazása szerint a legnagyobb még detektálható Doppler frekvencia a PRF fele (= Nyquist-határ). Ha f_D meghaladja a Nyquist-határt, technikai műtermék jelenik meg: a határ feletti frekvenciák ellenkező irányú jelként torzítva ábrázolódnak a Doppler-görbén.

4.3. VIII/4.3. Röntgenabszorpciós CT

A hagyományos röntgenképek hátránya, hogy a vizsgált objektumnak a harmadik dimenziója nem jelenik meg, mert a keletkezett kép nem ad információt arról, hogy a röntgensugár gyengülése milyen mélységű rétegben jött létre. Ilyen felvételeken ugyanis csak a sugár útjába eső egyes térfogatelemek abszorpciójának összege határozható meg a kép alapján: **szummációs felvétel** (VIII/3.1. fejezet). Tomográfias eljárásokat már a század húszas–harmincas éveiben is használtak, amelyekben egy pásztázó kamerát, ún. tomográfias szkennert forgattak az objektum körül, hogy térben feloldott képet kapjanak. Természetesen ezek az eljárások teljesen mechanikusak voltak. A számítógépek megjelenése ennek az eljárásnak a gyors fejlődését tette lehetővé. A röntgen- abszorpciós CT olyan tomográfias képképző diagnosztikai módszer, amely a vizsgált test hossz tengelyére merőleges síkban (transzaxiális, a humán anatómiában horizontális) egy meghatározott szeletről ad képet (VIII.44. ábra), amely kép az abszorpciós együtthatók értékeinek eloszlását mutatja.



VIII.44. ábra. A komputertomográfia (CT) a vizsgált test hossz tengelyére merőleges síkban (transzaxiális, a humán anatómiában horizontális) egy meghatározott szeletről ad képet

A CT-módszer orvosi alkalmazásának javaslata, a módszer kidolgozása és az első berendezés megalkotása az 1960-as években történt, G.H. Hounsfield és A. Cormack munkássága nyomán, akik 1979-ben orvosi Nobel-díjat nyertek el eredményeik alapján. Az általuk megvalósított technika alapelve a mai modern készülékekben is azonos maradt. Ez a következő. A test egy kiválasztott metszeti síkjában sokféle irányban vékony röntgennyalábbal a testet átvilágítjuk és mérjük az intenzitás gyengülését minden irány mentén. Egy-egy irány (pl. k irány) mentén végzett mérés a nyaláb útjába eső ($i = 1, 2, 3 \dots n$) voxelek abszorpciós együtthatói (μ_i) által meghatározott szummációs intenzitás-gyengítési értéket fogja szolgáltatni

$$J_k = J_0 e^{-(\sum \mu_{ik}) \Delta x}, \quad \lg \frac{J_0}{J_k} = \lg e \cdot \Delta x \cdot \sum_{i=1}^n \mu_{ik},$$

(VIII.7.)

ahol Δx egyetlen voxel-, „réteg” vastagsága (amely paraméter az aktuális berendezés felbontásával van kapcsolatban). Egy-egy irányban végzett mérés egy-egy J_k adathoz vezet, és mindegyiknek megfelel „ n ” db ismeretlen abszorpciós együttható.

Ahhoz, hogy a metszeti sík elemeit az aktuális μ_{ik} együttható-értékekkel jellemezni tudjuk, elegendő számú irány mentén kell méréseket végezni, és a sok J_k -összefüggésből kialakuló egyenletrendszerből kifejezni az általánosan $n \cdot m$ számú ismeretlen μ_{ik} értéket. Ez a feladat matematikailag akkor megoldható, ha minden voxel legalább kétféle, egymást metsző irány mentén részese lett intenzitásgyengítési mérésnek. Ezt a feltételt az első készülékben kis kollimatónyílással ellátott röntgenső, mint sugárforrás (tűnyaláb), és kisméretű detektor párhuzamos léptetésével oldották meg. Miután a léptetés lefedte a test átmérőjét, a mérési irányt elfordították, és ismét végigpásztázták a réteget párhuzamos tűnyalábok mentén. A Hounsfield által összeállított első berendezést (első generációs készülék) az idők folyamán továbbfejlesztették. A fejlesztés során megszabadultak a precíziós léptetés nehéz követelményétől és az irányokat kizárólag forgatással szabályozták. Az adatfelvételt gyorsítandó, egy röntgensőpozícióból egy legyező alakú irányosorozatot valósítottak meg, és a test másik oldalán egyetlen kisméretű detektor helyett egy körív mentén elhelyezett detektorsort alkalmaztak.



G.H. Hounsfield (1919–2004) angol elektromérnök



A.M. Cormack (1924–) dél-afrikai születésű amerikai fizikus együttesen kapta meg a Nobel-díjat 1979-ben a CT megalkotásáért

Modernebb CT-készülékek megoldásait látjuk a VIII.45. ábrán. Az a, b és c ábra az előzőekben tárgyalt továbbfejlesztés állomásait mutatja be. A legújabb készülékekben már a sugárforrást sem mozgatják, hanem egy rögzített röntgensőben felgyorsított elektronnyalábot térítenek el tekercsekkel a megfelelő irányba, és egy wolframgyűrűbe ütköztetve irányítják a testre (VIII.45d, e ábra). Több gyűrűt egymás mellé építve elérhető, hogy a test, a sugárforrás és a detektor mozgatása nélkül a test több szelvénye is leképezhető. Ezek a CT-készülékek 30...50 ms-on belül képesek képet alkotni, így lehetővé válik például a szívfal mozgásának vizsgálata.

A CT-vizsgálatok célja általában egy makroszkopikus térfogat jellemzése, azaz teljes 3D adatgyűjtés. Egy 3D térfogat összes elemét egymás melletti szeletenként elvégzett adatgyűjtés alapján tudjuk meghatározni. Amennyiben ez a testtengelyre felfűzött szeleteket jelent, a technikát **CAT-SCAN**-nek (Computed Axial Tomography) nevezik. Az axiális irány (Z tengely) menti léptetést a fekvő beteg eltolásával oldják meg.

A fejlődés egyik új iránya a **spirál-CT** (Dynamic Volume Scanning, DVS), amely csúcskategóriás készülékekbe építhető kiegészítő program. Ez teljesen új mérési elven alapszik: egy folyamatosan mozgó röntgensővel és eközben egyenletesen és folyamatosan mozgó asztallal, végeredményben spirális lefutásban egyetlen 16–30

másodperces expozícióval egy nagyobb testhenger összes voxeljének sugárgyengítése meghatározható. Az új módszer igen jó minőségű 3 dimenziós másodlagos képrekonstrukciót eredményez, amely görbe vonalú másodlagos képrekonstrukcióval társítva, egyetlen, lassan beadott kontrasztanyagbolussal CT-angiographiát (CTA) tesz lehetővé. Másodlagos képrekonstrukcióval speciális algoritmusok segítségével az egyszer már felvett és digitálisan rögzített rétegeképekből új szkennelés nélkül bármilyen másféle szeletelési síkú (például szagittális, frontális vagy ferde síkú) új kép készíthető.

A hazai klinikumban a VIII.45c ábrának megfelelő berendezések találhatók meg. Minél kisebb szögelfordulásonként rögzíti a detektorhoz kapcsolt számítógép az J_k intenzitásokat, annál pontosabb lesz a kép, de annál hosszabb ideig is tart, amíg a gép megoldja az egyenleteket. Ezért minden vizsgálat esetén reális kompromisszumot kell kötni a szükséges pontosságot és az időigényt figyelembe véve.

A kép információtartalmának növelése érdekében röntgensugár-elnyelő kontrasztanyagot is szoktak a betegnek adni. A CT röntgensugárforrása inhomogén, ezért jó szűrést és kollimálást igényel. A CT-ben használt energiatartományban (120–140 kV-os csőfeszültség mellett) lágy szövetekben a röntgensugárzás jórészt Compton-szórás, jóval kisebb részben (mintegy 10-15%-ban) fotoeffektus révén gyengül. Párképződés ebben az energiatartományban nem jöhet létre. Valamely voxel sugárgyengítési együtthatója e kétféle tömeggyengítési együtthatóból és a sűrűségből adódik (II/3.1.6. fejezet). Ez a következő formulához vezet:

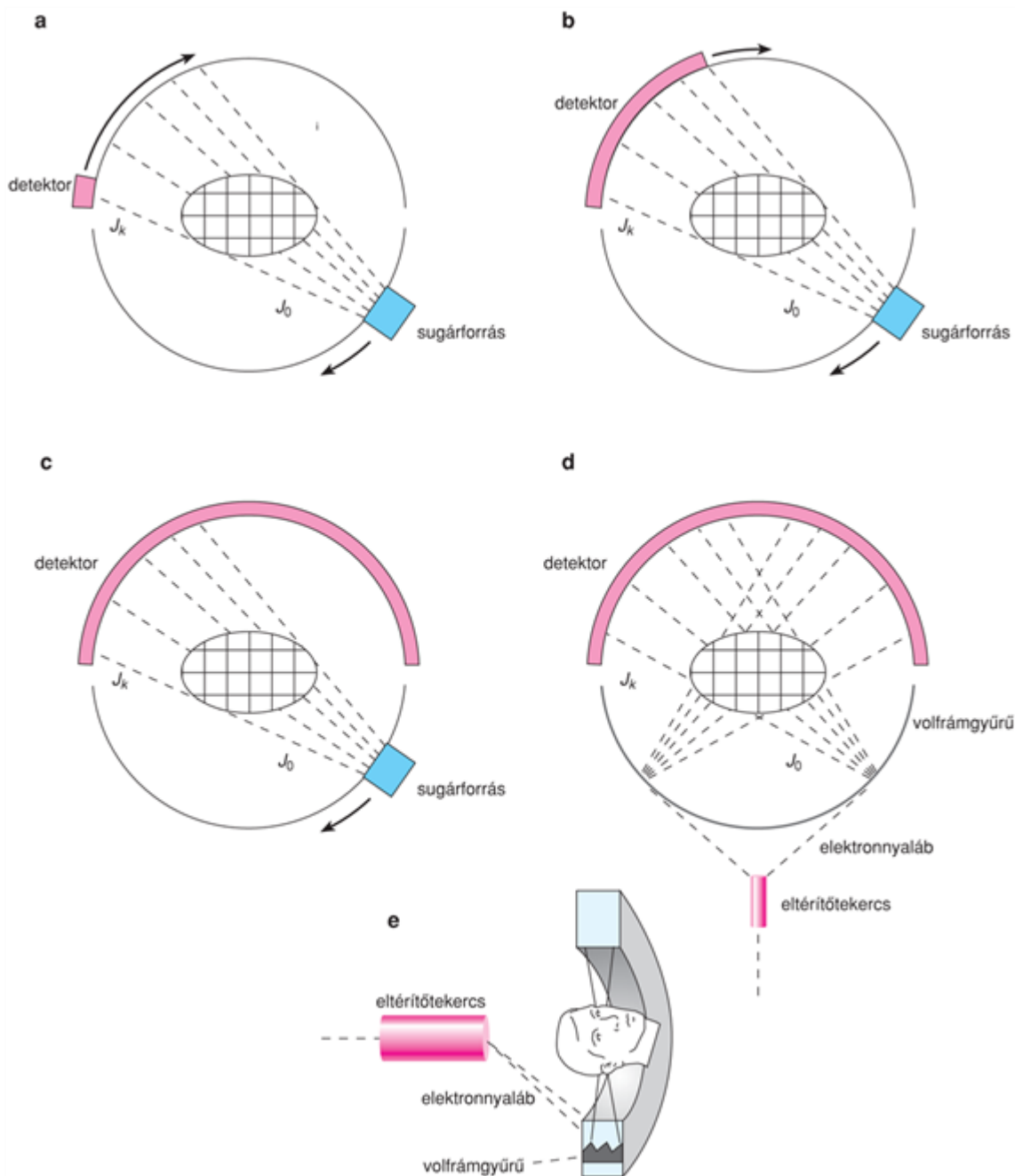
$$\mu = \tau + \sigma = (\tau_m + \sigma_m)\rho,$$

(VIII.8.)

$$\mu = p\rho Z_{eff,x}^n + s\rho\left(\frac{Z}{A}\right)_{eff},$$

(VIII.9.)

ahol ρ a sűrűség, Z a rendszám, $Z_{eff,x}$ az ún. effektív rendszám, n a hatványkitevő (kb. 3), p és s tartalmazza az effektusok fotonenergiától való függését és az egységek átszámításából eredő állandókat. A a tömegszám. (Amint látható, a Compton-szórást lineáris rendszámfüggéssel jellemeztük.)



VIII.45. ábra. Különböző generációs CT-berendezések felépítési sémája

A VIII.1. táblázatban a formula alkalmazásához szükséges konkrét adatokat tüntettünk fel a szövetekben leggyakrabban előforduló anyagokra és két a klinikai gyakorlatban alkalmazott kontrasztanyagra. A Z^3 -függésből adódóan látszólag a fotoeffektus dominál, azonban a fotonenergiától való $(1/hf)^3$ -függés miatt ez a tag csak kb. 10%-os járulékot okoz, a Compton-effektus valószínűsége csak kevésbé (~lineárisan) csökken a fotonenergia növelésével. Kontrasztanyagok azonban (I, Ba) jelentősen megnövelhetik a Z -n keresztül τ járulékat és így μ a kontraszttal jelölt tartományban jelentősen megnövekszik. Ezt a hagyományos röntgenátvilágításnál (VIII/3.1.1. fejezet) használt módszert a CT-felvételeknél is alkalmazzák.

8.1. táblázat - VIII.1. táblázat. A sugárgyengítési együttható függése az anyag rendszámától és tömegszámától

Elem	Z	A	Z ³	Z/A
------	---	---	----------------	-----

H	1	1	1	1
C	6	12	216	0,5
N	7	14	343	0,5
O	8	16	512	0,5
Ca	20	40	8000	0,5
Fe	26	56	17576	0,46
I	53	127	148877	0,42
Ba	56	138	178616	0,41

A CT bevezetése óriási előrelépést jelentett az orvosi képkalkuló eljárások területén. Számos kóros folyamat (daganatok, vérzések) megváltoztatja a test egy adott területén a röntgensugár-elnyelő képességet, ami a CT segítségével pontosan lokalizálható, míg a hagyományos röntgentechnikával nem (VIII.46. ábra). A CT egészen kicsiny ~ 1%-os abszorpciós együttható (denzitás) különbségeket is ki tud mutatni, és bár „képességben” elmarad a hagyományos röntgentechnikák mögött, lehetőséget nyújt gyors diagnózis alkotására például a koponyán belüli kóros folyamatok esetében is.



VIII.46. ábra a. Egészséges emberi agyról készült CT-felvétel



VIII.46. ábra b. Agyvérzést követően készült CT-felvétel

A CT-felvételeken az abszorpciós együtthatókat vagy a denzitásértékeket ($\lg J_0/J = \text{konst.} \cdot \mu$) Hounsfield-egységekben (HU) mérik.

$$HU = \frac{\mu - \mu_{\text{víz}}}{\mu_{\text{víz}}} \cdot 1000$$

(VIII.10.)

A HU-ban kifejezett értékek felnagyítják a lágy szövetek és a víz közötti igen kis denzitásbeli különbségeket, ahogy azt a VIII.2. táblázatban látjuk. A 30–70 HU-tartományból csak a levegő és a csontszövet tulajdonságai emelkednek ki jelentősen.

A CT-kép megjelenítésénél úgynevezett „ablak”-nyitást vagy „ablakolást” alkalmaznak, ami azt jelenti, hogy a pixel teljes fényesség-skálájára felnagyítják a megjeleníteni kívánt HU-tartomány szélső értékeit. Így a kijelölt tartomány/ablakon kívül eső HU-értékek tartományai vagy egyöntetűen fehérek, vagy egyöntetűen feketék lesznek, azonban a kijelölt értéktartományon belül a különbségek jól értékelhetők. A CT-felvételeken az a szokás, hogy a röntgensugárzást jobban gyengítő szövetféleség fehér vagy világosszürke, a röntgensugárzást kevésbé gyengítő szövetféleség sötétszürke vagy fekete.

Mivel a CT ionizáló sugárforrást használ, számolni kell a beteg, illetve a kezelőszemélyzet sugárterhelésével. A személyzet sugárterhelése 0,7–1,3 μSv egy koponyaszken, 2,4–3,0 μSv egy testszken esetén. A betegek sugárterhelése ennél jóval nagyobb. Általában elmondhatjuk, hogy a sugárterhelés egy CT-felvétel esetén a hagyományos ernyőfénykép sugárterhelésének 500–600-szorosa is lehet. A szomatikus sugárterhelés a sugárzás spektrumától, a mezőnagyságtól, a szeletvastagságtól, a szkennelés időtartamától, a kollimálástól, a sugárforrás mozgási pályájától és a röntgensugár intenzitásától függ. Egy mellkasi felvétel 60 rétegfelvétellel egyenként 5 mm vastagságban pl. 6 mSv dózist jelent. A vékony szeletek relatív sugárterhelése nagyobb, mert a kedvező jel-zaj arány fenntartása érdekében növelni kell a röntgensugár intenzitását. Törekedni kell ezért a felvétel készítésekor a vizsgált régió pontos behatárolására, illetve az optimális szeletvastagság kiválasztására.

8.2. táblázat - VIII.2. táblázat. Néhány szövet standard denzitásértéke Hounsfield-egységekben

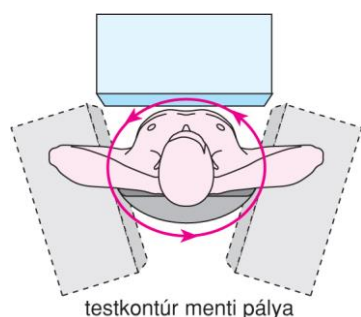
Szövet/szerv	Standard gyengítési érték (HU)
Tömör csont	250–1000
Szivacsos csont	130–100
Pajzsmirigy	70 \pm 5
Máj	65 \pm 5
Izom	45 \pm 5
Lép	45 \pm 5
Nyirokcsomó	45 \pm 5
Hasnyálmirigy	40 \pm 10
Vese	30 \pm 10
Koagulált vér	80 \pm 10
Vér	55 \pm 5
Plazma	27 \pm 2
Zsírral kevert szövetek	50...–80
Zsír	–65 \pm 10
Tüdő	–500...–850

4.4. VIII/4.4. Magsugárzáson alapuló technikák

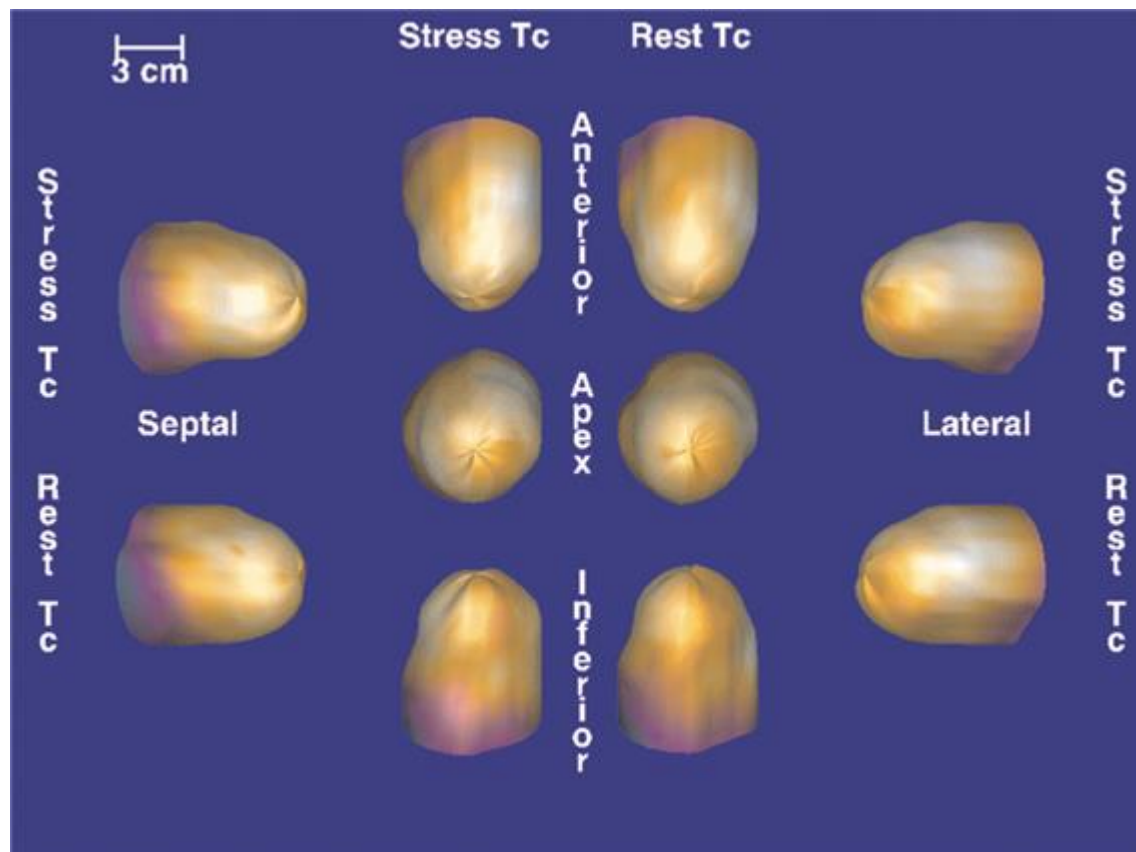
4.4.1. VIII/4.4.1. Fotonemissziós számítógépes tomográfia, SPECT

Gamma-kamerával a vizsgált szervek kétdimenziós szummációs szcintigramjai állíthatók elő, hiszen a kamera nem érzékeli, hogy az észlelt foton a vizsgált test milyen mélységéből érkezik. Ha azonban egy gamma-kamerát a vizsgált test körül körbeforgatunk, akkor a testben lévő izotópeloszlásról több (sok) irányból készíthetünk felvételeket (VIII.47. ábra). Ezekből az adatokból a CT-módszereknél használt algoritmusok segítségével a mélységi (harmadik) dimenzió izotópeloszlása is felderíthető.

A SPECT- (Single Photon Emission Computed Tomography) módszerben a testből származó sugárzási intenzitás/aktivitás eloszlástérképét készítjük el a többféle irányban elhelyezett detektor segítségével. Modern SPECT-készülékekben egymással szemben elhelyezett két vagy négy 50 cm széles detektorral egy adott testszelvény izotópeloszlásáról, illetve annak változásáról készíthető aránylag nagyon gyorsan izotópeloszlási kép. A SPECT alkalmas agyi keringési folyamatok, tüdőventiláció, szív működés, májfunkció vizsgálatára, de felbecsülhetetlen értékű tumorok kimutatásában, differenciálásában, így onkológiai alkalmazása rohamosan nő. A gamma-kamerás és SPECT-vizsgálatokban leggyakrabban alkalmazott izotóp a ^{99m}Tc , a ^{123}I , a ^{131}I és a ^{133}Xe (lásd VIII.5. Megjegyzés és VIII.48. ábra).



VIII.47. ábra. SPECT-felvétel készítése testkontúr menti pályán



VIII.48. ábra. Szívizom perfúziós szcintigráfia ^{99m}Tc MIBI-vel. A tomográfias felvétel Cardio-C (Mediso) kétféjes SPECT-készülékkel történt. A képen normális aktivitás eloszlású 3D rekonstruált felvétel látható. (DEOEC Nukleáris Medicina tanszék, prof. Galuska László felvétele)

VIII.5. megjegyzés. *Példák radiofarmakonok használatára*

^{133}Xe – tüdőventiláció vizsgálata

^{123}I – pajzsmirigyszcintigráfia (Na-jodid); tumorszcintigráfia (jelzett MIBG: meta-iodobenzil-guanidin)

^{131}I – pajzsmirigyszcintigráfia (Na-jodid)

^{99m}Tc – szívizom-perfúzió (jelzett MIBI: metoxi-izobutil-izonitrit); agyi perfúzió, gyulladáshoz vezető folyamatok (jelzett HMPAO: hexametilén-propilénamin-oxim)

4.4.2. VIII/4.4.2. Pozitronemissziós tomográfia, PET

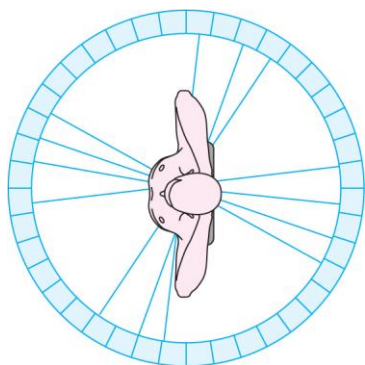
A pozitronemissziós tomográfia (PET) olyan számított tomográfiai módszer, amellyel a szervezetbe juttatott, pozitronot emittáló izotóppal jelölt jelzőmolekulák eloszlását lehet vizsgálni. A PET sajátos tulajdonsága, hogy kvantálható. A pozitronemittáló izotópok elméletileg bármely, az anyagcsere-folyamatban részt vevő molekulához hozzákötődhetnek, így különböző anatómiai régiókban az anyagcsere mértékében felhalmozódhatnak, ezáltal a szervezet anyagcsere-folyamatai kvantitatív módon mérhetők, ugyanakkor bizonyos anatómiai struktúrákhoz is köthetők. A klinikai gyakorlatban a PET-technikát kardiológiai, neurológiai, pszichiátriai, onkológiai stb. vizsgálatokban, a korai tumor-diagnosztikában, -differenciáldiagnosztikában, a tumorprogresszió megítélésében, a recidívák, illetve metasztázisok keresésében, a terápia beállításában, epilepsziás göccök lokalizációjában stb. elterjedten használják.

A PET módszer az alap kutatásban új dimenziókat nyitott. Segítségével számos biokémiai, élettani folyamat, például szöveti anyagcsere, véráramlás, vértérfogat, oxigén, glükóz, aminosavak, zsírsavak anyagcsereje és transzportja, membránpermeabilitás, fehérjeszintézis, receptorrendszerek lokalizációja és működése, gyógyszerek szöveti kinetikája, molekuláris diffúzió stb. vizsgálható. A PET rendkívüli mértékben járult hozzá az emberi agy kutatásához azáltal, hogy aránylag kis sugárterheléssel alkalmas az emberi agy működés közben való tanulmányozására. Hazánk első PET-központja a Debreceni Orvostudományi Egyetemen működik.

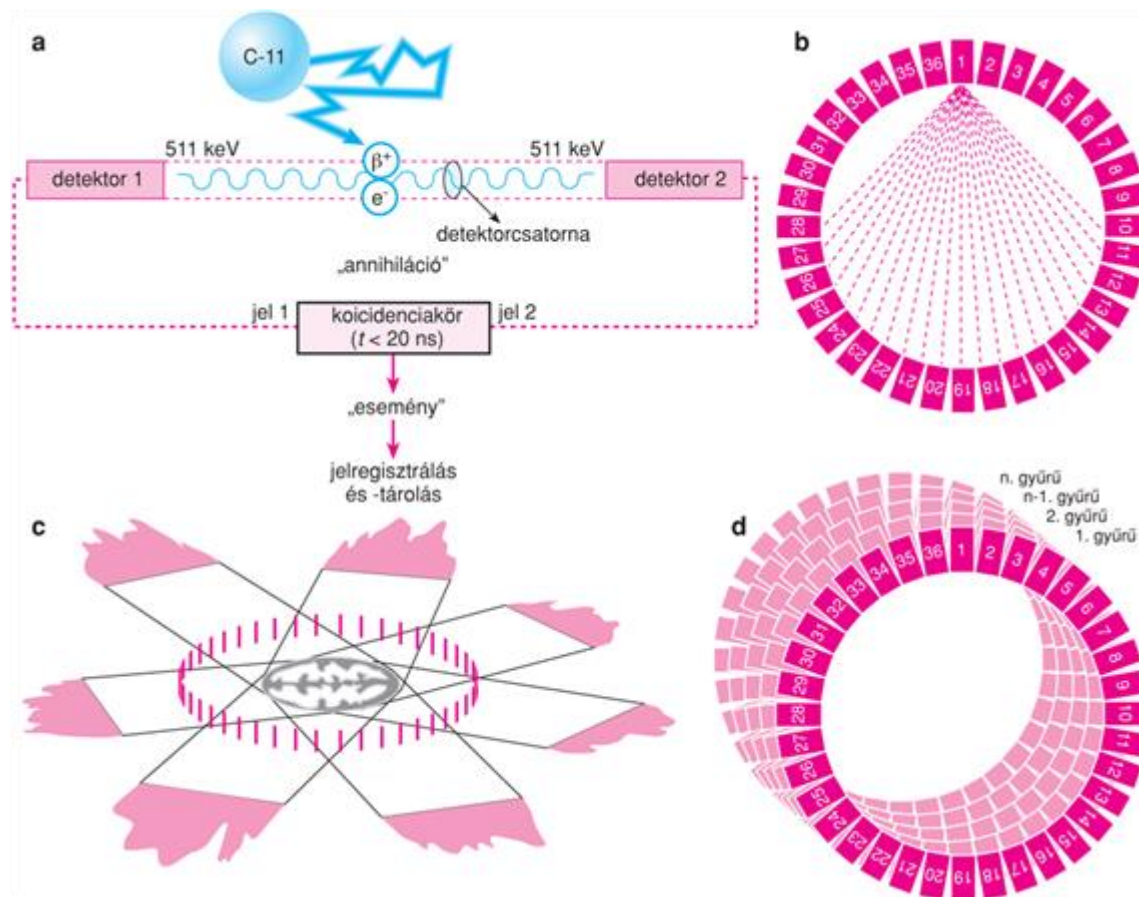
A PET-vizsgálatok során radioaktív izotóppal jelölt jelzőanyagot juttatunk a szervezetbe, amely izotóp pozitron (β^+ -részecske) emittálásával bomlik. E részecskék aránylag kis távolság, 1-2 mm megtétele után találkoznak egy elektronnal, amikor is a két részecske „annihilálódik” (II/3.2.1. fejezet), vagyis energiátartalmuk két ellentétes irányú és azonos energiájú (511 keV) gamma-foton formájában szétsugárzódik. Ezt a sugárzást egy, a vizsgált személyt körülvevő szcintillációs detektorgyűrű érzékeli. A PET-kamerák első generációjában talliummal aktivált NaI-kristályokat alkalmaztak, azonban a napjainkban vásárolható, széria gyártású készülékeket cézium-fluorid- (CsF -), bárium-fluorid- (BaF_2 -) vagy bizmut-germánát- ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ -) kristályokkal szerelik fel. A kristályokat optikailag egy fotoelektron-sokszorozóhoz csatolják. A sugárzás a kristályban felvillanásokat kelt, amit a fotoelektron-sokszorozó mérhető elektromos impulzusokká alakít.

A közel egy időben (20 nanoszekundumon belül „koincidenciában”) jelző detektorok egy-egy egyenest jelölnek ki, ami azt jelenti, hogy az egyenes két végén lévő detektor által meghatározott hasáb térfogatában pozitronemisszió történt (VIII.49. ábra). Egy detektor általában a detektorok felével-harmadával áll olyan párhuzamosban, amely incidenciában való detektálásra alkalmas. Ezeket a jeleket egy számítógép memóriája tárolja, így a vizsgálatot követően a detektorgyűrű által meghatározott térfogatban lezajlott annihilációk vetületi eloszlása ábrázolható. A digitálisan tárolt adatokból gyakorlatilag általunk meghatározott síkokban kétdimenziós eloszlástérképek rekonstruálhatók.

A PET-kamerák általában számos gyűrűt tartalmaznak (4–35), egy-egy gyűrű vastagsága kb. 6,5 mm. A vizsgált területet azonban nem csak ez határozza meg, mert a tengelyirányú képmező hossza a vizsgálóasztal automatikus mozgásával megsokszorozható. Gyakorlatilag így az egész test vizsgálható (VIII.50. ábra). A jelenlegi PET-kamerákban használatos detektorokkal nagyon jó hatásfokot (a incidenciaesemények 80%-ának detektálása) lehet elérni, a detektorok időfelbontása 2–20 ns között van.



VIII.49. ábra. A PET-kamera gyűrűszerűen elrendezett detektorai. A koincidenzában megszólaló detektorok olyan egyeneseket jelölnek ki, amelyek metszéspontjai meghatározzák a radiofarmakon-dúsulások helyét

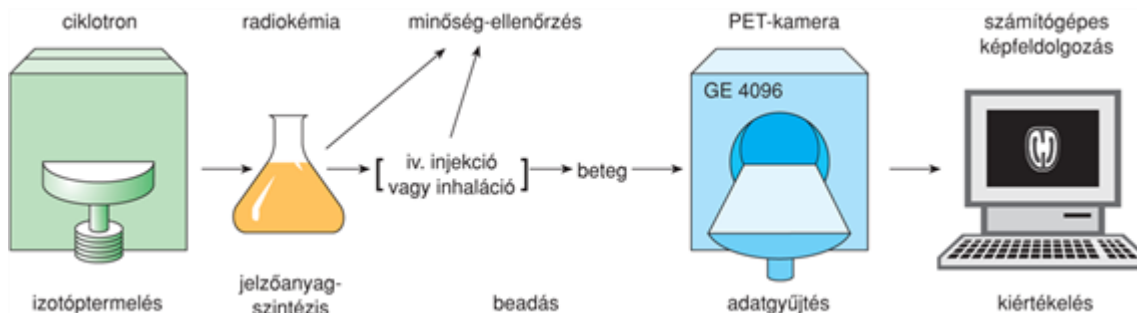


VIII.50. ábra. A PET-módszer alapja és a PET-kamera működési elve. a) a β^+ -emissziót követően keletkező gamma-fotonok detektálásának elve. b) A PET-kamera egy detektorgyűrűjének vázlatja. c) A detektorgyűrű síkjában való visszavetítés vázlatja. d) A PET-kamera-detektorgyűrű rendszere

A PET-vizsgálatokhoz leggyakrabban használt izotópokat a VIII.3. táblázat tartalmazza. Amint az a VIII.3. táblázatból kitűnik, ezek az izotópok igen rövid felezési idejűek (2...110 perc), emiatt mind termelésüket, mind a kiválasztott jelzőmolekulákra való rákötésüket a felhasználás helyén célszerű elvégezni. A VIII.4. táblázatban néhány, nem konvencionális β^+ -sugárzó izotópot és alkalmazási területüket mutatjuk be. A PET-laboratórium alapegységeit és azok funkcióját a VIII.51. ábra mutatja be.

8.3. táblázat - VIII.3. táblázat. PET-vizsgálatokra használt néhány β^+ -sugárzó izotóp és fő tulajdonságaik

Izotóp	^{11}C	^{13}N	^{15}O	^{18}F
Felezési idő (perc)	20,3	9,98	2,05	110
Magfizikai reakció	$^{14}\text{N}(p,\alpha)^{11}\text{C}$	$^{16}\text{O}(p,\alpha)^{13}\text{N}$	$^{14}\text{N}(d,n)^{15}\text{O}$	$^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$



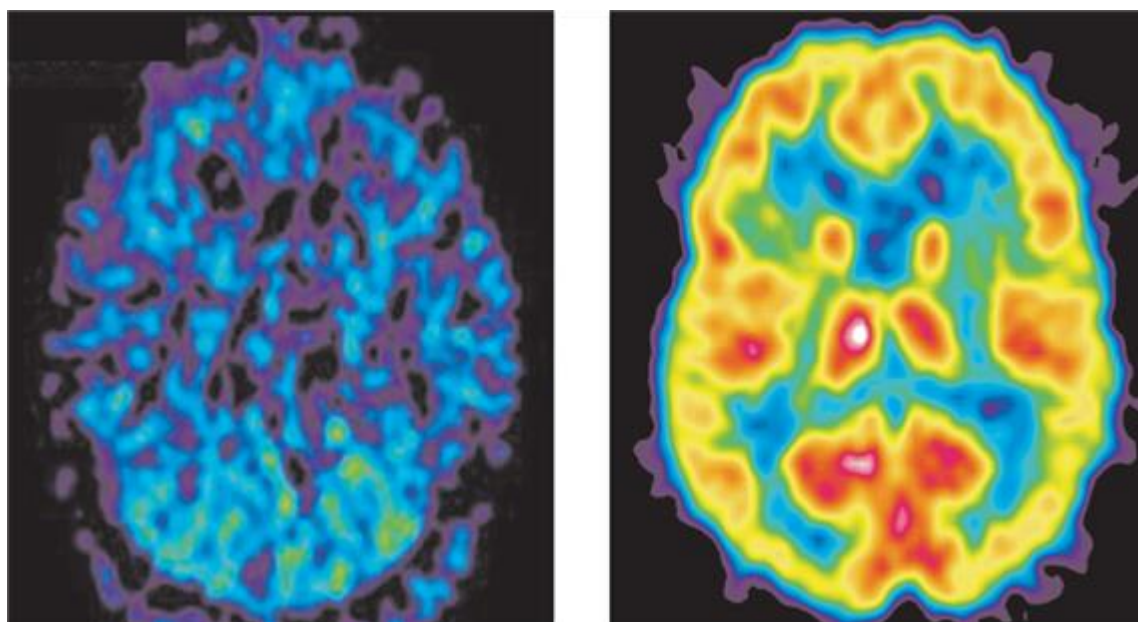
VIII.51. ábra. A PET-laboratórium alapegységei és azok funkciója

8.4. táblázat - VIII.4. táblázat. Nem konvencionális β^+ -emittáló izotópok és néhány tulajdonságuk

Izotóp	Felezési idő	β^+ (%)	Magreakció	Alkalmazási terület
^{55}Co	0,73 nap	76	p, α	kelátorokkal való jelölés
^{61}Cu	0,14 nap	61	d, n	rézmetabolizmus
^{67}Zn	38 perc	93	p, n	cinkmetabolizmus
^{66}Ga	0,39 nap	57	p, n	kelátorokkal való jelölés
^{68}Ga	68 perc	89	p, n	kelátorokkal való jelölés
^{70}As	53 perc	90	p, n	foszforanalóg
^{71}As	2,70 nap	30	d, n	foszforanalóg
^{72}As	1,08 nap	88	p, n	foszforanalóg
^{74}As	17,78 nap	29	p, n	foszforanalóg
^{76}Br	0,68 nap	54	p, n	direkt–indirekt jelölések
^{110}In	69 perc	62	p, n	kelátorokkal való jelölés
^{124}I	4,15 nap	23	p, n	direkt–indirekt jelölések

A számos pozitronemittáló izotóp közül azok alkalmasak biológiailag aktív molekulák jelzésére, amelyek az élő szervezet gyakori elemei közé tartoznak, viszonylag egyszerűen, nagy biztonsággal és tisztasággal előállíthatóak, illetve amelyek felezési ideje rövid, mert ezáltal a vizsgált személy sugárterhelése alacsony szinten tartható kiemelkedően jó jel-zaj arány mellett. A rövid felezési idő azonban hátrányokkal is jár. Csak olyan jelzőmolekulák izotópos jelölése jöhet szóba, amelyek esetében gyors reakció során – rövid radiokémiai szintézis alatt – be lehet építeni az izotópot a jelzőmolekulába. Általános szabályként alkalmazható, hogy a szintézis, a végtermék tisztítása és ellenőrzési ideje együttesen nem lehet hosszabb az izotóp háromszoros felezési idejénél annak érdekében, hogy a vizsgálatok elvégzéséhez elegendő izotóp álljon rendelkezésre. Némely izotóp – ^{11}C vagy ^{15}O – közvetlenül is felhasználható jelzőanyagként, például inhalációval (VIII.52. ábra és VIII.5. táblázat).

A PET-ben felhasznált izotópokat általában ciklotron segítségével állítják elő. A céltárgyakat nagy energiájú protonokkal vagy deuteronnal bombázzák, aminek hatására a VIII.3. és a VIII.4. táblázatban ismertetett magreakciók során pozitronemittáló izotópok keletkeznek.



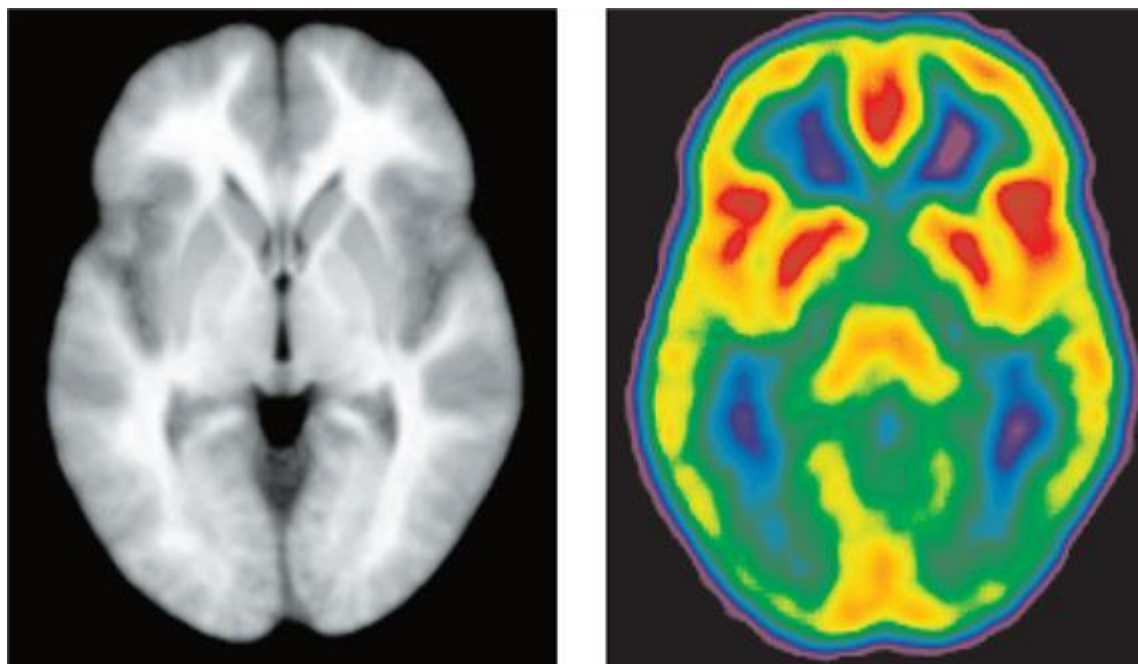
VIII.52. ábra. ^{11}C -METIONIN és ^{18}F -FDG radiofarmakonokkal készített PET-átlagkép. (DEOEC PET Centrum felvétele, prof. Trón Lajos hozzájárulásával)

8.5. táblázat - VIII.5. táblázat. Néhány PET-vizsgálatokra használt jelzőmolekula és klinikai jelentősége

Izotóp	Jelzőmolekula	Mit mutat ki	Klinikai jelentősége
^{18}F	deoxiglükóz	glükózyanyagcsere	anyagcsere-változás, tumorok
^{18}F	^{18}F -ion	csontanyagcsere	csontrendszeri elváltozások
^{11}C	aminosavak	aminosav-anyagcsere	anyagcsere-változás, tumorok
^{11}C	Raclopride	dopamin (D_2 -) receptor	Parkinson típusú betegségek
^{15}O	^{15}O -jelzett gázok	oxigén-anyagcsere	oxigén-anyagcsere mérése

^{15}O	butanol	vérátáramlás, vértérfogat	oxigén-anyagcsere mérése
^{15}O	víz	vérátáramlás, vértérfogat	pl. stroke által érintett terület vizsgálata
^{13}N	ammónia	vérátáramlás	a szívizom életképességének mérése

A PET legfontosabb tulajdonsága egyéb, metszetképkalkító eljárásokkal szemben az, hogy az élő szervezetek működéséről, anyagcsere-folyamatairól ad információt. Bár a felbontása nem túl jó – transzaxiális síkban 5 mm, tengelyirányban 6 mm –, azonban ez a hátrány az ún. képfúziós eljárásokkal kiküszöbölhető. Képfúzióról akkor beszélünk, amikor ugyanaz a beteg MR- vagy CT-felvételét megfelelő számítógépes program segítségével a PET-felvételre szuperponálják. Ekkor az előző két eljárással készített nagy felbontású képeken látható anatómiai struktúrák jól azonosíthatók, ugyanakkor funkcionális állapotokról is információt kapunk (VIII.53. ábra).



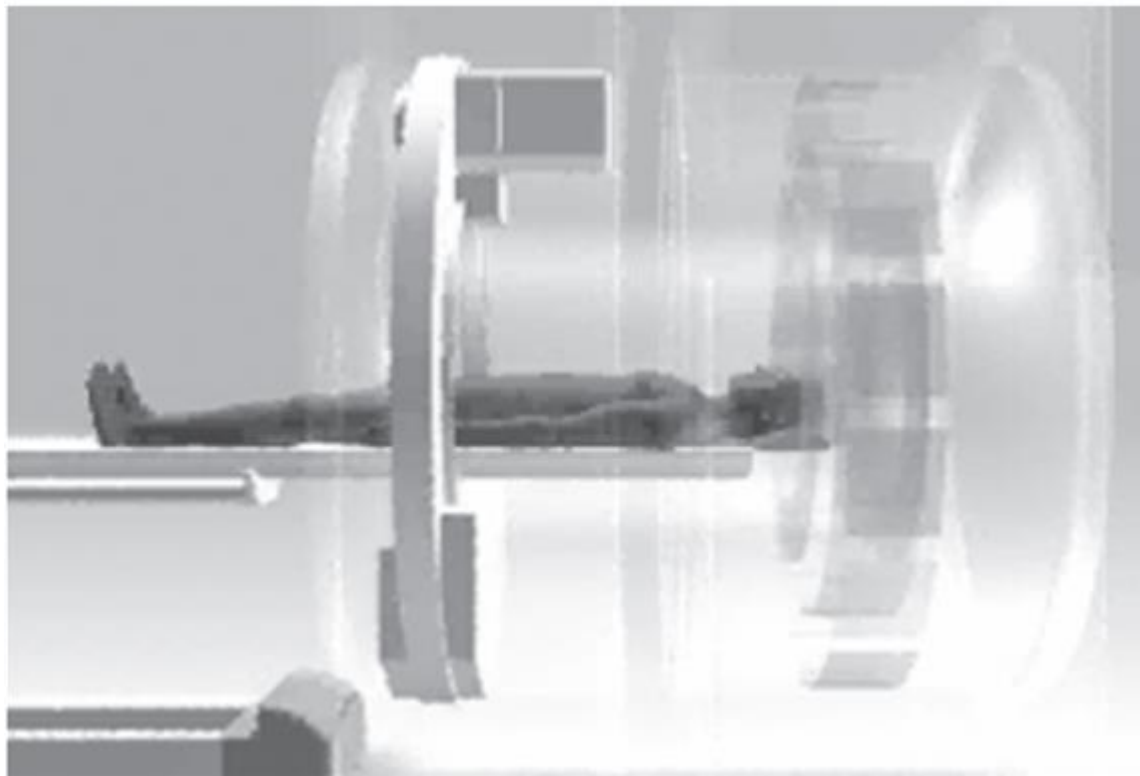
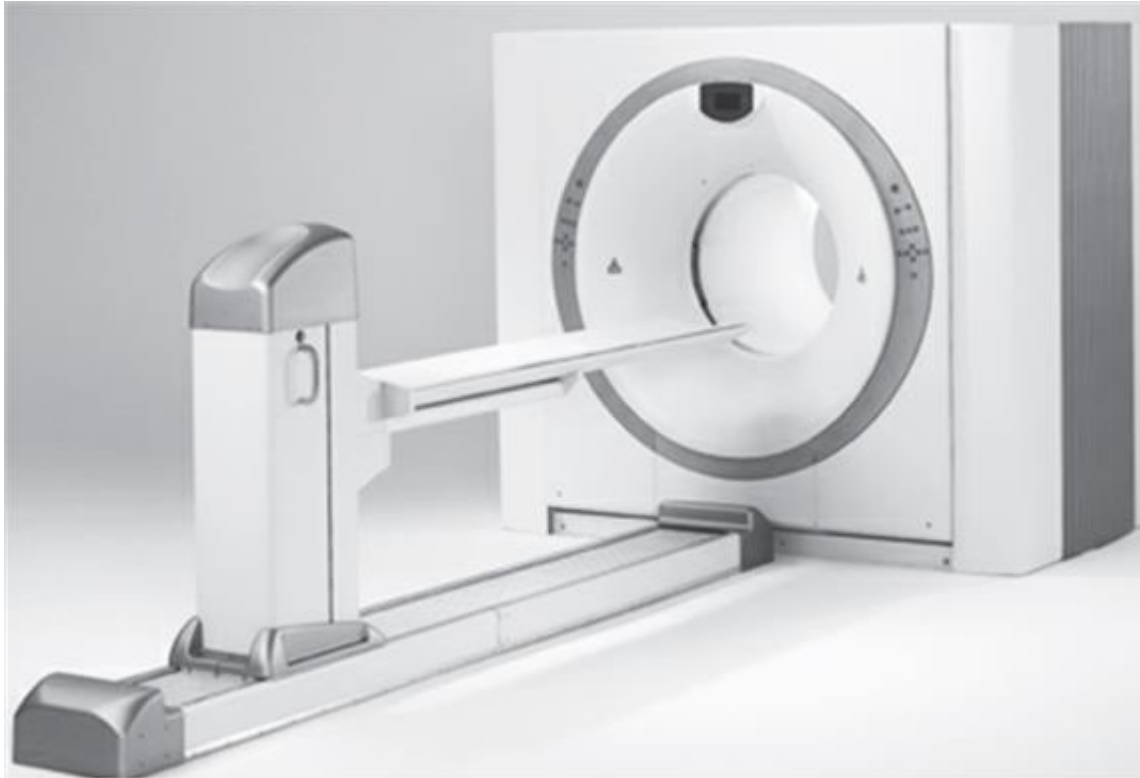
VIII.53. ábra. T₁-súlyozott MRI-átlagkép és ^{15}O -BUTANOL radiofarmakonnal készített PET-átlagkép. (DEOEC PET Centrum felvétele, prof. Trón Lajos hozzájárulásával)

A PET további nagy előnye más képkalkító eljárásokkal szemben, hogy a vizsgálati eredmény abszolút egységekben skálázható annak révén, hogy minden vetületi képhez meg lehet határozni az ún. gyengítési korrekciós faktorokat. Ez a faktor adja meg tulajdonképpen, hogy a szövetek abszorpciója milyen mértékben gyengíti a pozitron-elektron annihilációból származó gamma-sugárzást, vagyis a mérhető koincidenenciák számát. E korrekciós faktorok meghatározásának jól bevált módja, hogy egy külső sugárforrás segítségével transzmissziós képeket készítenek. Az itt alkalmazott sugárforrás, a ^{68}Ge izotóp előnye, hogy szintén pozitronbomló, a pozitron annihilációjakor tehát 511 keV energiájú, egymással ellentétes irányú két foton keletkezik, ugyanakkor hosszan használható, hiszen felezési ideje közel két év.

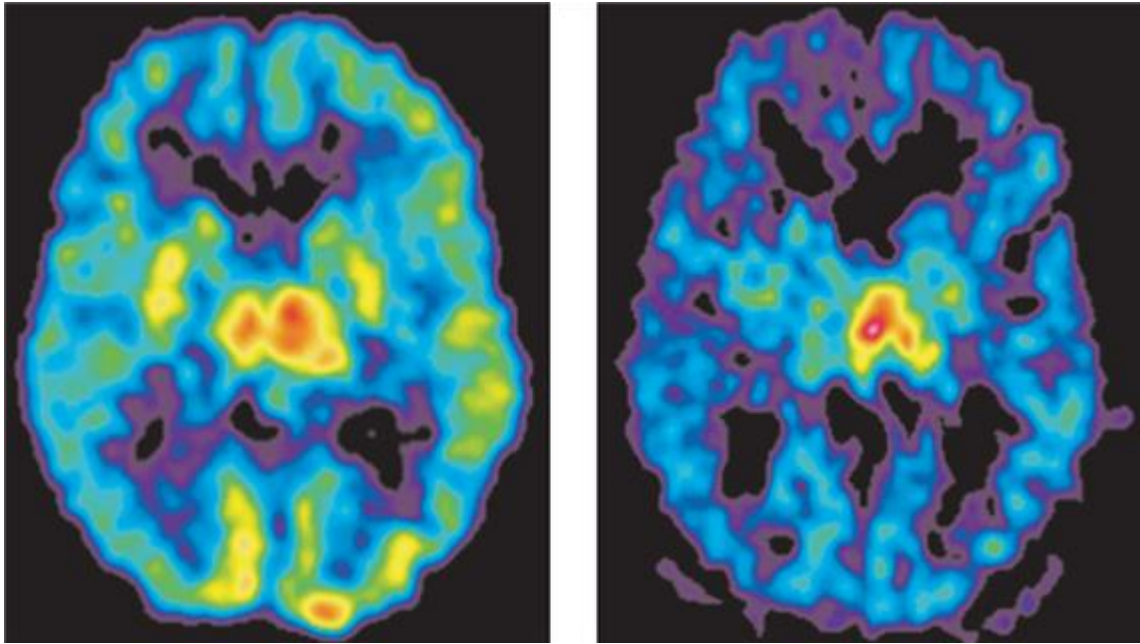
A PET-vizsgálat során a vizsgált személyt érő sugárterhelés (2–10 mSv) nem nagyobb a CT- (1,8 agyi CT vagy 9,9 mSv hasi CT) vagy a SPECT- (6-7 mSv) vizsgálatok során a szervezetet érő terhelésnél. (Tájékoztató: a lakosságot érő, természeti forrásokból származó évi biológiai dózisekvivalens 1-2 mSv). A VIII.54. ábrán PET-berendezések, a VIII.55. ábrán PET-felvételek láthatók.

Ahogy azt az előzőekben ismertettük, a PET olyan képkalkító eljárás, amelylyel a szervezetbe juttatott pozitron emittáló izotóppal jelölt jelzőmolekula eloszlását lehet vizsgálni, és ezáltal a vizsgált terület anyagcsere-intenzitására, vagyis normál vagy kóros működésére lehet következtetni. Az eljárás felbontása azonban nem túl jó. A viszonylag gyenge PET-felbontáson, ahogyan azt szintén ismertettük képfúziós eljárásokkal lehet segíteni. Ezen eljárásokat azonban megnehezítette, hogy a felvételek különböző készülékeken, különböző pozíciókban és

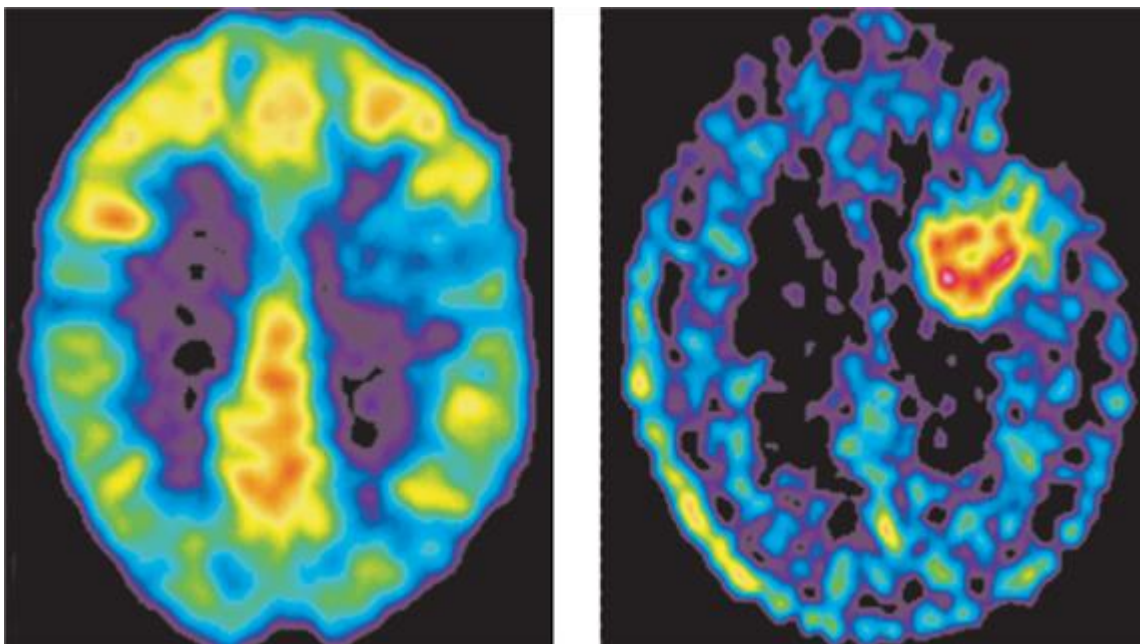
időpontokban történtek, így a képfúziót lehetővé tevő speciális normálási eljárásokat kellett alkalmazni. Az újonnan kifejlesztett PET-CT készülékeken az anatómiai struktúrákról kiváló felbontású CT-képeket a PET-felvétellel egy időben lehet elvégezni, így a képfúzió azonnal és egyszerűen elvégezhető.



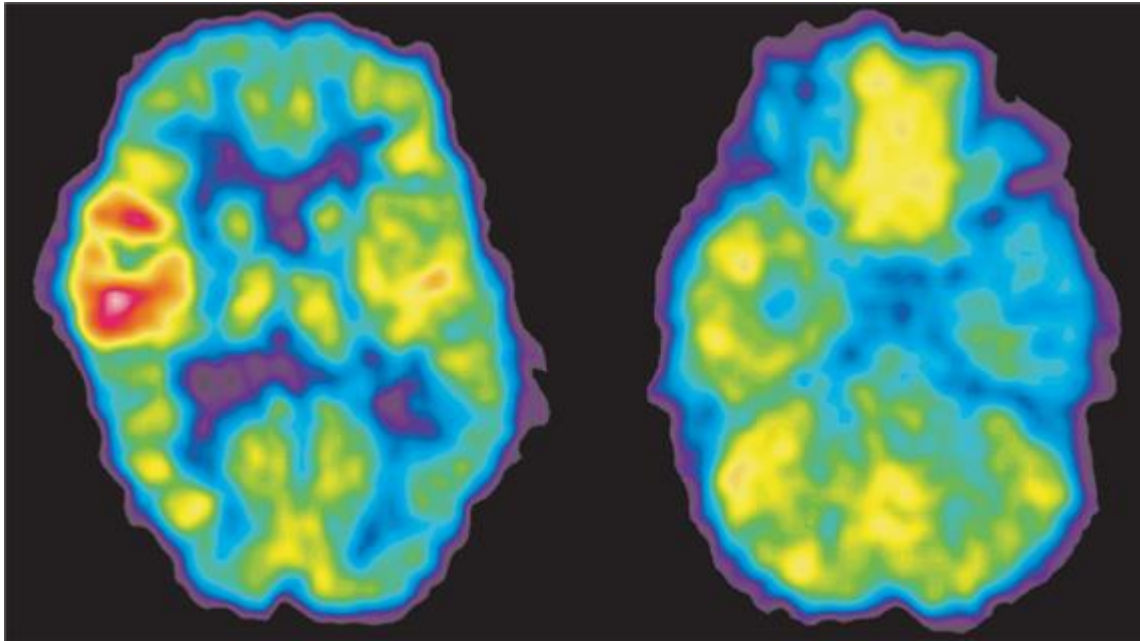
VIII.54. ábra. Biograph PET-CT berendezés (CTI Inc.)



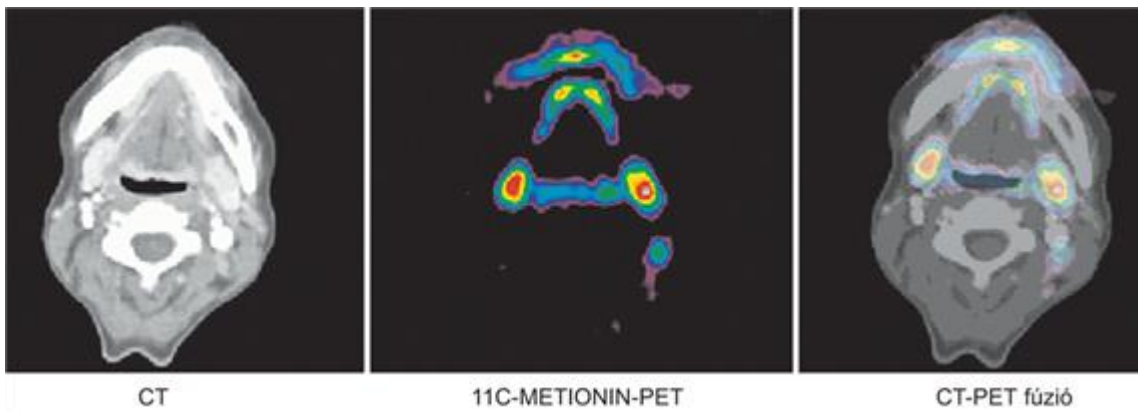
VIII.55. ábra a. PET-felvételek. Magas grádusú agytumor. ^{18}F -FDG és ^{11}C -METIONIN radiofarmakonokkal készített PET-felvétel. (DEOEC PET Centrum felvétele, prof. Trón Lajos hozzájárulásával)



VIII.55. ábra b. Alacsony grádusú agytumor. ^{18}F -FDG és ^{11}C -METIONIN radiofarmakonokkal készített PET-felvétel. (DEOEC PET Centrum felvétele, prof. Trón Lajos hozzájárulásával)



VIII.55. ábra c. Epilepsziás roham alatt (balra) és rohammentes időszakban (jobbra) emberi agyról készített ^{18}F -FDG-PET felvétel (DEOEC PET Centrum felvétele, prof. Trón Lajos hozzájárulásával)



VIII.55. ábra d. Primertumor-keresés (DEOEC PET Centrum felvétele, prof. Trón Lajos hozzájárulásával). Metasztatikus nyirokcsomó a nyak jobb oldalán

9. fejezet - IX. rész – Terápiás módszerek fizikai alapjai

A fizikai tudományok ismeretanyagát, eredményeit az élet minden területén alkalmazzák. Az utóbbi évtizedekben azonban az orvostudományok (diagnosztika és terápia) területén rohamosan bővült a fizika eredményeinek felhasználási köre, illetve a fizikai kutatások egyre nagyobb százaléka vette és veszi célba az orvosi alkalmazások területét. Egyre nyilvánvalóbb, hogy számos új terápiás lehetőség fog már a közeljövőben megjelenni az igen komoly fizikai háttérre épülő új kutatási területek, a biotechnológia, nano-biotechnológia eredményeinek következményeként. Ebben a fejezetben ezek a legújabb területek még nem szerepelnek. Igyekszünk azonban mindazokat a területeket felsorolni, amelyek döntően fizikai jelenségeken alapulnak, és amelyeket jelenleg rutinszerűen alkalmaznak terápiás céllal.

1. IX/1. Lézerek terápiás alkalmazása

A lézerek terápiás alkalmazásának alapját a lézerek több tulajdonsága adja. A lézerfény **monokromatikus**, azaz csak nagyon keskeny sugárzási hullámhossztartománnyal rendelkezik. Ennek előnye, hogy könnyen lehet olyan hullámhosszat választani, ami a megcélzott szövetben jó hatásfokkal elnyelődik, viszont a környező szövetek áteresztik. Így az alkalmazott fény nagy arányban jut el a kezelendő szövetig és abban fejt ki hatását.

A lézerfény **jól fókuszálható**, tehát kis területen nagy teljesítménysűrűség érhető el, ami lokálisan igen jelentős hőfejlődést okozhat. Ez használható fel vágásra, illetve szövetek elpárologatására. Ilyenkor a lézerek impulzusüzeműben történő használata azért előnyös, mert a rövid impulzusidő, illetve az ehhez képest hosszú várakozási idő miatt a környező szövetek jelentősebb felmelegedése elkerülhető.

1.1. IX/1.1. A lézersugárzás kölcsönhatása szövetekkel

A szövetekbe érkező fotonok azon áthaladhatnak, vagy az anyaggal való kölcsönhatásuk során szóródhatnak (II/2.3. alfejezet), illetve elnyelődhetnek. Az elnyelt fotonok által kiváltható hatásokat a lézerterápia szemszögéből a IX.1. ábra csoportosítja.

Az abszorpciót követően az abszorbeáló anyag gerjesztett állapotba kerül, ezt **relaxáció** követi, miközben hő fejlődhet. A céltér fogatban elért hőmérséklet függvényében különféle hatásokat válthatunk ki.

Az enyhe, kb. 40 °C-ra történő melegítést **lézertermiának** nevezzük. Ezen a hőmérsékleten rövid távon szöveti károsodás nem lép fel, a diffúzió és az anyagcsere gyorsulása, permeabilitásnövekedés tapasztalható. Ezt összefoglaló néven biostimulációnak nevezik, és általában sérülések gyógyulásának meggyorsítására szokták használni. Jó eredményeket értek el lábszárfekélyek és más nyílt sebek, izomrándulások és zúzódások, ín- és idegsérülések gyógykezelésében, valamint a vázizomrendszer krónikus fájdalmainak csillapításában. A háttérben álló mechanizmusokat nem ismerjük pontosan, de a mitokondriális aktivitás és ATP-szintézis fokozódása feltehetően fontos szerepet játszik.



IX.1. ábra. Az elnyelt lézersugárzás kölcsönhatásai szövetekkel

Ha a térfogatelem 60-90 °C közötti hőmérsékletre melegszik, a fehérjék kicsapódnak, **koaguláció** jön létre. Ez az érintett sejtek pusztulásával jár. Ha a koagulátum kapillárisokat vagy nagyobb ereket is érint, az adott területen megszűnik a keringés, ami vérzéscsillapításra vagy túlburjánzott erek kóros hatásainak visszaszorítására szolgálhat. A koagulált területen a későbbiekben hegyszövet képződik.

A 100 °C fölé történő melegítés a szövetben található víz forrását, és ezáltal rövid idő alatt térfogatának sokszorosára történő növekedését okozza. Az érintett térfogatelem mintegy szétrobban a hirtelen tágulás hatására. Ezt **vaporizációnak** vagy elgőzölögtetésnek nevezzük. Alkalmos körülírt szövethiány, metszés létrehozására, azonban daganatok megsemmisítésére nem a legjobb módszer, tekintve hogy biomolekulák (pl. DNS) nemkívánatos szétszóródásával járhat együtt. A nagyon gyors vaporizáció alkalmas ún. fototermális hatás létrehozására is (bővebben lásd a lézeres közúzásnál).

300 °C felett a szövetek elszéneseznek, ezt a jelenséget **karbonizációnak** hívjuk. A vágásnak, ill. nem kívánt szövetek eltávolításának ez az egyik leggyakrabban használt módja. Alkalmazható vérbő szervek esetén is, mivel a karbonizált terület körül – a behatás időtartamától függő nagyságú – koagulált udvar keletkezik, amely megakadályozza a vérzést.

A korábban már említett **relaxációt** követő másik lehetőség – amennyiben fluorofór gerjesztődött – a fénykibocsátás, többnyire **fluoreszcencia**. A lézer által gerjesztett fluorofór lehet endogén, a szervezetben termelődött molekula (pl. porfirinek) vagy kívülről, pl. vénás injekcióban bejuttatott anyag, mely bizonyos szervekben, vagy daganatszövetekben szelektíven felhalmozódik. A jelenség felhasználható az ún. **fotodinamikus diagnosztikában**. A gerjesztett molekula **fotokémiai reakcióba** is léphet, melynek során szabad gyökök keletkeznek, és a fluorofór többnyire átalakul. A keletkező szabad gyökök sejtkárosító hatását használja ki a **fotodinamikus terápia** (IX/2.2. fejezet).

Amennyiben a foton elegendő energiát hordoz kovalens kötések felszakításához, mint pl. az UV-tartományban sugárzó excimer lézerek esetén, megfigyelhetjük a **fotodisszociáció** jelenségét. Ez eredményét tekintve **atomizáció**, vagyis a térfogatelem igen rövid idő alatt atomjaira történő bontása. Az atomizáció során igen pontosan körülhatárolt szövethiány keletkezik, a jelenleg rendelkezésre álló legpontosabb lézeres vágóeszközök ezen a hatáson alapulnak. Mivel az UV-fotonok elnyelődése mindenféle szövetben nagyfokú, ez a sugárzás kizárólag felszíni, ill. felszínhez közeli kezelésre alkalmas. Megfontolást igényel továbbá, hogy az UV sugárzás által a környező, nem atomizált sejtek DNS-ében okozott törések és következményes mutációk elemzése a mai napig nem történt meg kielégítő mélységben.

Az adott hullámhosszúságú fény számára optikailag átlátszó, alacsony abszorbanciájú anyagokban számottevő elnyelés nem következik be. Ezért például a vörös vagy közeli infravörös tartományba eső fotonok a legtöbb

emberi szövetbe viszonylag mélyen képesek behatolni. Ha azonban a fotonűrűség elér egy kritikus értéket (~ 1 TW/cm²), ami igen rövid impulzushosszúsággal, nagy impulzusenergiával és a lézernyaláb igen kis átmérőre való fókuszálásával a fókuszpont femtoliteres (10⁻¹⁵ liter) nagyságú környezetében elérhető, ún. nem lineáris hatások, multifoton- és kaszkádionizáció lépnek fel. Ha az **ionizáció** során létrejött szabad elektronok sűrűsége eléri a 10¹⁸/cm³-t, plazmáról beszélünk. A keletkezett plazma igen gyorsan tágul, s ennek során GPa nagyságrendbe eső amplitúdójú **mechanikai lökéshullámot** (shock wave) hoz létre. A centrumtól nagy sebességgel távolodó részecskék kavitációt hoznak létre, mely ciklikusan táguló és összeeső buborékot eredményez. A folyamat végén mikroszkopikus gázbuborék marad a céltér fogat helyén, mely néhány tíz perc alatt felszívódik. Az ionizációs hatás felhasználható mélyebben a felszín alatt elhelyezkedő, igen pontosan körülhatárolt kicsiny térfogatokban szövethiány létrehozására, az általa keltett lökéshullám és kavitáció pedig keményebb szövetek, ill. kövek roncsolására.

1.2. IX/1.2. Lézerek sebészeti alkalmazásai

Az egyes lézertípusok szöveti hatásuktól függően nyernek terápiás alkalmazást. Tekintve hogy a hatás – a lézertermiától eltekintve – valamilyen fajta szövetroncsolással, ill. szövethiány létrehozásával jár, általában lézersebészetről szoktunk beszélni. Az alábbiakban az egyes lézerhatásokra adunk alkalmazási példákat, a teljesség igénye nélkül.

1.2.1. IX/1.2.1. Koaguláció

A tisztán koaguláción alapuló beavatkozás általában akkor célszerű, ha a megcélzott szövetet nem szabad, vagy nem lehet véglegesen eltávolítani, hanem helyette hegyszövetet szeretnénk kialakítani. A bőr lilásvörös foltot okozó ún. hemangiomáit, melyet kapillárisok túlburjánzása okoz, eltüntethetjük a kapillárisgomoly több ponton történő koagulálásával, mely ott a keringést megszünteti, és így a vörös színt is eltünteti. Ha kellően rövid impulzusokat alkalmazunk, igen kis térfogatokban hozunk csak létre hegeseést, ami hosszú távon nem vezet a bőr elcsúfításához. A régebben hasonló elven, de folyamatos besugárással végzett kezelés következménye szinte mindig kiterjedt, torzító hegeseés lett.

A koagulációs hatás alkalmazható **önmagában vérzéscsillapításra**, pl. máj vagy más – műtét közben bő vérzést okozó – ún. parenchimas szerv hagyományos műtétjénél (máj beamer), valamint vágó (vaporizáló vagy karbonizáló) **lézerszike hasznos mellékhatásaként** a vágás mentén megnyíló kisebb erek elzárására. Endoszkóppal, száloptika segítségével történő bevezetést követően vérző gyomorfekély kezelésére is használható. Speciális esetét képezi a koagulációnak az ún. intersticiális lézer-fotokoaguláció (ILPC), melynek során száloptikával parenchimas szervekbe, pl. máj daganataiba közvetlenül vezetik be a lézerfényt, és a száloptikából kilépő fotonok hoznak létre melegítő hatást.

A **szem** mint több alkotóelemében transzparens szerv számos lézersebészeti beavatkozás célpontja. Közülük több szintén koaguláción alapszik. A **cukorbetegség** során kialakuló **szemfenéki érburjánzás** vérzésekhöz, retinaleváláshoz, opálos membránok képződéséhez vezet, melynek megelőzésére célszerű a burjánzó ereket és a köztük lévő, érburjánzást serkentő faktorokat termelő oxigénhiányos (hipoxiás) szöveteket koagulálni. Ennek során néhány száz mikron (esetenként nagyobb) átmérőjű foltot „égetnek” a retinába. A koagulációs technika alkalmazható **retinaleválás** esetén is: a létrejött hegek megakadályozzák a további leválást, ill. az egyéb módszerekkel helyére fektetett retinát rögzíteni képesek. A **zöldhályog** (vagy glaukoma, ami legtöbbször magas szemnyomással járó megbetegedés) kezelésében is alkalmaznak fotokoagulációt. A csarnokzugban található trabekuláris hálózat néhány ponton történő koagulálása hosszabb távon a csarnokvíz elvezetését segíti elő, amely a szemnyomás csökkenéséhez vezet.

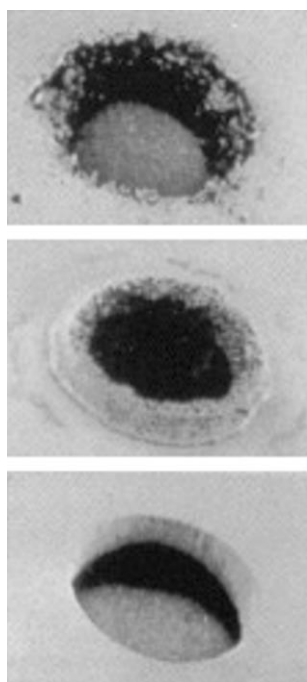
A koagulációhoz leginkább a spektrum zöld tartományában emittáló argon- vagy argon-kripton lézert használnak, mivel ezek fotonjai a vörösvértestek hemoglobinjában, ill. a retina hámrétegében (pigmentepitheljében) jól elnyelődnek. A retina fotoreceptorsejtjeit azonban károsíthatja az ott szintén elnyelődő nagy intenzitású zöld fény, így ennek elkerülésére a retinális fotokoagulációt újabban 800 nm-en emittáló diódalézerrel végzik.

1.2.2. IX/1.2.2. Vaporizáció, karbonizáció

A lézersugárást kis nyalábátmérője és igen nagy teljesítménysűrűsége ideális sebészkéssé, „szikévé” teszi. A majdnem párhuzamos nyaláb fókuszálásával a besugárázott felület akár mikrométeres átmérőig csökkenthető, ami által a teljesítménysűrűség tovább növekszik. Ma már számos műtét során, legyen az egyszerűbb beavatkozás vagy bonyolult, belső szerveket, vérbő szöveteket érintő, feltárást igénylő vagy testüregekben (száj, gége, végbél, fül) végzett beavatkozás, felhasználják a lézerek metsző, vágó (excíziós) hatását, mely

vaporizáción vagy karbonizáción alapszik (lásd IX.2. ábra). Erre a célra legelterjedtebbek a CO₂- és a Neodímium:YAG (Nd:YAG) lézerek (lásd II/2.2.8. fejezet). Ezek a távoli, ill. közeli infravörösben emittálnak, behatolási mélységük 0,03 és 4 mm között van (lásd a IX.1. táblázatot).

A belső szervi, hasüregi, gége- stb. műtéteknél fontos tényező a lézernyaláb bevezetése a célterületre és pontos célzása a műtéti objektumra. Ehhez ma már igen fejlett technikai eszközök állnak rendelkezésre, mint a merev csöves tükrös és a hajlékony, fényvezető optikai szállal ellátott komplex endoszkópok (VIII/2.1. fejezet), amelyekkel a lézersugarat el lehet juttatni a kívánt területre. Esetenként, mikor a lézernyaláb szemmel nem látható (például CO₂-és Nd:YAG lézerek), „vezető” lézerfényt is használnak a célzáshoz (például He-Ne lézerek vörös fényét), amelyet a műtétet végző infravörös lézerfényvel azonos optikai úton képeznek le. Nagyon fontos feladat a fókuszált, nagy teljesítménysűrűségű nyaláb pontos beállítása. Ezt ma már leginkább számítógéppel vezérelhető mikromanipulátorok végzik a bevezetőtükr, vagy az endoszkópféj igen precíz mozgatásával, amelyet a megfigyelő orvos irányít mikroszkóppal vagy videokamerával való követés révén, a vezető lézernyaláb becsapódási helye alapján.



IX.2. ábra. A lézerek „vágó”-hatásának bemutatása a) Vaporizáció, b) karbonizáció, c) atomizáció

A sebészeti lézerek leglényegesebb előnyei a következőkben foglalhatók össze: optikával és mikromanipulátorokkal a lézerszike igen nagy pontossággal irányítható, és minden pillanatban kontrollálható. A kis területre fókuszált lézernyalábbal szinte sejtszintű célzás és roncsolás valósítható meg a környező sejtek károsítása nélkül. Ez egyben igen éles sebszéleket eredményez, ami könnyű, gyors és esztétikailag is elfogadható, fájdalommentes hegesevé, sebgyógyulást eredményez. A műtét lényegesen kevesebb vérzéssel jár, mivel a sebészeti lézerek infravörös fénye a vágási él környezetébe beszűrődve, a melegítő hatása alapján, koagulálja a vérereket. Így a vágással egyidejűleg érelzárás és vérzéscsillapítás is történik. A műtéti szövődmények (például vizenyő, felülfertőződés) veszélye is jóval kisebb, mivel a lézernyaláb lokális hőhatása egyben sterilizáló hatású is, és az éles metszés miatt jóval kisebb a szöveti roncsolódás, amely vizenyőt és gyulladást okozó aktív vegyületek felszabadulását eredményezi. A karbonizáció tumorműtéteknél azért is előnyös, mert a daganatsejtek esetleges szétszóródását a céltér fogat megsemmisítése és környezetének koaguláció általi lezárása megátalja. Mindezen – elsősorban szakmai – előnyök mellett a hátrányokról is érdemes szót ejteni. Ezek leginkább a technikai nehézségekkel és az ezzel összefüggő költségekkel kapcsolatosak: az endoszkópkarok, száloptikák viszonylag nehezen sterilizálhatók; a mélyebben fekvő objektumok esetén bevezetési nehézségek adódhatnak; minden egyes műtét gondos lézerfizikai és biztonsági tervezést igényel; általában mind a berendezések, mind fenntartásuk meglehetősen költséges.

A klasszikusan sebészi jellegű beavatkozások mellett a lézeres vaporizáció egyéb területeken is felhasználásra kerül. Az emésztő- és kiválasztórendszerek gyakori betegsége a köképződés. Mind a vese-, mind az epekövek minimálisan invazív eltávolítására alkalmas a lökeshullámon alapuló közúzás. Az endoszkóppal száloptikán át bevezetett és másik száloptikán át megfigyelt és kontrollált lézerimpulzusokat a köre irányítva azok apró

lépésekben rombolják szét a követ. Az újabban alkalmazott holmium:YAG (Ho:YAG) lézerek impulzusai a kövekben, és a köveket körülvevő vízmolekulákban is jól abszorbeálódnak, így hatásuk a kő színétől független. Emiatt igen gyors vaporizációt hoznak létre. Ennek eredménye az ún. fototermális hatás: a gyors vaporizáció során az elpárolgó vízmolekulák kavitációs buborékot alkotnak, mely aszimmetrikusan tágul, majd összeesik, s közben lökéshullámot hoz létre, valamint a sugár mentén egy magas hőmérsékletű gőzcíkot is, mely a lézere energiát hatékonyan vezeti a céltárgy (kő) felületére. A követ így a lökéshullámon kívül a fokozott hőhatás és a benne lévő víz gyors párolgásának feszítőereje is rombolja.

Újabban a porckorongsérv kezelésében is teret kaptak a lézerek. Az ún. perkután (bőrön keresztüli) lézerdiskusz-dekompresszió során az impulzus üzemmódú Nd:YAG, dióda, vagy Ho:YAG lézer fényét a csigolyák közé szúrt vastag injekciós tűn keresztül, száloptikával vezetik be a porckorong puha magjába, ahol a fényimpulzusok kis térfogatban gyors vaporizációt hoznak létre. A nagy energiájú molekulák gyorsan szétdiffundálnak, és a helyükön szövethiány, valamint gyenge vákuum keletkezik, melynek hatására a porckorong kidomborodó része visszahúzódik.

9.1. táblázat - IX.1. táblázat. A CO₂ és a Nd:YAG (Neodímmal szennyezett Yttrium-Alumínium-Gránát) lézerek összehasonlítása

	CO ₂	Nd:YAG
λ (μm)	10,6	1,064
P_{\max} (W)	200	$5 \cdot 10^7$ *
üzemmód	folytonos	impulzus
μ_{izom} (cm ⁻¹)	800	5,7
90%-os elnyelés izomban (μm)	30	4000

* Egy impulzus időtartamára!

1.2.3. IX/1.2.3. Atomizáció

Speciális területet képez a lézerek refraktív sebészetben – tehát a szem törôerejének megváltoztatására irányuló beavatkozások során – történô felhasználása. Ismeretes, hogy a szem törôerejének mintegy 2/3-át a szaruhártya adja (IV/2.2.1. fejezet). Rövidlátás (myopia) esetén a szem törôereje a szükségesnél nagyobb, s ezen a konkáv szemüveglencse alkalmazásán kívül úgy is lehet segíteni, hogy a szaruhártya domborúságát a középsô rész elvékonyításával csökkentjük. Távollátás (hypermetropia) esetén viszont növelni kell a törôerôt, amit a szaruhártya átfarmálásával akkor érhetünk el, ha annak középsô része körül egy kifelé mélyülô árkot képzünk, ezáltal fokozva a középsô rész domborulatát. Természetesen ennél bonyolultabb domborulatváltoztatások is tervezhetôk és kivitelezhetôk a szaruhártya törési hibáinak kijavítására, pl. az asztigmatizmus (VI/2.1. fejezet) is elég tág határok között korrigálható.

A szaruhártya átfarmálására kezdetben CO₂-, majd Nd:YAG lézereket alkalmaztak, melyek energiától függôen vaporizáció vagy karbonizáció útján hozták létre a kívánt mértékû szövethiányt a szaruhártya felsô rétegében, ahol elnyelôdtek. Az excimer lézerek fejlôdésével azonban lehetôség nyílt sokkal élesebb határvonalú, pontosabban körülírt szövethiány létrehozására atomizáció, vagyis a lézer UV-fotonjai által végbevitt fotodisszociáció útján (lásd IX.2. ábra). Fejlôdési stádiumai, ill. megközelítésmódja alapján jelenleg három módszert használnak (lásd keretes rész *A szaruhártya lézeres átfarmálása*).

Az excimer lézerek UV-emissziójának száloptikai továbbítása – különösen nagy energiájú impulzusok esetén – komoly technikai kihívás. A monomodulus száloptikák fejlôdése ma már lehetôvé teszi, hogy 1 mm-nél kisebb átmérôjû üvegszálon 1 MW-os impulzusokat is kis veszteséggel továbbítsanak. Ennek segítségével atomizálhatóvá válnak a ballontágításnak ellenálló vagy arra alkalmatlan vékonyágú erekben elhelyezkedô ateroszklerotikus plakkok. Ez a ún. lézeringioplastika mind a szív koszorúerek elzáródásainak kezelésében, mind más szervek arterioszklerózisának gyógyításában kezd bekerülni az orvosi gyakorlatba.

A szaruhártya lézeres átformálása

A szem szerkezetét egy almához hasonlítva a lenti ábrarozat demonstrálja ezeket: az alma héja analóg a szaruhártya felszíni hámjával, alatta az alma húsa az ún. stromával. A fotorefraktív keratektomia (PRK) során lekaparjuk az alma héját, vagyis a hámsejteket, és a megtisztított felszínen végezzük a kezelést. Ezt követően megvárjuk, míg a hámsejtek 2-3 nap alatt visszanoznak. Előnye, hogy teljesen biztonságos. Hátránya, hogy a hámsejtek visszanovéséig hiányzik az alma héja, ami átmeneti panaszokat, fényérzékenységet, idegentest-érzést okoz. A laser assisted in situ keratomileusis (LASIK) során ezt úgy próbálják kiküszöbölni, hogy levágnak egy vékony, felszínnel párhuzamos nyeles lebenyt a szaruhártyáról, félrehajtják a felvágott részt és a vágott felszínen végezzük a kezelést. Ezután visszahajtják a felvágott részt. Előnye, hogy átmeneti panaszokkal sem jár. Hátránya, hogy mivel a felvágott rész soha nem nő vissza teljesen, autóbaleset vagy sportsérülés kapcsán leszakadhat. Emellett a végeredményként kialakuló felszíni görbület is kevésbé pontosan jósolható meg, mint PRK esetén. A két módszer előnyeit kívánja egyesíteni a laser epithelial keratomileusis (LASEK). Az alma hasonlatnál maradván a héjból, vagyis a szaruhártya hámjából képeznek egy védőlebenyt. Ezt a lebenyt hajtják félre, elvégzik a kezelést, majd visszahajtják a hámlebenyt. Ezzel a módszerrel jelentősen csökkennek a kellemetlenségek, ugyanakkor nincs szükség a veszélyeket rejtő vágásra sem. A lebeny készítése (alkoholos fellazítás) kapcsán keletkező mellékhatásokról viszont jelenleg alig rendelkezünk tapasztalattal.



1.2.4. IX/1.2.4. Ionizáció

Szürkehályog-, (katarakta-) műtétet követően, ha a szemlencse epitheljének egy része megmarad a hátsó lencsetokon, másodlagos hályog képződhet. Ilyenkor a beültetett műlencse mögé, a tokra fókuszálva egy impulzusüzemű Nd:YAG lézer segítségével lökéshullámot generálnak számos, körben elhelyezkedő kis foltban a beültetett lencse kerületének megfelelően. Ily módon lyukat vágnak a hátsó tokon, s a fény útja ismét szabad lesz a retina felé.

A látható tartományban emittáló lézerek, pl. a régebben alkalmazott impulzus festéklézerek fénye az arra alkalmas abszorpciójú vese- és epekövekben elnyelődve ionizációt és lökéshullámot vált ki, mely kőzúzásra teszi alkalmassá. Az alacsonyabb fenntartási költségek miatt ma már inkább a Ho:YAG lézereket alkalmazzák erre a célra is.

Ionizációs lökéshullám keltésén alapszik még az Er:YAG lézer két felhasználása. Egyrészt sikeres próbálkozások történtek fájdalmas, artrózisos ízületek csontkinövésének ily módon történő eltávolítására; különösen a gerinc kis ízületeinél voltak eredményesek ezek a beavatkozások. Másrészt terjedőben van fájdalommentes fogfűrészhez való felhasználása is, mivel a lézerimpulzus nem kelt nagy amplitúdójú, az egész fogra kiterjedő mechanikai rezgéseket, melyek a hagyományos fűrészről a pulpakamrára ráterjedve a fogfűrész fájdalmassá teszik.

2. IX/2. A fény terápiás alkalmazása – fototerápia, fotokemoterápia

A természetes napsugárzást mint terápiás eszközt az emberiség évezredek óta használja különböző betegségek gyógyításában. A tudomány 20. századi fejlődése lehetővé tette a korábban alkalmazott eljárások mechanizmusának megértését, majd ezen ismeretek birtokában azok tökéletesítését és új terápiás eljárások tervezését. A fényt endogén kromofórokot megcélozva (fototerápia), vagy fotoaktív farmakonokkal kombinálva (fotokemoterápia) kezdték használni. Minthogy az ultraibolya és látható fény behatolási mélysége az ionizáló sugárzásokénál lényegesen kisebb, alkalmazásuk elsősorban a felületi bőrbetegségek kezelésében látszott célszerűnek. A fény terápiás hatása a biológiai hatások egy speciális körének tekinthető, így arra ugyanazok a

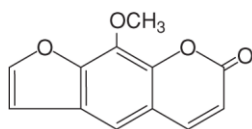
törvénytörések érvényesek, amiket a II/2.3.3. részben a fény biológiai hatásainak tárgyalásakor foglaltunk össze.

2.1. IX/2.1. PUVA terápia

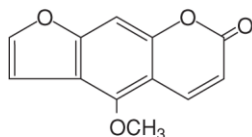
Az Atharva-Veda, az indiaiak i. e. 1400–2000 körül keletkezett szent könyve részletesen leír egy orvosi eljárást, mely alkalmas a vitiligo (pigmenthiányos bőrbetegség) gyógyítására. E szerint a *Psoralea coryfolia* nevű növény nedvével kezelt bőrfelület napozás után az egészséges bőrhöz hasonlóan pigmentálódik. A *Psoralea coryfolia* ma már tudjuk, hogy nagy mennyiségben tartalmaz pszoraléneket (IX.3. ábra). H. Kuske (1938) német kutató volt az első, aki kapcsolatot keresett a növényi nedvek fotoszenzibilizáló hatása és pszoraléntartalma között. Izolálta, és mint fotoaktív molekulát azonosította a bergaptént, vagyis az 5-metoxipszoralént (5-MOP), majd a 8-metoxipszoralént (8-MOP). A század 40-es 50-es éveiben intenzív kutatás indult a pszoralénszármazékok szerkezetének azonosítása, valamint a szerkezetük és fotoreaktivitásuk közötti kapcsolat felderítése céljából.

Egy fotofarmakon alapvető fotofizikai jellemzője az abszorpciós spektruma. A pszoralének széles abszorpciós sávja jellegzetes maximummal rendelkezik 300 nm körül (IX.4. ábra), és egy elhúzódnó vállal az UV-A tartományban. In vivo alkalmazásakor, a gerjesztő fény hullámhosszának megválasztásához a molekula abszorpciós tulajdonságai mellett annak lokalizációját a bőrben és a különböző hullámhossztartományok behatolási mélységét is figyelembe kell venni. Mindezek alapján a pszoralének fotoaktiválásában az UV-A tartomány bizonyult a leghatékonyabbnak.

Az első közlemény, amely pszoralének fotokemoterápiás alkalmazásáról számol be, 1974-ben jelent meg. Ebben a 8-MOP és az UV-A fény (320-400 nm) együttes felhasználásáról számoltak be a pikkelysömör (pszoriázis) kezelésében. Terápiás eljárásuk **PUVA-terápia** (Pszoralén + UVA) néven vált ismertté és terjedt el a klinikai gyakorlatban.

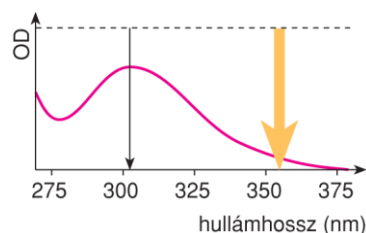


8-metoxipszoralén



5-metoxipszoralén

IX.3. ábra A PUVA terápiában használt pszoralének szerkezeti képlete



IX.4. ábra A pszoralének tipikus abszorpciós spektruma. A vékony fekete nyíl az elnyelési maximumot (~ 300 nm), a vastag sárga nyíl a besugárzáshoz használt hullámhossztartományt (~ 350 nm) jelzi

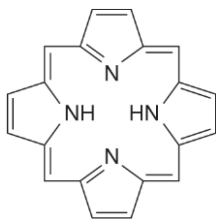
2.2. IX/2.2. Fotodinamikus terápia

A fotodinamikus terápia (PDT) daganatok destrukcióját célzó fotokemoterápiás eljárás. Alapját az a felismerés jelentette, hogy bizonyos festékekkel (pl. metilénkék, akridin stb.) jelzett sejtek látható fény hatására dezintegrálódnak. Ennek hátterében a festékmolekulák által kiváltott indirekt fotokémiai reakciók állnak

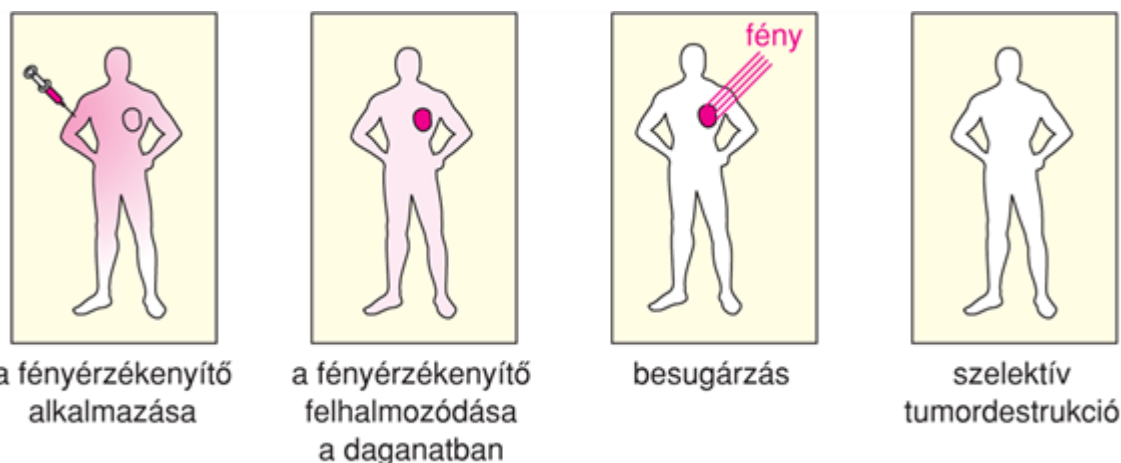
(II/2.3.3.). A gerjesztett festékmolekula közvetítésével keletkező reaktív gyökök a makromolekulák és foszfolipidek oxidatív sérüléseit okozhatják, ami aztán nekrotikus sejtpusztuláshoz vezet.

A PDT-ben használt festékek porfirinszármazékok (IX.5. ábra). A daganatterápia szempontjából előnyös tulajdonságuk, hogy a daganatos sejtekben szelektíven felhalmozódhatnak, illetve a daganatos sejtekből lassan ürülnek ki. Így a festék és a besugárzás lokalizációjával a sejtek szelektív nekrozisa érhető el. A fotodinamikus kezelés fő lépéseit a IX.6. ábrán foglaljuk össze.

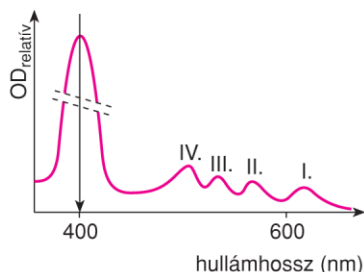
A porfirin származékok tipikus abszorpciós spektruma a IX.7. ábrán látható. A legnagyobb extinkciós állandóval a 400 nm körüli sávban rendelkeznek, de több sávból álló összetett spektrumuk a fény teljes látható tartományát lefedi. Annak ellenére, hogy elnyelésük vörös tartományban a legkisebb, a terápiás gyakorlatban vörös fényt használunk a porfirinek gerjesztésére, aminek oka ez esetben is a lehető legnagyobb behatolási mélység elérése. A monokromatikus fény alkalmazását indokolja továbbá, hogy így a száloptikával való továbbítás kisebb intenzitás-vesztéssel megoldható és a szükséges besugárzási dózis is pontosabban becsülhető. A monokromatikus és megfelelő intenzitású fény lézer fényforrással biztosítható, leggyakrabban festéklézert használnak erre a célra.



IX.5. ábra. A porfirinváz szerkezete



IX.6. ábra. A fotodinamikus terápia fő lépései



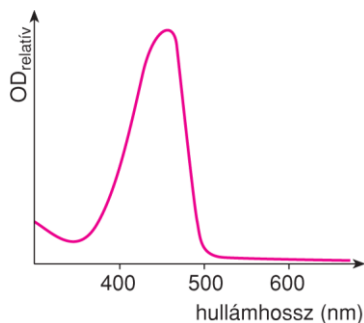
IX.7. ábra. A porfirinek tipikus abszorpciós spektruma

2.3. IX/2.3. Kékfény-terápia

Endogén kromofór fotokémiai reakciójára épül az újszülöttkori sárgaság kezelése, a kékfény-terápia.

Valamennyi újszülött nagy mennyiségű (a magzati gázcseréhez optimalizált) vörösvértesttel rendelkezik, amely rövidebb életidejű, mint a felnőtteké, könnyebben lebomlik. A vörösvértest lebomlási terméke az epefesték, a bilirubin. Az epefestéket a máj távolítja el a szervezetből, de az első életnapokban a májenzimek még nem aktiválódtak. Ezért a bilirubin felhalmozódik, ez festi sárgára a bőrt, a szemfehérjét.

Ha a sárgaság közepes fokot ér el, akkor kékfény terápiát alkalmazunk. (Ha a sárgaság mértéke alacsony fokú, akkor felesleges, ha pedig túl magas, akkor nem hatásos a kezelés.) A bilirubin kék tartományban abszorbeál (IX.8. ábra). Az abszorbeált fény hatására a molekulában cisz-transz izomerizáció történik, a bőrben átalakult molekula a máj munkája nélkül is kiürül a szervezetből. A fényterápia során a baba szemét letakarjuk, hogy elkerüljük a nagy fényintenzitás okozta retinasérüléseket.



IX.8. ábra. A bilirubin abszorpciós spektruma

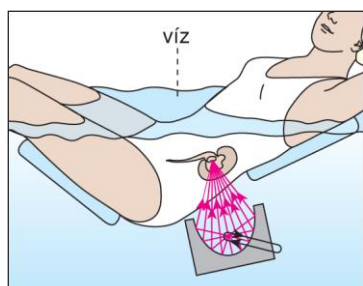
3. IX/3. Sugárterápia

A sugárterápia olyan orvosi beavatkozás, ahol a kóros szöveteket ionizáló sugárzás segítségével pusztítják el (lásd IX.1. megjegyzés). Szinte kizárólag daganatok esetében alkalmazzák, kihasználva hogy a daganatos szövetek (mint minden gyorsan szaporodó szövet) érzékenyebbek az ionizáló sugárzás károsító hatására. Míg a sugárvédelem fejezetben azzal foglalkoztunk, hogyan lehet elkerülni az ionizáló sugárzások károsító hatásait, a sugárterápia esetén fő célunk ennek a károsító hatásnak a test egy jól körülhatárolt részére való koncentrációja. Vagyis egyik fő kérdés az, hogy hogyan juttassuk el a sugárzást az elpusztítandó szövetekbe, a környező szövetek károsítása nélkül. A gyakorlatban nem tudjuk kizárólag a besugározandó gócba koncentrálni a károsító hatást, de mindig törekedni kell a test többi részét ért károsodás minimalizálására. Mivel a besugározandó terület általában a test belsejében van, a terápia hatékonysága szempontjából meghatározó jelentőségű a használt sugárzás típusa, ill. hogy ez a sugárzás milyen módon nyelődik el és fejt ki károsító hatását.

Mivel a sugárterápiában a szövetek elpusztítása a cél, az alkalmazott dózisnak jóval a determinisztikus károsodás küszöbdózisa felett kell lennie. A gyakorlatban alkalmazott dózisok 50 Gy közelében vannak, ami félelmetesnek hangzik annak a fényében, hogy egésztest-besugárzás esetén 6 Gy közelében van a halálos dózis. Ne felejtjük el azonban, hogy a terápiás besugárzás lokális, csak az elpusztítandó gócban van ekkora dózis, azon kívül pedig ennél lényegesen kisebb! Ráadásul a besugárzás megtervezésénél még arra is figyelemmel vannak, hogy a sugárérzékeny szöveteket (pl. csontvelő) minél kisebb dózis érje.

IX.1. megjegyzés. Egy „kivétel”: kőzúzás lökeshullámmal

A vesekövek (illetve epekövek) szétzúzására használt ún. ESWL (Extracorporeal Shockwave Lithotripsy) során az elektromos kisüléssel előidézett lökeshullámot a vízpárnán fekvő beteg vesemedencéjére fókuszálják. Az interferencia révén felerősödő hullámokkal elérhető a kő darabolódása, mely a kezelés után (vesekőzúzás esetén) már spontán is ürülhet. Az eljárás epekő esetén és endoszkóposan is alkalmazható.



3.1. IX/3.1. Az alkalmazandó sugárzás megválasztása

Vegyük számba az ismert és viszonylag könnyen előállítható ionizáló sugárzásokat: α -, β -, elektron, γ -, röntgen- és proton-sugárzás.

3.1.1. IX/3.1.1. α sugárzás

A II/3.2. részben láttuk, hogy az α -sugárzásnak nagy az ionizálóképessége, és ennek következtében a biológiai károsító hatása is (w_R faktor lásd II/4.1.2). Az α -sugárzás hatótávolsága a szövetekben nagyon rövid, 10–100 mikrométer, tehát a sejtek méretének csak néhányszorosa. Ezért a testen kívüli izotóp α -sugárzása csak a testfelszínre éri el. Az egyetlen lehetőség, hogy a sugárzást eljuttassuk a besugározandó térfogatba, az, hogy az izotópot magát is a besugározandó gócba juttatjuk. Az egyik ilyen módszer szerint az izotópot olyan hordozómolekulához (pl. antitestekhez) kötjük, amelyek a daganatos sejtekhez kötődnek és így az izotóp közvetlen közélről fejt ki hatását. Természetesen útközben, ameddig az antitest eljut a tumoros sejtekhez, az α -sugárzó izotóp káros hatást fejt ki, ezért fontos, hogy az antitest minél hamarabb és minél specifikusabban kötődjön a megcélzott sejtekhez. Egy másik lehetőség a sugárforrás sebészeti beültetése a daganat közelébe. (Ezt az eljárást azonban elsősorban β -sugárzó izotópok esetében alkalmazzák.)

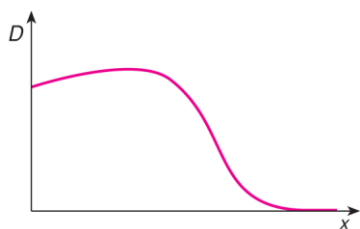
3.1.2. IX/3.1.2. β -sugárzás és elektronsugárzás

Mivel a β -sugárzás tulajdonképpen nagy kinetikus energiával rendelkező elektronokat jelent, a β -sugárzást és a felgyorsított elektronokkal történő besugárzást együtt fogjuk tárgyalni. A β -sugárzás alatt itt most csak a

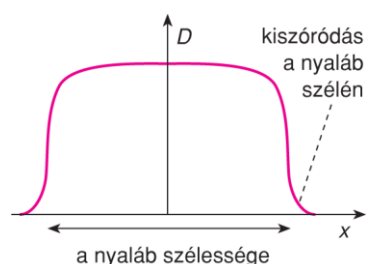
β^- -sugárzást értjük, ugyanis a β^+ -sugárzást (a β^+ részecske instabilitása miatt) nem használják terápiás célra. A β^- -sugárzás és a gyorsított elektronok között két fő különbség van: míg a gyorsított elektronok energiáját megállíthatjuk, addig a β -sugárzás energiáját az izotóp, ill. annak bomlása határozza meg. A gyorsított elektronok mindegyike azonos energiával rendelkezik (energiaspektrumuk vonalas), a β -részecskéknél azonban folytonos az energiaspektruma.

A gyorsított elektronok is meghatározott hatótávolsággal rendelkeznek ugyanúgy, mint az α -részecskék. Az elektron hatótávolságát a terápia szempontjából érdekes néhány száz MeV-es tartományban arányosnak tekinthetjük az elektron energiájával. Egy cm hatótávolsághoz kb. 3 MeV energia szükséges. Ebből is látszik, hogy a β -sugárzás, amelynek tipikus energiája 1–5 MeV körül van, nem képes mélyen behatolni a szervezetbe. További hátrány a folytonos energiaspektrum. Emiatt az elektronok egy része az átlag alatti energiával rendelkezik, ezért rövid úton elnyelődik, míg a többi az átlag felettivel, így mélyebbre hatol. Mindenképpen hasznosabb tehát, ha a β -sugárzás alkalmazása helyett az elektronokat magunk gyorsítjuk valamilyen részecskegyorsítóval (II/3.2.6.). Az ilyen készüléknek még egy nagyon fontos gyakorlati haszna van, ugyanis (az izotóppal ellentétben) ki lehet kapcsolni, és ilyenkor teljesen veszélytelen mind a páciensre, mind a kezelőszemélyzetre nézve. Ez nem elhanyagolható szempont, mivel a terápiában alkalmazott izotópok nagy aktivitásúak, hiszen épp a károsító hatásukat akarjuk használni.

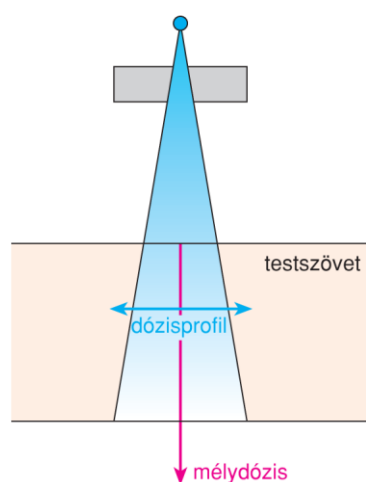
A gyakorlatban használt lineáris gyorsítók kb. 20 MeV energiára tudják gyorsítani az elektronokat, ami a fentiek szerint mintegy 7 cm-es maximális behatolási mélységnek felel meg. Az elektronbesugárzás ezért felületközelű tumorok kezelésére alkalmas. Az elektronok energialeadása, az általuk okozott ionizáló, ill. károsító hatás a testbe való behatolás mentén egy adott mélységig alig változik. Ezt mutatja a IX.9. ábra, ami az elnyelt dózist a behatolási mélység függvényében szemlélteti. Az elektronok szövetbeli útja azonban nem egyenes, ugyanis az elektron kis tömege miatt az ütközések során könnyen irányt változtat. Ezért az elektronok egy része a szövetbe való belépést követően kiszóródik (vissza a levegőbe), ez adja a görbe elején látható némileg csökkent dózist. Az elektronok oldalra is szóródhatnak, ezért az elektronsugárzás, ill. annak hatása oldalirányba is kissé szétterül (IX.10. ábra). Az elnyelt dózist a sugárzás terjedési irányára merőleges eloszlását nevezzük dózisprofilnak, a terjedés irányába eső pedig mélydózisnak (IX.11. ábra).



IX.9. ábra. A testszövetbe behatoló elektronsugárzásból származó elnyelt dózis a bőrfelülettől mért távolság függvényében



IX.10. ábra. A dózis változása adott mélységben a nyalábra merőleges irányban



IX.11. ábra A mélydózis a sugárzás irányával párhuzamos, a dózisprofil pedig az arra merőleges dóziseloszlást adja meg

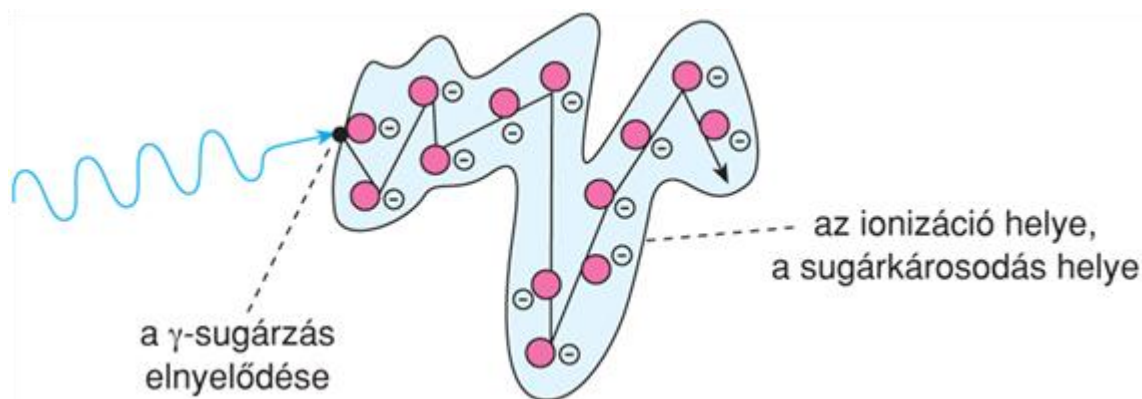
3.1.3. IX/3.1.3. γ - és röntgensugárzás, összefoglaló néven fotonugárzás

Ezeket is együtt tárgyaljuk, bár a fotonok eltérő folyamatok útján keletkeznek. Ebből következően a két sugárzás spektruma eltér egymástól. A γ -fotonok spektruma vonalas, míg a röntgensugárzásé folytonos. Az elektronokkal ellentétben most a folytonos sugárzás energiáját változtathatjuk tetszés szerint, a vonalas spektrumú γ -sugárzás energiája viszont az izotóp típusától függően adott.

A kérdés ismét az, hogy hogyan változik a fotonugárzás által leadott energia a szövetekbe való behatolás során a behatolási mélységgel. A fotonugárzás intenzitásának változása a már jól ismert exponenciális gyengülési törvénnyel írható le:

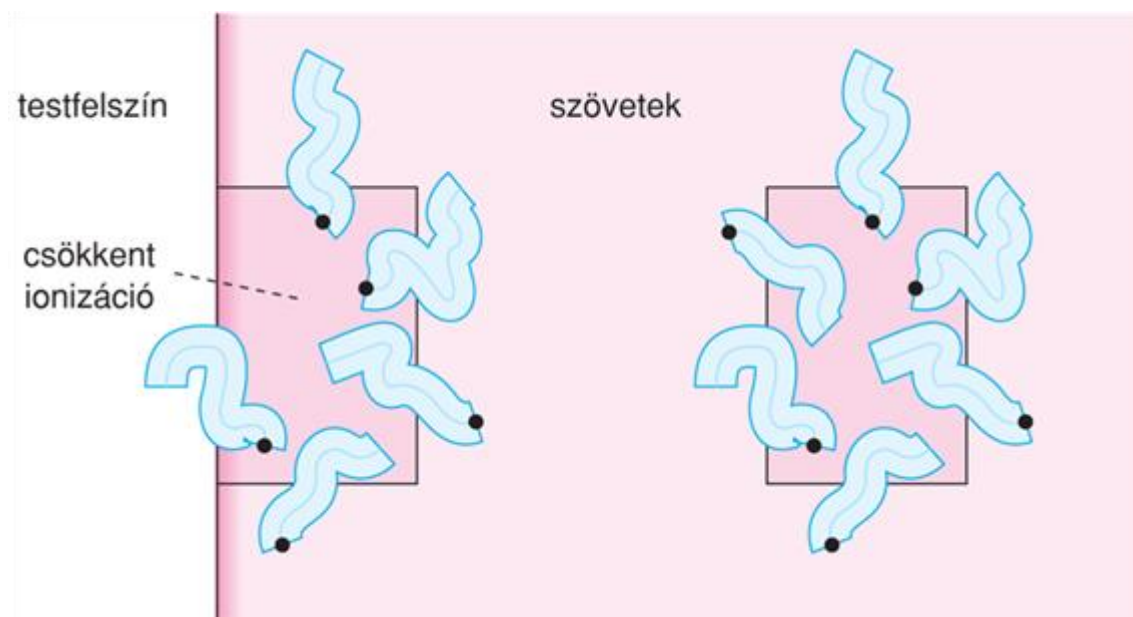
$$J = J_0 e^{-\mu x}, \quad (\text{II.11})$$

ahol J_0 a beeső, J pedig az x réteg által gyengített sugárzás intenzitása, μ pedig a gyengítési együttható (II/1.1.3.). Bennünket viszont nem az intenzitás, hanem a dózis, tehát az egységnyi tömegben elnyelt energia érdekel. Belátható, hogy ez a mennyiség is exponenciális függvény szerint változik (lásd IX.2. megjegyzés). A fotonugárzás azonban nem közvetlenül, hanem közvetve fejt ki ionizáló hatását, ezért a károsító hatás nem abban a pontban jelentkezik, ahol a foton elnyelődött. A foton energiája a leggyakrabban egy elektronnak adódik át (foto-, vagy Compton-effektussal). Párképződés esetén egy elektron és egy pozitron keletkezik. Az ionizáció szempontjából a pozitron is hasonlóképpen viselkedik, mint az elektron. Csak a lassú pozitron hajlamos az annihilációra, ehhez azonban először el kell vesztenie az energiáját (ionizációval). A γ - és röntgen-sugaréterápia szempontjából lényeges, hogy a foton elnyelődésekor keltett töltött részecske zezugos pálya mentén fejt ki a károsító hatást (IX.12. ábra).

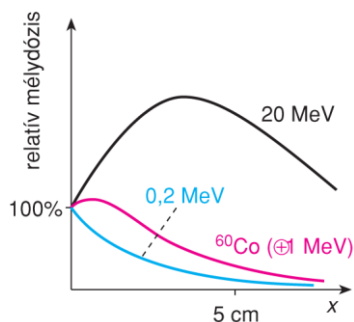


IX.12. ábra. A foton elnyelődésekor keletkezett nagy energiájú elektron zezugos pályán ionizál. A foton elnyelődésének pozíciója és a sugárkárosodás kialakulásának helye nem egyezik meg

Jelöljünk ki gondolatban egy szövetdarabot a testfelszín közelében, egy másikat pedig a test belsejében (IX.13. ábra). A test belsejében kijelölt térrészből kijövő és abba belépő elektronok egyensúlyban vannak, így az ionizációval a szövetnek átadott energia megegyezik a szövetben a foton sugárzásból elnyelt energiával. A testfelszín-közeli szövetrézbe azonban a levegőből sokkal kevesebb elektron szóródik be, mint amennyi onnan kiszóródik (nincs elektronegyensúly). A levegőben sokkal kevesebb foton nyelődik el, mint a szövetben, ezért a levegőben eleve sokkal kevesebb elektron keletkezik. Emiatt a foton sugárzásból elnyelt (és az elektronoknak átadott) energia egy része kompenzálatlanul kiszóródik. Közvetlenül a testfelszín alatt a dózis ezért kisebb lesz, amit hatékonyan ki lehet használni a bőr védelmére. Hogy ez a dóziscsökkentő hatás milyen mélységig van jelen, az attól függ, hogy mekkora ezeknek az elektronoknak az átlagos úthossza, ami pedig az energiájuktól, ill. végső soron a foton sugárzás energiájától függ. Minél nagyobb a foton sugárzás energiája, annál mélyebben érvényesül az elektronok kiszórásából eredő hatás. A sugárzás terjedési irányába eső dóziseloszlás görbáját relatív mélydózisgörbének hívjuk (relatív, mert a testfelszíni dózist vesszük 100%-nak). Ilyet mutat a IX.14. ábra különböző fotonenergiáknál. Az ábrából nyilvánvaló, hogy a mélyebben fekvő góccok besugárzásához olyan nagy energiákra van szükség, amelyek γ -sugárzással nem biztosíthatók, messze meghaladják a szokásos γ -fotonenergiákat. Ezért gyakrabban használnak nagyenergiájú röntgensugárzást (lásd II/3.1.2.). Az így előállított sugárzás energiaspektruma azonban folytonos, ami azt jelenti, hogy vannak benne kis energiájú fotonok is, amelyek a felső szövetrétegekben nyelődnek el. Ezt lehet csökkenteni a sugárnyaláb útjába helyezett szűrővel. (Röntgensugárzás esetén szokás a sugárzás polikromatikus (nem monokromatikus) voltára úgy utalni, hogy pl. 1 MV-os foton sugárzásról beszélnek, ami azt jelenti, hogy az anódra becsapódó elektronokat 1MV feszültség gyorsította (az elektronok energiája 1 MeV), a keletkező fotonoknak azonban csak a maximális energiája 1 MeV, az átlagos fotonenergia ennél kisebb.



IX.13. ábra. A testfelszín közelében csökken az ionizáció, és ezzel a dózis is, mivel a levegőből alig szóródik be elektron



IX.14. ábra. Relatív mélydózis görbék különböző fotonenergiáknál. (Kiseb energián visszakapjuk a sugárzás intenzitásának exponenciális gyengüléséből következő mélydózis görbét)

IX.2. megjegyzés

Egy Δx vastagságú rétegben t idő alatt az A felületre beeső J_0 intenzitásból elnyelt energia:

$\Delta E = (J_0 - J)At = -\Delta JAt$. Ebből az elnyelt dózis (felhasználva, hogy $m = V\rho$):

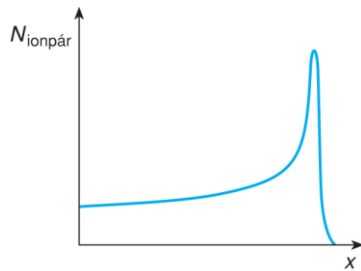
$$D = \frac{\Delta E}{\Delta m} = - \frac{\Delta JAt}{\Delta x A \rho},$$

ami arányos $\Delta J/\Delta x$ -szel. Azt is tudjuk, hogy $\Delta J/\Delta x = -\mu J$, (lásd II/1.1.3., II.10) tehát a $\Delta J/\Delta x$ mennyiség ugyanolyan módon változik, mint maga a J .

3.1.4. IX/3.1.4. Protonsugárzás

Protonsugárzás alatt valamilyen gyorsítóval felgyorsított protonok nyalábját értjük. A protonok elnyelődése némiképp hasonlatos az α -sugárzáséhoz. A protonsugárzás energiája azonban az alkalmazott gyorsítóval szabadon változtatható, és sokkal nagyobb részecskeenergia érhető el, mint az α -részecskék tipikus energiája. Mivel a protonok ionizálóképessége függ a sebességtől, útjuk során eltérő módon ionizálnak. A proton energiaátadása (LET, lineáris energiáttranszfer, lásd II/3.2.3.) és ezzel ionizálóképességük növekszik a sebesség csökkenésével, az ionizáció egy része a pálya végére koncentrálódik, amikor a proton már eléggé lelassult. A keltett ionpárok száma tehát a proton útjának végén egy olyan csúcsot ad (ez az ún. Bragg-csúcs), amely 4-5-ször magasabb, mint az út elején mérhető ionsűrűség. Ezt mutatja a IX.15. ábra. Mivel az ionizáció a sugárkárosodás egyik első lépése, a dózis is a proton útjának végén koncentrálódik. Ezért a protonsugárzás ideális a test mélyén levő tumorok oly módon történő besugárzásához, hogy közben a tumor előtti szöveteket lehetőség szerint megkíméljük.

A terápia hátránya, hogy magas a költsége. A megfelelő behatolási mélység (10-20 cm) eléréséhez a protonokat több száz MeV energiára kell felgyorsítani, amely hatalmas gyorsítókat igényel. Ilyenekből az egész világon is csak néhány tucat működik.

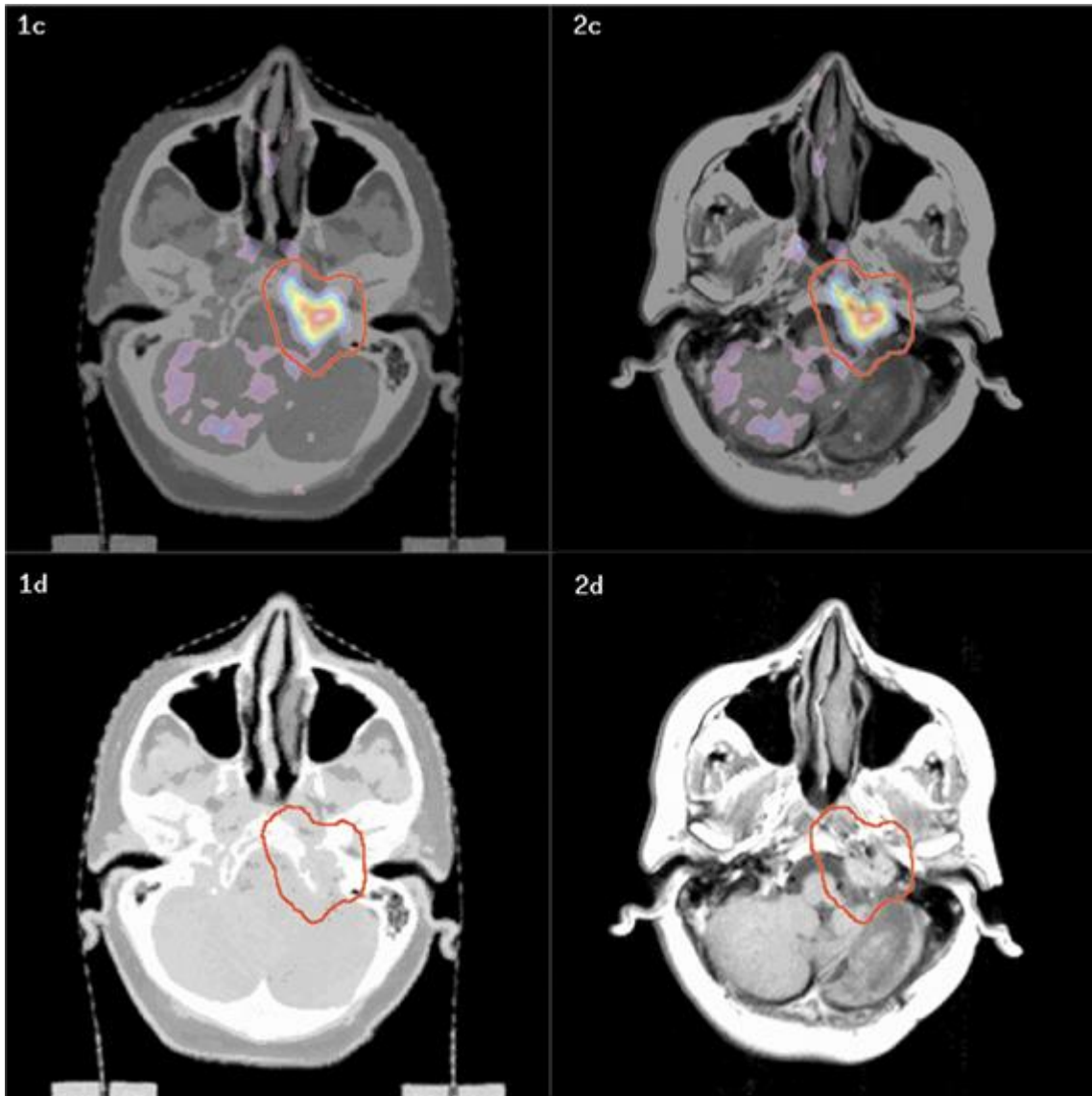


IX.15. ábra. Protonsugárzás ionizációja a behatolási távolság függvényében (Bragg-csúcs)

3.2. IX/3.2. A sugárzás eljuttatása a besugározandó gócba

3.2.1. IX/3.2.1. A képalkotó eljárások és a besugárzás együttes alkalmazása

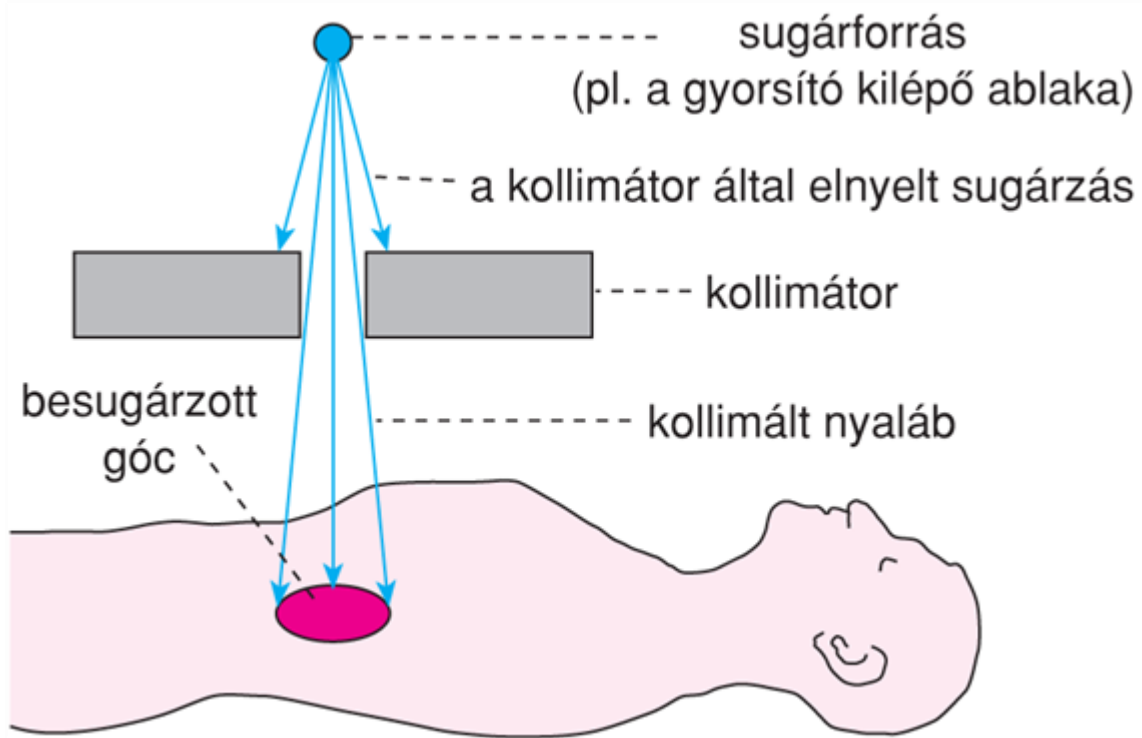
Az eredményes besugárzáshoz mindenképpen szükséges, hogy a besugározandó területet pontosan körül tudjuk határolni. Ez legtöbbször valamilyen képalkotó eljárással (CT, MRI, PET, stb.) történik (IX.16. ábra). Fontos, hogy a képek alapján megtalált tumort a besugárzáskor se tévesszük szem elől. Ehhez olyan vonatkoztatási pontokra van szükség, amelyek mind a képalkotó vizsgálat, mind pedig a besugárzás során jól azonosíthatók. A fej besugárzásánál gyakran alkalmazzák erre a célra az ún. sztereotaxiás keretet, amelyet a fejre rögzítenek. A keret segítségével a páciens feje mind a diagnosztikai vizsgálat, mind pedig az egymást követő besugárzások alkalmával reprodukálható módon rögzíthető (IX.21. ábra).



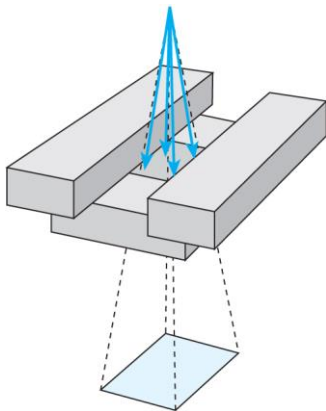
IX.16. ábra. CT és MET-PET, ill. MRI és MET-PET fúziójával segített 3D besugárzástervezés koponyaalapi tumor esetében (a metionin-PET vizsgálat pontosabban mutatja a tumor kiterjedését = kisebb céltérfogat) (DEOEC PET Centrum felvétele, Prof. Trón Lajos hozzájárulásával)

3.2.2. IX/3.2.2. Kollimátorok

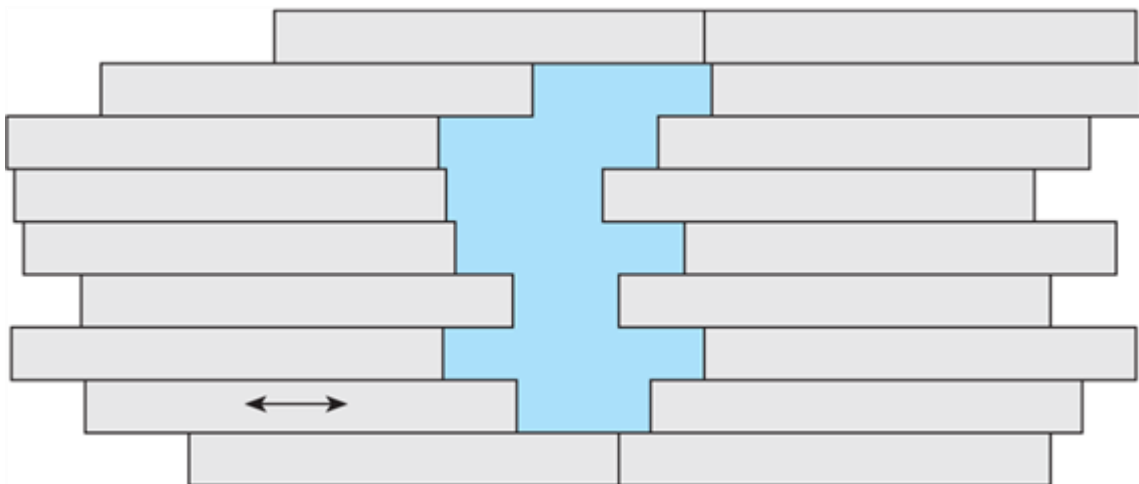
A besugárzandó gócot körülvevő szövetek megkímélésének egyes módjait már ismertettük az előző részben: a megfelelő sugárzás, ill. annak energiájának megválasztása nagyon fontos a góc előtti és mögötti szövetekben elnyelt dózis minimalizálásához. A góc melletti szövetek megkímélése szempontjából a sugárnyaláb megfelelő alakra való formálása, azaz kollimálása is létfontosságú. A kollimátor jó abszorpcióképességű (ólom- vagy volfrám-) tömbökből áll. Az általa körbezárt nyílás úgy állítható be, hogy felesleges sugárzás ne érje a páciens (IX.17. ábra). A hagyományos kollimátortömbök (IX.18. ábra) alkalmazásával csak négyyszög keresztmetszetű sugárnyaláb alakítható ki. A besugárzandó góc azonban a legritkább esetben négyyszög alakú. A modernebb készülékekbe ezért lemezes kollimátort szerelnek (IX.19. ábra), amelyekben a lemezek elcsúsztatásával a sugárnyaláb alakja szinte tetszőlegesen formálható. A továbbfejlesztett változatban a lemezek a besugárzás alatt mozgathatók, ezzel a sugárzás intenzitása is változtatható. Például, ha a góc egy részét a besugárzási idő felében kollimátorlemezekkel eltakarjuk, akkor az ide jutó dózis csak a fele lesz a teljes idő alatt besugárzott szövetek dózisének. Ezt nevezik IMRT-nek (intensity modulated radiotherapy).



IX.17. ábra. A kollimátor elve



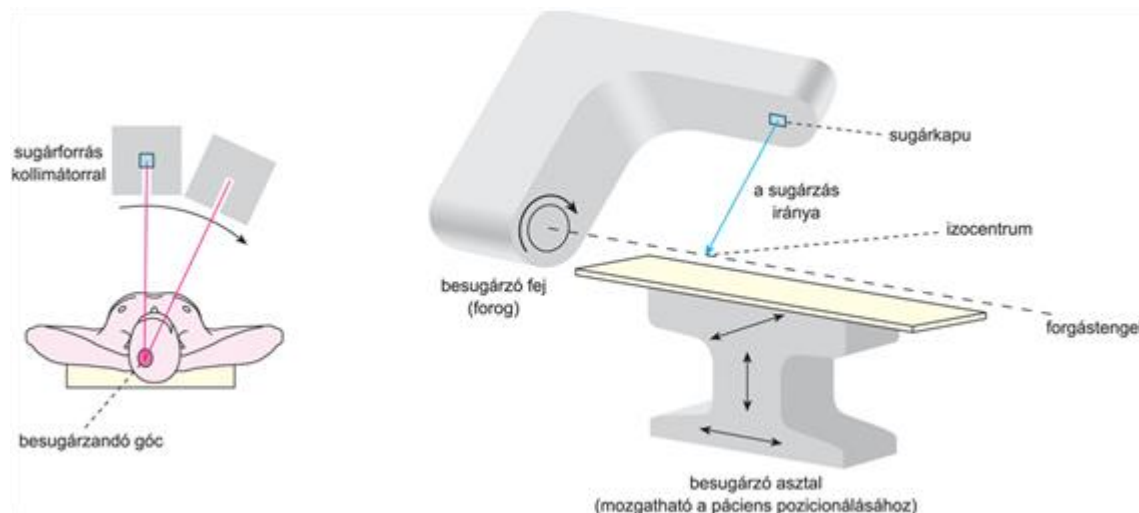
IX.18. ábra. Hagyományos kollimátor- tömbök használatával csak téglalap keresztmetszetű sugárnyaláb alakítható ki



IX.19. ábra. Lemezes kollimátor (felülnézet). A besugárzandó góc alakjához illeszthető a sugár-nyaláb alakja. (A nyíl a lemezek mozgásának irányát mutatja, a kék folt pedig a sugárnyaláb keresztmetszete.)

3.2.3. IX/3.2.3. Forgó besugárzás

A környező szövetek megkímélésének további módja a sugárforrás forgatása. A IX.20. ábra mutatja ennek az elvét. Lényege az, hogy a sugárforrást egy olyan tengely körül forgatjuk, amely átmege a besugárzandó gócon. Bármely irányból történik is a besugárzás, a gócot mindenképp éri sugárzás, viszont az ép szöveteket csak rövidebb ideig sugározzuk be, addig, amíg azok a sugárzás útjába esnek. Egy tipikus besugárzó készülék ennek megfelelően van felépítve: egyrészt lehetőség van a páciens helyzetének változtatására, ezzel a gócnak a forgástengely és a sugárnyaláb tengelyének metszéspontjába (az ún. izocentrumba) való pozicionálására, másrészt a besugárzó fej (ami tartalmazhat egy egész lineáris gyorsítót is) forgatására ezen központ körül.



IX.20. ábra. A forgó besugárzás elve. Az ép szöveteket csak rövid ideig éri sugárzás (lent). Tipikus készülék forgó besugárzáshoz (jobbra)

3.2.4. IX/3.2.4. Egy speciális sugárterápiás eszköz, a gamma-kés

A gamma-kés alap gondolata az, hogy egy sugárforrás forgatása helyett alkalmazhatunk sok sugárforrást, amelyek különböző irányokból egyszerre sugároznak. Az elvi felépítés a IX.21. ábrán látható. Egy félgömb felületén kb. 200 radioaktív forrást (általában ^{60}Co -izotópot) helyeznek el. Az izotópok összaktivitása 100 TBq nagyságrendű. A források sugárnyalábjait egy közös pontra, a gömb középpontjára irányítják. Ezek után már csak a besugárzandó gócot kell ebben a centrumban elhelyezni. Ehhez nyújthat segítséget a fejezet elején említett sztereotaxiás keret, amelyet a páciensre rögzítettek. A beteget ezzel a kerettel és a kezelőasztallal együtt távirányítással mozgatják a besugárzás alatt. A gamma-kés felépítésénél fogva az agytumrok kezelésére alkalmas.



IX.21. ábra. Gamma-kés működése. Az előtérben lent látszik a páciens fejének rögzítésére szolgáló keret

3.2.5. IX/3.2.5. Az izotópkezelés kivitelezése

A **nyílt** izotópterápia jó példája a radiojód-terápia, melynek során a pajzsmirigy túlműködésének visszafogására a beteget rövid felezési idejű ^{131}I izotóppal (NaI-dal) kezelik. A radiojód az inaktív elemhez hasonlóan részt vesz a pajzsmirigyhormonok szintézisében, így a szervezetbe juttatva a túlműködő szervben specifikusan dúsul, és azt helyileg roncsolja.

A terápiás hatás a ^{131}I izotóp béta-sugárzásának köszönhető, mivel az – rövid hatótávolsága révén – a pajzsmirigyben nyelődik el. A ^{131}I azonban emellett gamma-sugárzást is kibocsát, ami nagyrészt kijut a kezelt személy szervezetéből és a környezetében lévőket érinti. Ezt figyelembe véve a kezelt személynek szigorú életmódi szabályokat kell betartania, hogy a körülötte levőket ne veszélyeztesse. 550 MBq-nél nagyobb aktivitás esetén a kezelés csak kórházi tartózkodás során végezhető el.

Lokális kezelésre a testüregi, urológiai és nőgyógyászati daganatok alkalmasak elsősorban. Az izotóp a daganat közelébe preformált üregbe helyezett **zárt** kapszulában vagy a szöveten átvezetett tűkben is eljuttatható. Ez az alapja a brachycurie és Joliot-terápiának. Az ún. afterloading-kezelés során a távirányított berendezés a külső, árnyékolt tárolóból juttatja el az izotópot a testbe helyezett eszközbe és vissza. Így a személyzet sugárterhelése minimalizálható.

4. IX/4. Elektromos áram terápiás alkalmazásai

4.1. IX/4.1. Egyenáram alkalmazása

Az egyenáram fájdalomcsillapító, anyagcsere-fokozó hatását használja ki az ún. **galvánkezelés**, amit egyes végtagokra, vagy akár az egész testre alkalmaznak. Az egyenáram és a gyógyszeres kezelés hatásai kombináltan jelentkeznek az **iontoforézis** alkalmazásakor. Ennek során az ionos állapotú gyógyszert (fájdalomcsillapító, gyulladáscsökkentő stb.) felviszik az azonos polaritású elektródra, majd az áram bekapcsolásakor az ionok elindulnak az ellentétes pólus felé az elektródok közötti testrészen keresztül. Így a gyógyszer egyszerűen bevihető a kezelendő testrészbe.

4.2. IX/4.2. Ingeráram-terápia

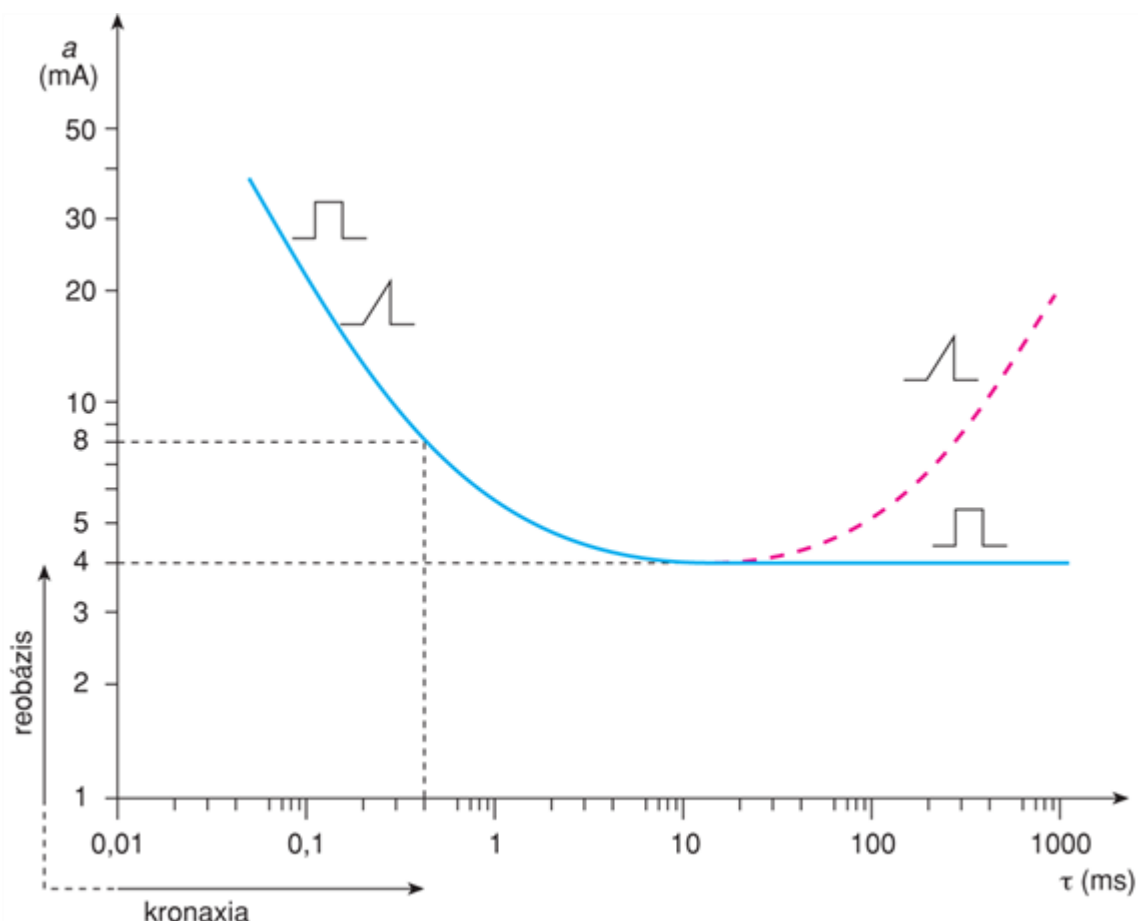
Az áram ingerhatása egyszerűen demonstrálható egy ún. ideg-izom készítményen. Kipreparálunk egy izmot és az adott izmot beidegző ideget. Elektromos impulzusokkal ingerelve az ideget megfigyeljük, hogy létrejön-e izom-összehúzódnás vagy sem. (Az elektródák általában fiziológiás sóoldattal töltött vékony kapillárisok, amelyek ellenállása nagy, ezért célszerűbb a feszültségimpulzusok helyett áramimpulzusokat alkalmazni.) Minden négyzetgimpulzushoz a koordináta-rendszer egy pontját rendeljük (IX.22. ábra). A pont vízszintes koordinátája az impulzus hossza (τ), a függőleges koordinátája pedig az impulzus amplitúdója (a).

Ahhoz, hogy az áramimpulzusok izom-összehúzódnást generáljanak, egy bizonyos küszöb-amplitúdó szükséges. A küszöb-amplitúdókat az impulzushossz függvényében feltüntető görbe az **ingerkarakterisztika**. Ez a görbe az alábbi függvénnyel közelíthető (ne feledjük, hogy az ábrán mindkét tengely logaritmikussal):

$$a_{\text{küszöb}} = \frac{q}{\tau} + r.$$

Az ábráról is látható, hogy az izom-összehúzódnáshoz egy minimális áram, az ún. reobázis szükséges (r). A másik, töltés dimenziójú paraméter (q) a következőképpen adható meg. Alkalmazzuk a reobázis kétszeresét amplitúdóként ($a = 2r$) és éppen annyi ideig, hogy az izom-összehúzódnás megtörténjen. Ezt a τ időt nevezzük kronaxiának (C), így a fenti összefüggés szerint:

$2r = \frac{q}{C} + r$, tehát $q = rC$. Az ingerterápiában a reobázist némileg meghaladó nagyságú áramimpulzusokat használnak.



IX.22 ábra. Ingerkarakterisztika-görbe

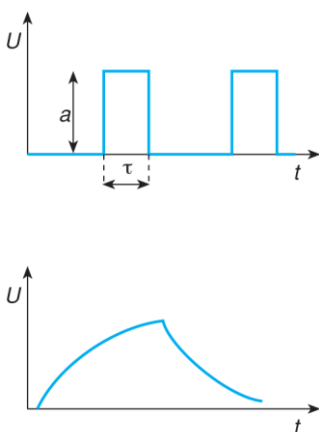
Az ingeráramot izomkontrakció előidézésére (pl. időleges beidegzési zavar esetén (denervációs) sorvadás megelőzésére) vagy tüneti kezelésként az anyagcsere fokozására, illetve fájdalomcsillapításra használják. Ezen alapulnak az egyre elterjedtebb, elsősorban fájdalomcsillapításra használt ún. TENS (transcutan elektro-neuro stimulációs) készülékek (IX.23. ábra).

A IX.22. ábrán látható folytonos görbe a négyszögimpulzusokra adott választ mutatja. Ezek esetében a feszültség emelkedése pillanatszerű (lásd IX.24. ábra). Más a helyzet háromszög vagy exponenciális alakú impulzusok alkalmazásakor (szaggatott görbe). Ekkor a feszültség növekedése elhúzódóbb, időtartama az impulzusidő függvénye (IX.24. ábra). Kellően hosszú impulzusidő (néhányszor 10 ms, vagy hosszabb) esetén a sejt alkalmazkodásra (akkomodáció) képes, azaz olyan irányú ionáramok indulnak meg, amelyek az ingerlés ellen hatnak. Ennek következtében csak nagyobb amplitúdójú impulzusok képesek kiváltani az izom kontrakcióját, mint az ugyanolyan időtartamú négyszögimpulzus alkalmazásakor. A különbség hosszabb impulzusidők alkalmazásakor egyre nő. Ez a jelenség felhasználható ún. **szelektív ingeráram-terápiára**. Kóros állapotokban ugyanis az izom elveszíti alkalmazkodóképességét és a fokozatosan emelkedő amplitúdójú impulzusok hatása ugyanolyan lesz, mint a hirtelen emelkedő amplitúdójúaké. Ha tehát olyan háromszög, vagy exponenciális impulzust alkalmazunk, amelyik küszöb alatti az egészséges izmok számára, de küszöb feletti a károsodott izmok esetében, lehetővé válik a károsodott izmok szelektív kezelése.

Ugyancsak egyes izmok szelektív kezelésére ad lehetőséget az ún. **interferenciaáram-terápia**. Ennek során két elektródpárt helyeznek a páciens testére úgy, hogy az átfolyó áramok a kezelendő területen találkozzanak. Mindkét elektródpáron keresztül közepes frekvenciájú (kb. 4000 Hz) áramot vezetnek a testbe. A kettő frekvenciája között kb. 100 Hz-nyi különbség van. A 4000 Hz körüli frekvencián az alkalmazott áramerősség küszöb alatti, tehát nem vált ki ingerhatást. Azon a területen viszont, ahol a két áram találkozik, az interferencia következtében a két frekvencia különbsége is megjelenik. Amint az a IX.22. ábrán látható, ezen a frekvencián a küszöb meglehetősen alacsony, ezért ez ingerhatást vált ki. A két elektródpár pozíciójának megfelelő beállításával az ingerelt terület kiválasztható.



IX.23. TENS-készülék



IX.24. ábra. Négyzet- és exponenciális impulzus

4.3. IX/4.3. Szívritmus-szabályozó

Elektromos impulzusok felhasználhatók a szívizom ingerlésére is. Ha a szív saját ingerképző rendszere nem működik normálisan és emiatt ritmuszavar lép fel, szükség van a külső elektromos ingerlésre. Ezt valósítják meg

a **szívritmus-szabályozók** (pacemakerek). Ezek általában percenként 70-90 négyszögimpulzust szolgáltatnak, melyek időtartama kb. 1 ms, amplitúdója néhány volt. A modern pacemakerek mellett, hogy a szív saját ingerképését érzékelik és csak ennek kimaradása esetén lépnek működésbe (demand üzemmód), képesek az impulzusfrekvencia szükségletnek megfelelő beállítására is. Ezek az ún. „rate-responsive” pacemakerek valamilyen, a fizikai aktivitás változását jelző paramétert érzékelnek (izommozgás okozta vibráció, légzésszám, vér hőmérséklete stb.) és ennek megfelelően szabályozzák a frekvenciát (IX.25. ábra).



IX.25. ábra. Beültethető szívritmus-szabályozó

4.4. IX/4.4. Defibrillátor

Elektromos vagy más baleset miatt, illetve a szív kóros állapota következtében előfordulhat a szívkamrák fibrillációja. Ekkor a szívizom remegni kezd, percenként 3-400-as frekvenciával, és képtelenné válik a vér hatékony továbbítására. Ez az életveszélyes állapot megszüntethető **defibrillátor** alkalmazásával. Ilyenkor egy nagy energiájú (2-300 J) elektromos impulzust alkalmaznak a mellkasra helyezett elektródák segítségével. Ez a szívizomrostok szinkronizált kontrakcióját hozza létre, amely után esély van a normális szívritmus helyreállítására. Az utóbbi években olyan betegeknek, akik fibrillációra hajlamosak, beültethető defibrillátort is alkalmaznak. Ilyenkor a defibrilláló elektródákat közvetlenül a szívbe vezetik. Természetesen ezeknél a defibrilláló impulzus energiája több nagyságrenddel kisebb, mint a testfelszínen történő alkalmazáskor. Olyan készülékek beültetésére is van példa, amelyek szükség szerint működnek pacemakerként vagy defibrillátorként (IX.26. ábra).



IX.26. ábra. Defibrillátor. Beültethető defibrillátor

5. IX/5. Hőterápiás eljárások

Az orvosi gyakorlatban alkalmazott hőterápiás eljárások egy részének célja a test, testrész, szerv vagy szövetdarab hőmérsékletének kismértékű emelése, s ezáltal specifikus hatások, elsősorban anyagcsere fokozódás elérése. Ez a megközelítés többnyire sérülés vagy gyulladásos betegség gyógyulását, illetve fájdalom csillapítását kívánja segíteni. A hőközlés történhet igen egyszerű fizikai módszerekkel, pl. borogatás, meleg fürdő. Ezekkel azonban nem lehet a test belsejében levő, körülhatárolt térfogatelemet specifikusan melegíteni, ezért ezek kezeléséhez több nem invazív módszert is kidolgoztak. Ezek többnyire az ultrahang, az infravörös sugárzás, vagy a nagyfrekvenciás elektromágneses tér felhasználásán alapulnak. Meg kell említeni, hogy létezik olyan, az alternatív orvoslás határterületén mozgó, az egész test enyhe melegítését alkalmazó módszer is, mely daganatok elpusztítását célozza meg. Ennek hatásmechanizmusai azonban kevésbé ismertek, eredményessége tudományosan nem nyert bizonyítást.

Ezzel szemben szelektív szövetpusztításra elterjedten használják a különféle fizikai jelenségek hőhatásait: a hőterápiás eljárások másik kategóriája tehát az eltávolítandó szövet jelentős hőmérséklet-emelkedését tűzi ki célul. Az eredmény lehet koaguláció vagy karbonizáció. Az előbbit a testen belüli góccok elpusztítására alkalmazzák, míg a nyílt sebészeti beavatkozásoknál mindkettő alkalmazásra kerül. A hő forrását tekintve lehet lézertény (lásd IX/1.2.1., ILPC), ultrahang vagy elektromágneses tér. Nem túl mélyen fekvő góccok hőkezelésére a fagyasztás is használható.

A koagulációs hőhatás mechanizmusait tekintve meglehetősen összetett. Közvetlenülfehérjék denaturációját, és véralvadást okoz, amelynek patológiai következménye az ún. koagulációs nekrozis. A kevésbé érintett sejtekben hősokkfehérjék termelődnek, melyek a kicsapódott, konformációjukat vesztett fehérjék javítására tesznek kísérletet, s ha ez sikertelen, programozott sejthalál következhet be. Az erek elzáródása miatt oxigénhiány, relatív keringési elégtelenség lép fel, ami a sejtek anyagcserezavaraihoz, membránkárosodáshoz, és következményes sejtnekrozishoz vezet. Indirekt hatásként számba kell vennünk az ún. komplementrendszer

aktiválódását, amely steril gyulladás kialakulását eredményezi, fokozva az immunrendszer védekező, ill. pusztító hatását.



Jacques-Arsène d'Arsonval (1851– 1940) francia fiziológus 1895-ben először alkalmazott nagyfrekvenciás hőterápiát. Az elektroterápia atyjának tekintik.

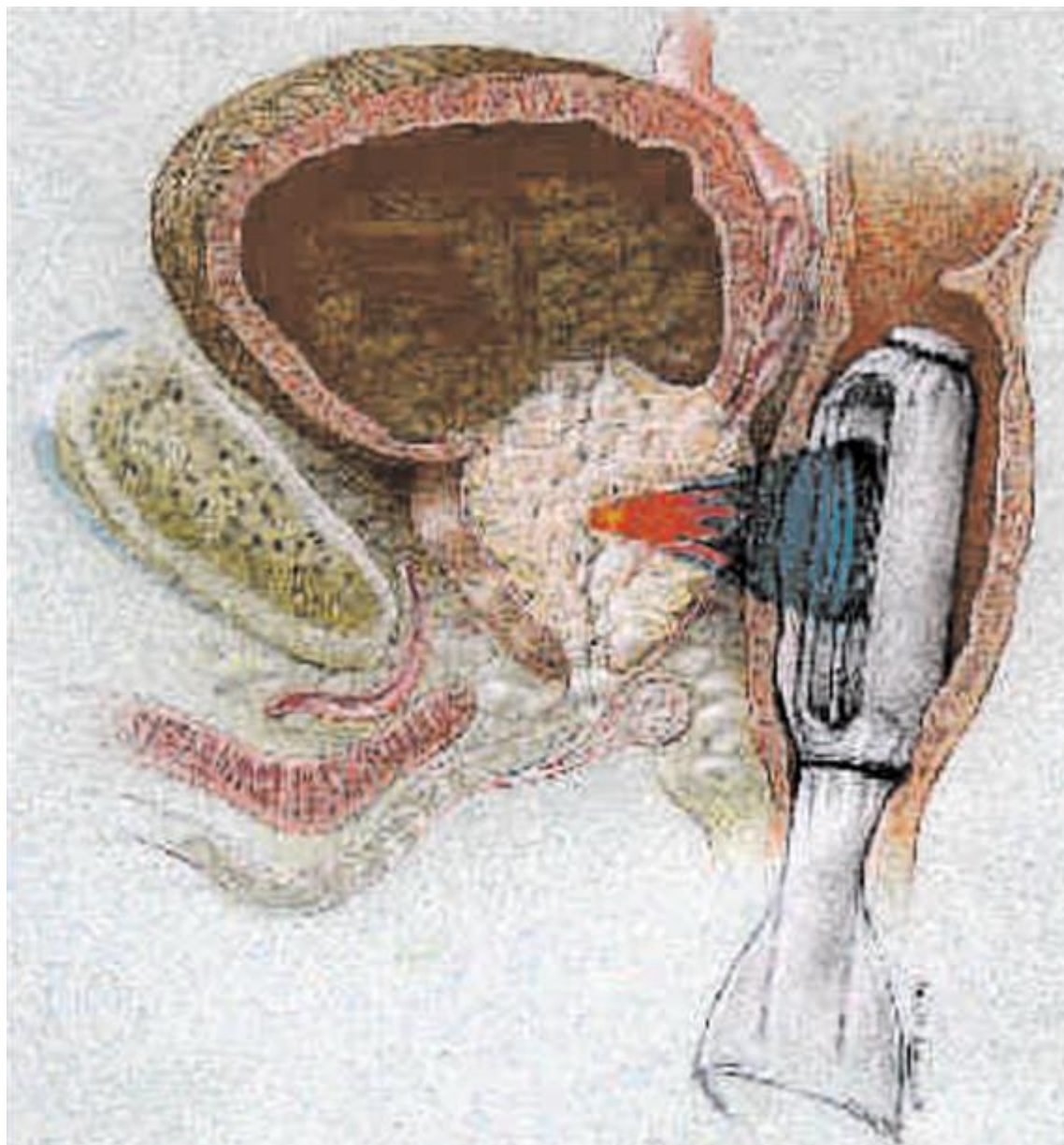
5.1. IX/5.1. Ultrahang-terápia

Az orvosi képpalkotó diagnosztika során használt ultrahang-intenzitások és -frekvenciák mellett káros biológiai hatásokkal nem kell számolni. Ezáltal az ultrahangos vizsgálatok – ellentétben az ionizáló sugárzásokon alapuló eljárásokkal – tetszőleges gyakorisággal ismételhetők, akár pl. terhes nőknél is. A lényegesen nagyobb intenzitású ultrahang azonban az anyagi közegen történő áthaladásakor fizikai, kémiai és biológiai elváltozásokat is létrehozhat. Az elsődleges ultrahanghatások közül a legfontosabb a váltakozó nyomás, a sugárnyomás, a kavitáció, a mechanikai dörzsölő hatás és az abszorpció.

Az ultrahang a közeg részecskéit mozgásba hozza. Az olyan ultrahangtérben, ahol a részecskék nagysága között nincs jelentős különbség, azok együtt mozogva követik az ultrahang által megszabott kimozdulásokat, azaz együtt rezgés következik be. Ha a részecskék mérete eltérő, akkor a nagyobb részecskék tehetetlenségük miatt fogva a kisebbekhez képest lemaradnak, esetleg mozdulatlanok maradnak. A különböző nagyságú részecskék között így sebességkülönbség és ennek megfelelően súrlódás lép fel, ami a jellegzetes ultrahangos **dörzsölő hatást** okozza (**mikromasszázs**).

A mechanikai hatás és az abszorpció együttesen hőhatást is kivált. Az ultrahang ezen hatásain alapszik annak terápiás felhasználása.

Fontos még egyszer hangsúlyozni, hogy az ultrahang diagnosztikai alkalmazása során alkalmazott frekvenciák és intenzitások mellett kavitáció létrejöttével gyakorlatilag nem kell számolni (lásd *A kavitáció jelensége*). Létrehozhatunk azonban az ultrahang fókuszálásával olyan nagy intenzitásokat, amikor már előfordul a kavitáció és helyi melegítôhatás. A fókuszálást konkáv transzducer alkalmazásával vagy polisztirollencsével végezhetjük. A fókuszpontban kialakuló kavitáció jelenségét és a jelentős mértékű hőmérséklet-emelkedés hatását felhasználhatjuk pl. tumoros sejtek elpusztítására. Ennek során több forrásból származó nyalábot egyesíthetünk egyetlen helyen, így a sejtpusztító hatás felléptét eredményező intenzitás csak ezen a helyen alakul ki (hasonlóan a gamma-késhez, lásd IX/3.2.4.). A módszer (HIFU – high intensity focussed ultrasound) a daganatterápiás gyakorlatban napjainkban kezd bevezetésre kerülni (IX.27. ábra). Nagy előnye, hogy a testbe való mechanikai behatolás nélkül is alkalmazható, és a céltér fogatra jól lokalizált hődenaturációt vált ki. A pontos lokalizációhoz számottevően hozzájárul, hogy a módszer jól kombinálható képpalkotó eljárásokkal, azon belül is ultrahang-diagnosztikával. Elsősorban levegő vagy csontok által nem árnyékolt szervek daganatainak kezelésére alkalmas, pl. prosztata, emlő, vese, máj és hasnyálmirigy primer és metasztatikus daganatainak kezelésében használták eddig sikerrel.



IX.27. ábra. Prostatadaganat HIFU-kezelése a végbélbe helyezett nagy energiájú fókuszált ultrahangforrással

A kavitáció jelensége

A váltakozó nyomó- és húzófeszültségeknek kitett folyadékrezecskék közötti összetartó erők helyenként megszűnhetnek, és mikroszkópos méretű folyadékmentes üregek keletkezhetnek. Ezt a jelenséget **kavitációnak** nevezték el. A kavitációt létrehozó határintenzitás függ az ultrahang frekvenciájától és a folyadék viszkozitásától. Kavitáció során mintegy 100 μm -es buborékok keletkeznek. Ezek a buborékok igen hevesen, az ezredmásodpercnél gyorsabban összeroppannak, és eközben hőmérsékletük akár 5000 °C-ra is emelkedhet. A magas hőmérséklet egy nagyon vékony rétegre terjed ki, ezért a buborék összeroppanásakor, illetve keletkezésakor a felmelegedési, illetve lehűlési sebesség elérheti akár a másodpercenkénti egymilliárd °C-ot is. (Ehhez hasonló hűlési sebességet akkor tapasztalnánk, ha olvasztott fémeket egyatomos rétegben abszolút 0 fokhoz közeli hőmérsékletű felszínre bocsátanánk.) A nyomás csúcserékét mintegy 500 barra becsülhetjük, ami nagyjából a fele a Mariana-árok mélyén uralkodó nyomásnak. Az üregek körül kialakuló nagy feszültségek lokálisan hatalmas energiák felszabadulásához vezetnek, amelyek a folyadékot robbanásszerűen forrásba hozhatják. Érdekes alkalmazási területet kínál ez a jelenség a kémiai reakciók tanulmányozására. Ultrahang segítségével olyan kémiai reakciók hozhatók létre, amelyeket semmilyen más módszerrel nem sikerült eddig megvalósítani.

5.2. IX/5.2. Nagyfrekvenciás hőterápia

A nagyfrekvenciás elektromos impulzusok alkalmazásának jelentősége abban áll, hogy nagy frekvencia (igen rövid impulzusidő) alkalmazásakor az ingerküszöb meredeken emelkedik, azaz a szokásos amplitúdójú impulzusoknak nincs inger- csak hőhatása. A hőterápiában valójában nem négyszögimpulzusokat használunk, hanem a könnyebben előállítható nagyfrekvenciás szinuszos váltakozófeszültséget. Az ingerhatás biztos kizárására 100 kHz feletti frekvenciákat használnak. Ilyen nagy frekvenciájú szinuszosan váltakozó feszültség előállítása szinuszoszcillátorral lehetséges (lásd VII/1.6.).

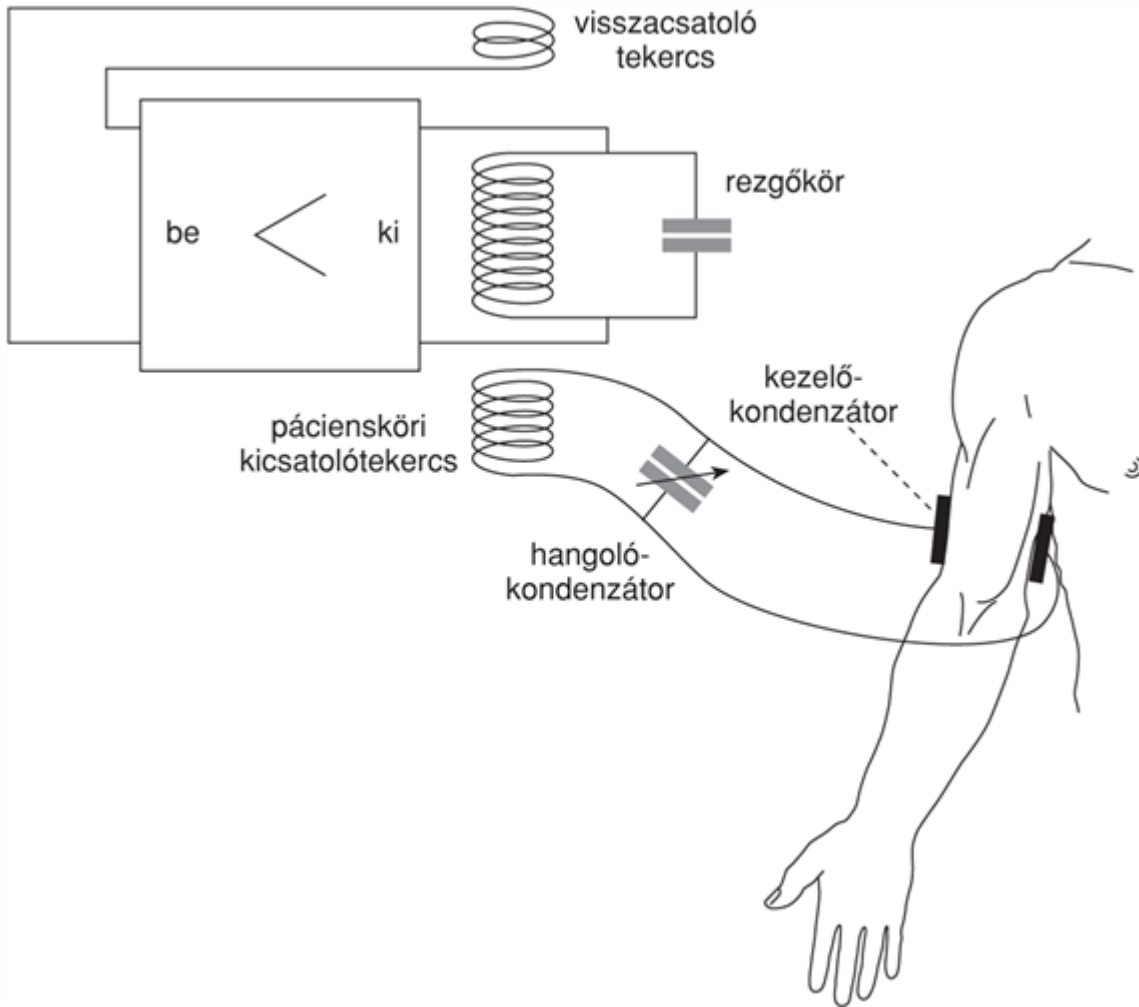
Az így előállított energia induktív csatolással, egy másik *LC*-kör (**kicsatoló** kör vagy **páciens** kör) közbeiktatásával jut el a kezelés helyére, melynek tekerése ugyancsak az eredeti rezgőkör tekercsének mágneses terében helyezkedik el. Az átvitel akkor optimális, ha a két *LC*-kör saját frekvenciája megegyezik, azaz rezonancia áll fenn közöttük. Az induktív csatolás révén elkerülhetjük, hogy a rezonanciafrekvenciától jelentősen eltérő frekvenciatartományban – itt főleg a hálózati frekvencia érdekes – energia jusson a páciensre.

A nagyfrekvenciás hőterápiás eljárások során a testszövetekbe juttatott elektromos energia hővé alakul, ezáltal fokozva a szövet anyagcseréjét. Ezen eljárások során szigorúan meghatározott, nemzetközi egyezményben jóváhagyott frekvenciákat, illetve hullámhosszakat használnak. Ennek alapján **rövidhullám-, deciméterhullám- és mikrohullám-**terápiáról beszélhetünk (lásd IX.2. táblázat).

9.2. táblázat - IX.2. táblázat. A nagyfrekvenciás hőterápiában szokásos eljárások

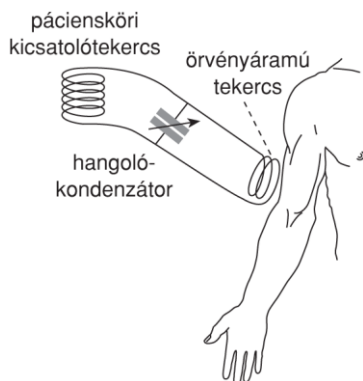
Kezelési típus	Frekvencia (MHz)	Hullámhossz (m)
Rövidhullám-terápia	27,12 (±0,6%)	11,06 (±0,6%)
Deciméterhullám- vagy ultranagy-frekvenciás terápia	433 (±0,2%)	0,69 (±0,2%)
Mikrohullám-terápia	2400 ± 50	0,125 ± 0,006

A rövidhullám-terápia során kétféle kezelési módszer lehetséges. A **kondenzátorterés módszer**(IX.28. ábra)alkalmazásakor a kezelt testrészt a kezelőkondenzátor két fegyverzete közé helyezzük. A kondenzátorlemezek között váltakozó irányú elektromos tér keletkezik. Mivel egy félperiódus nagyon rövid ideig tart, ezalatt a testben levő töltések nem tudnak jelentősen elmozdulni. A következő félperiódusban a térerősség megfordul, és a töltések az ellenkező irányba indulnak el. Az ily módon „megrezgetett” töltések a kinetikus energiájuk egy részét leadják a környező molekuláknak, így hő keletkezik (lásd a IX.3. megjegyzést).



IX.28. ábra. A kondenzátorterés hôterápiás elrendezés

A **tekeresteres módszer** (IX.29. ábra) alkalmazva a kezelt testrészt a kis menetszámú kezelőtekerecs mágneses terébe kerül. A tekercset a test mellett elhelyezve a testben örvényáramok keletkeznek. Az indukció törvénye szerint egy képzeletbeli zárt görbén végighaladva az indukált feszültség ugyanakkora. Ha ezt a képzelt görbét egy jó vezetőképességű (pl. izom-) szövetben húzzuk meg, akkor a kialakuló áram nagy lesz, ha rossz vezetőben húzzuk meg, akkor pedig ugyanaz az indukált feszültség kisebb örvényáramot indukál. A tekeresteres kezelés tehát az izomszöveteket melegíti jobban.



IX.29. ábra. Örvényáramú tekeresteres kezelés (az egyszerűség kedvéért csak a pácienskör van ábrázolva, az oszcillátor többi része ugyanolyan, mint az előző ábrán)

A kezelés hatékonysága szempontjából fontos technikai kérdés még a pácienskör és az oszcillátor összehangolása. A kondenzátorterés kezelésénél alkalmazott pácienskör is tulajdonképpen egy, a

kicsatolótekeresből és a kezelőkondenzátorból álló rezgőkör. Erre a rezgőkörre „kényszeríti” az oszcillátor a saját elektromos rezgését. A kényszerrezgés akkor lesz a legnagyobb amplitúdójú, ha rezonancia áll fenn, azaz a pácienskör saját frekvenciája megegyezik az oszcillátor frekvenciájával. Az oszcillátor frekvenciáját nem változtathatjuk, hiszen ezek a berendezések nemkívánatos „melléktermékként” elektromágneses hullámokat bocsátanak ki magukból. A kibocsátható hullámok frekvenciáját szigorú szabályok írják elő, hogy készülékeink ne zavarják például a rádióadásokat. A két rezgőkör összehangolása tehát csak a pácienskör rezonanciafrekvenciájának állításával lehetséges. Erre szolgál a páciensköri hangoló kondenzátor, amely a kezelőkondenzátorral párhuzamosan kapcsolva a pácienskör rezonanciafrekvenciáját ráállítja az oszcillátor frekvenciájára. Ekkor kapjuk a legnagyobb melegítőhatást. Hasonló hangoló kondenzátort szokás elhelyezni a tekeres teres pácienskörben is a kicsatolt teljesítmény maximalizálása érdekében.

A sugárzás behatolási mélysége a szövetekbe a frekvencia növekedésével csökken, tehát a rövidhullámú kezelés során lehet a legmélyebbre hatolni, a deciméteres, illetve a mikrohullám ennél lényegesen kisebb mélységbe jut a szervezetben. A deciméterhullám-, ill. a mikrohullám-kezelés során azonban speciális, antennából és fókuszálóreflektorból álló sugárzófejet használnak. Ezzel a **sugárteres módszerrel** kisebb területen nagyobb felmelegedést lehet elérni, mint az előbb említett egyéb módszerekkel (IX.30. ábra).

A sugárzás behatolási mélysége a szövetek víztartalmától is erősen függ. Az alacsony víztartalmú szövetek (zsír, csont) esetében a behatolási mélység minden frekvencián kb. egy nagyságrenddel nagyobb, mint a magas víztartalmú szövetek (izom, bőr, agy) esetén.

A nagyfrekvenciás hőterápiás módszereket régebben csak mozgásszervi és belső szervi gyulladásos betegségek kezelésére, illetve fájdalomcsillapításra használták. Az utóbbi években a felhasználási terület kibővült. A módszert alkalmazzák daganatok hipertermiás kezelésére. Ennek során a daganat (nem az egész test) hőmérsékletét 42-43,5 °C-ra növelik és ez a sejtek pusztulását eredményezi. (A 42 °C-nál alacsonyabb hőmérséklet nem kellően hatékony, a túl magas hőmérséklet pedig a környező egészséges szöveteket is károsítja.) A hipertermiás kezelést gyakran kemoterápiával vagy ionizáló sugárzással kombinálják. A hipertermia ugyancsak felhasználható a jóindulatú prosztata megnagyobbodás kezelésére.

A mikrohullámot felhasználhatják a szűkült koszorúerek tágítása során. A hőkezelés egyidejű alkalmazása csökkentheti a mechanikai kezelés szövődeményeit. A szívritmuszavarok egyes típusai ugyancsak kezelhetők a kóros ingervezetési utak, vagy fókuszpontok lokalizált hődenaturációjával.



IX.30. ábra. Mikrohullámú terápiás készülék

IX.3. megjegyzés. A keletkező Joule-hő a következőképpen becsülhető:

$$Q = \frac{U^2}{R} t = \frac{U^2}{\frac{\rho l}{A}} t = \frac{U^2}{l^2} \sigma l A t = E^2 \sigma V t,$$

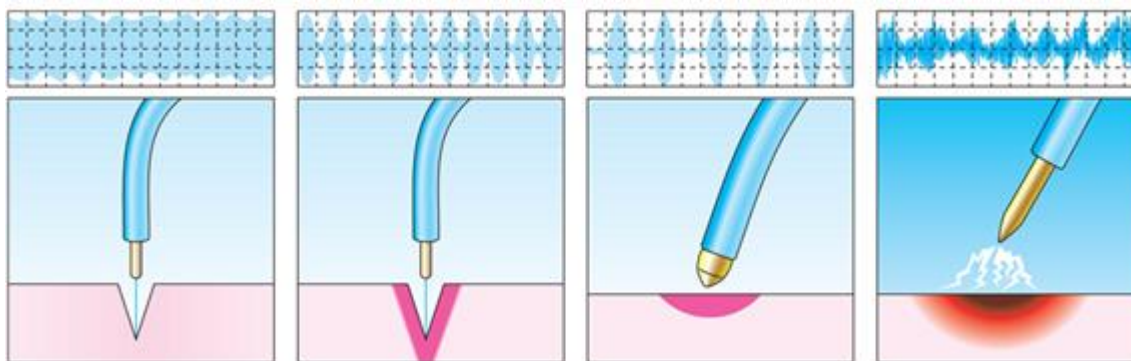
ahol Q a V térfogatban t idő alatt keletkezett hő. R az l hosszúságú A keresztmetszetű ρ fajlagos ellenállású szövetdarab ellenállása. U ezen a szöveten eső feszültség, $E = U/l$ ugyanitt az elektromos térerősség. $V = lA$ a szövetdarab térfogata, $\sigma = 1/\rho$ a szövet fajlagos vezetőképessége.

5.3. IX/5.3. Elektromos sebészet

Az elektromos energia klasszikus sebészeti felhasználása szintén a már előbb említett kondenzátorteress módszerrel történik. Itt azonban – az ún. unipoláris elrendezés esetén – a kondenzátor két lemeze nagyon különbözik egymástól. A páciens bőrére felragasztanak egy nagyfelületű semleges elektródot, a vágás pedig a másik, nagyon kis felületű vágóelektróddal történik (IX.31. ábra). A kis felület miatt a vágóelektróda környezetében igen nagy lesz az áramsűrűség (az egységnyi keresztmetszetre vonatkoztatott áramerősség), és ez lokálisan nagy hőfejlődést okoz, ami lehetővé teszi a vágást. A nagymértékű felmelegedés a környező szövetekben koagulációt is előidéz, ami meggátolja a vérzést. A módszer nagy előnye, hogy nincs szükség a kis erek egyenkénti lekötésére vérzéscsillapítás céljából. Az alkalmazott elektromágneses hullámforma, a vágóelektróda kialakítása, távolsága a szövettől és a leadott teljesítmény (mely több száz W lehet) lényegesen befolyásolja az elért szöveti hatást (lásd IX.32. ábra). Az utóbbi időben elterjedten alkalmazzák endoszkópos sebészeti beavatkozások során is. Az endoszkópon keresztül bevezetett elektróddal kisebb elváltozások leégetésére vagy pl. nyeles polipok levágására is mód van.



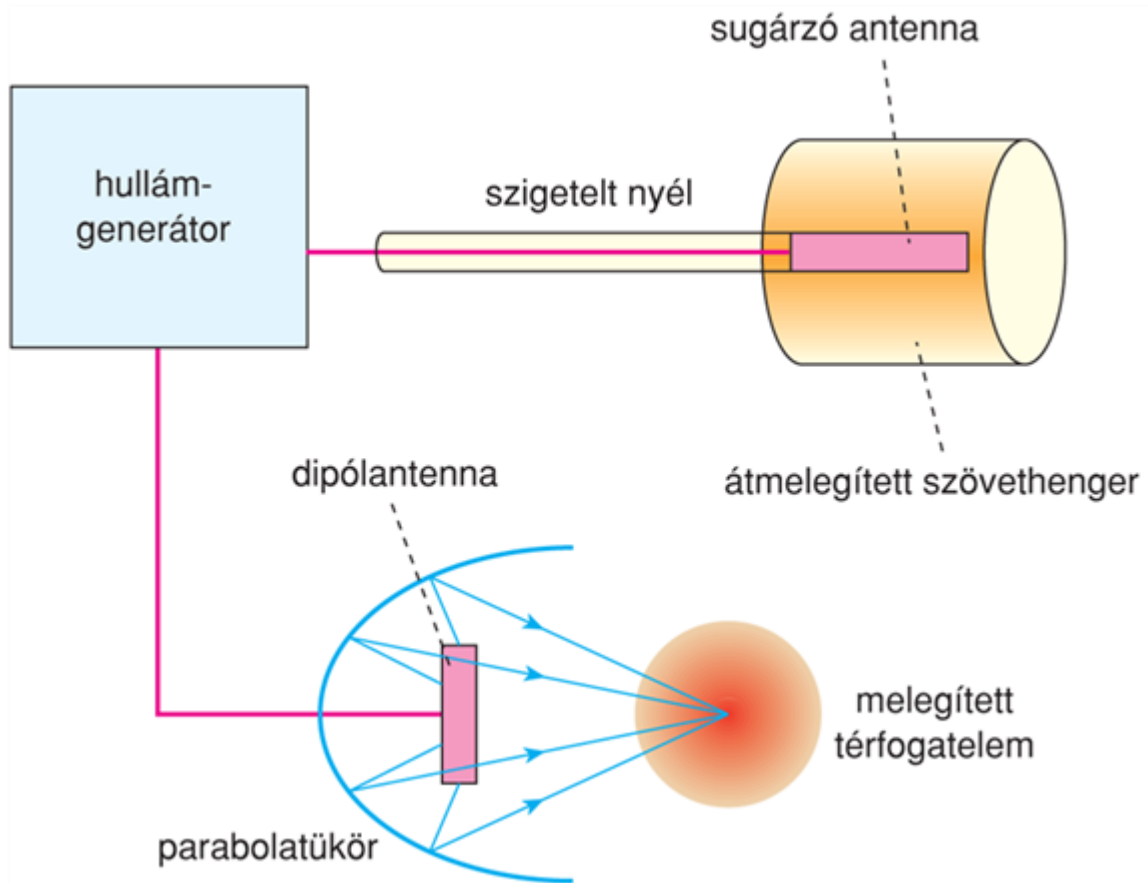
IX.31. ábra. Elektromos sebészeti készülék



IX.32. ábra. Az alkalmazott EM hullámforma, a vágóelektroda kialakítása és a leadott teljesítmény (mely több száz W lehet) lényegesen befolyásolja az elért szöveti hatást

Újabban sikerrel alkalmazzák az ultranagy-frekvenciás elektromágneses teret a test belsejében található gócok (primer és metasztatikus daganatok) hőkoagulációval történő elpusztítására is. Ehhez gyakorta szintén unipoláris elrendezést alkalmaznak, de a kezelőelektrodót, mely szigetelt nyél végén egy jól vezető vékony hengerből áll, minimálisan invazív módszerekkel (endoszkóp, száloptika) a megsemmisítendő céltérfogatra vezetik, hogy ott – viszonylag kis teljesítményleadással (50–200 W) – egy szimmetrikus szövethengerben lokális melegítést érjenek el. Ennél a technikánál az abszorpció miatt a kezelt szövethenger sugara kb. 16 mm lehet. Figyelembe kell venni a szövethenger és környezete véráramának hűtőhatását, mely konvekció és kondukción keresztül lép fel: rossz keringésű daganatok vagy pl. cirrózisos májban a metasztázisok jobban melegednek. Ha a szondafej és környezete túlmelegszik, 95 °C felett hő- és áramszigetelő tulajdonságú égett szövettömeg keletkezik. Ezt elkerülendő, bevett gyakorlat a szondafej hűtése jeges vízzel és szokásos a hideg steril puffer áramoltatása is az elektródból a szövetbe, ami egyben segítheti az áramvezetést is, de bizonytalanná teszi a kezelt terület határait. Pulzáló hullámformák és bipoláris, vagy multiplex elektródok használatával a kezelt térfogat kb. 4-5 cm daganatátmérőig növelhető. A kezelés követésére az UH vagy a CT előnyösebb, mivel a vágáshoz használt elektromágneses tér az MRI-t zavarja.

Hasonló szövetmelegítésre és koagulációra a mikrohullámú sugárzás is alkalmazható. Ez elsősorban a szövetek vízmolekuláiban nyelődik el. A céltérfogatra juttatásához két megközelítési módot alkalmaznak. Hasonlóan a rádiófrekvenciás (RF) kezeléshez, a szövetbe sugárzó antennát vezetnek, de kisebb mélységben fekvő gócok esetén külsőleg is elhelyezkedhet a sugárzó dipólanntenna, melynek hullámait speciális parabolatükörrel fókuszálják a céltérfogatra (IX.33. ábra). Utóbbi esetben a melegített térfogatelem nem henger, hanem forgási ellipszoid. Hátránya az RF-kezeléshez képest a kisebb besugározható térfogat, előnye viszont a rövidebb kezelési idő.



IX.33. ábra. A mikrohullámú kezelés két lehetséges módja: a szövetbe vezetett sugárzó antenna, és a kívülről használható dipólanntenna – parabolatükör kombináció

10. fejezet - X. rész – Az élettudományi kutatómunka fizikai módszerei

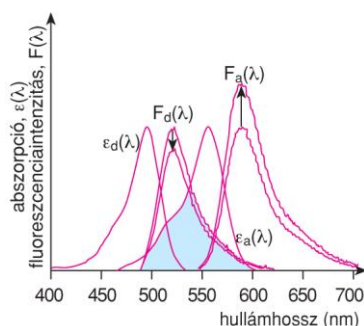
A VI. fejezetben olyan fizikai módszereket soroltunk fel, amelyek a klinikai diagnosztikába beépültek vagy beépülőben vannak. Ebben a fejezetben olyan módszereket tárgyalunk, amelyek jelenleg még elsősorban a kutató-laboratóriumokban nyernek alkalmazást, de természetesen a két alkalmazási terület nem válik el élesen egymástól. Nyilvánvaló cél, hogy a kutatómunkában megismert és különösen hasznosnak tartott technikák lehetőség szerint minél előbb nyerjenek rutinszintű alkalmazást a klinikai diagnosztikában is. Az élettudományok területén elért kutatási eredmények a patológiai problémák molekuláris szerkezeti (DNS-, fehérje-, membránszerkezeti) alapjainak jelentőségére irányították a figyelmet. Az alábbiakban tárgyalt módszerek is főként a molekulák, makromolekulák, makromolekuláris komplexek szerkezetének feltárását szolgálják.

1. X/1. Optikai spektroszkópiai módszerek

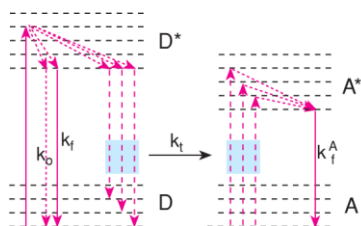
1.1. X/1.1. Lumineszcencia-spektroszkópián alapuló eljárások

1.1.1. X/1.1.1. Förster típusú rezonancia-energiaátadás (energiatranszfer)

A Förster típusú energiaátadás (az angol elnevezés alapján röviden FRET) a gerjesztett állapotban lévő fluoreszkáló molekula (donor), valamint egy megfelelő spektroszkópiai paraméterekkel rendelkező molekula (a továbbiakban akceptor) között dipól-dipól kölcsönhatás révén, sugárzás nélküli energiaátadás formájában jön létre. Az energiaátadás feltétele, hogy a donor–akceptor távolság kb. 2 és 10 nm közé essék, valamint a donor emissziós spektruma és az akceptor abszorpciós spektruma átfedést mutasson (X.1. ábra). Az átfedés azt jelenti, hogy a két Jablonski-sémában (lásd X.2. ábra) vannak azonos energiakülönbséggel jellemzett átmenetek. Az energiaátadás ezen átmenetek átmeneti dipólusmomentumai (lásd VI/3.3.2.) közötti kölcsönhatás révén valósul meg (rezonancia). A jelenség következtében a donor gerjesztése után a relaxáció az akceptor molekula emissziója révén jön létre.



X.1. ábra. Egy donor-akceptor pár abszorpciós (gerjesztési) és emissziós spektruma: $\epsilon_d(\lambda)$ és $F_d(\lambda)$ a donor abszorpciós, illetve emissziós spektruma, $\epsilon_a(\lambda)$ és $F_a(\lambda)$ az akceptor megfelelő spektrumai



X.2. ábra. A FRET Jablonski-sémája

Az energiaátadás jellemző mennyisége az átmenet sebességi állandója (k_t), ami több paraméter függvénye:

$$k_t = \text{konst.} \cdot J(\lambda) n^{-4} k_f R^{-6} \kappa^2$$

(X.1)

Itt az n a donor és az akceptor közötti közeg törésmutatója, k_f a fluoreszcencia-átmenet sebességi állandója, R a donor és az akceptor távolsága, $J(\lambda)$ a donor emissziós spektruma és az akceptor abszorpciós spektrumának átfedését jellemző mennyiség (átfedő „terület”, lásd X.1. ábra), κ^2 az ún. orientációs faktor a donor és akceptor relatív orientációjának függvénye.

A Förster típusú energiaátadás megváltoztatja a fluoreszcencia-élettartamot (τ) és a kvantumhatásfokot (Q) is. k_t értelemszerűen additív módon járul hozzá a meghatározó összefüggések nevezőjéhez, azaz a (VI.40), illetve (VI.36) egyenlet az alábbiak szerint módosul:

$$\tau_{DA} = \frac{1}{k_f + k_{nr} + k_t},$$

(X.2)

$$Q_{DA} = \frac{k_f}{k_f + k_{nr} + k_t},$$

(X.3)

ahol a DA index a donor-akceptor pár jelenlétére utal.

A Förster típusú energiaátadás jellemzésére bevezethetjük a transzfer hatásfokát (E), amit a kvantumhatásfok definíciójával analóg módon úgy definiálhatunk, hogy vesszük az ilyen átmenettel relaxálódó (alapállapotba visszatérő) gerjesztett állapotok számának és az összes gerjesztett állapot számának a hányadosát, vagyis az ilyen átmenet valószínűségét:

$$E = \frac{k_t}{k_f + k_{nr} + k_t} = k_t \cdot \tau_{DA}.$$

(X.4)

A Förster típusú energiaátadás sajátossága, hogy k_t a donor–akceptor távolság hatodik hatványával fordítottan arányos (lásd a X.1 összefüggést), ami lehetővé teszi a molekuláris távolságok meghatározását.

A donor–akceptor távolság (R) meghatározásához vizsgáljuk meg a (X.1) és a (X.4) egyenletet. Összevetésükből látszik, hogy definiálható egy speciális donor–akceptor távolság (R_0), amikor a transzfer hatásfoka (E) pontosan 0,5. A (X.4) alapján látszik, hogy az ehhez a távolsághoz tartozó k_t értéknek ($k_t(0)$) egyenlőnek kell lennie a $k_f + k_{nr}$ értékkel, ami nem más, mint a donor-akceptor távollétében mért élettartamának (τ_D -nek) a reciproka. Eszerint a (X.1) és a fentiek felhasználásával

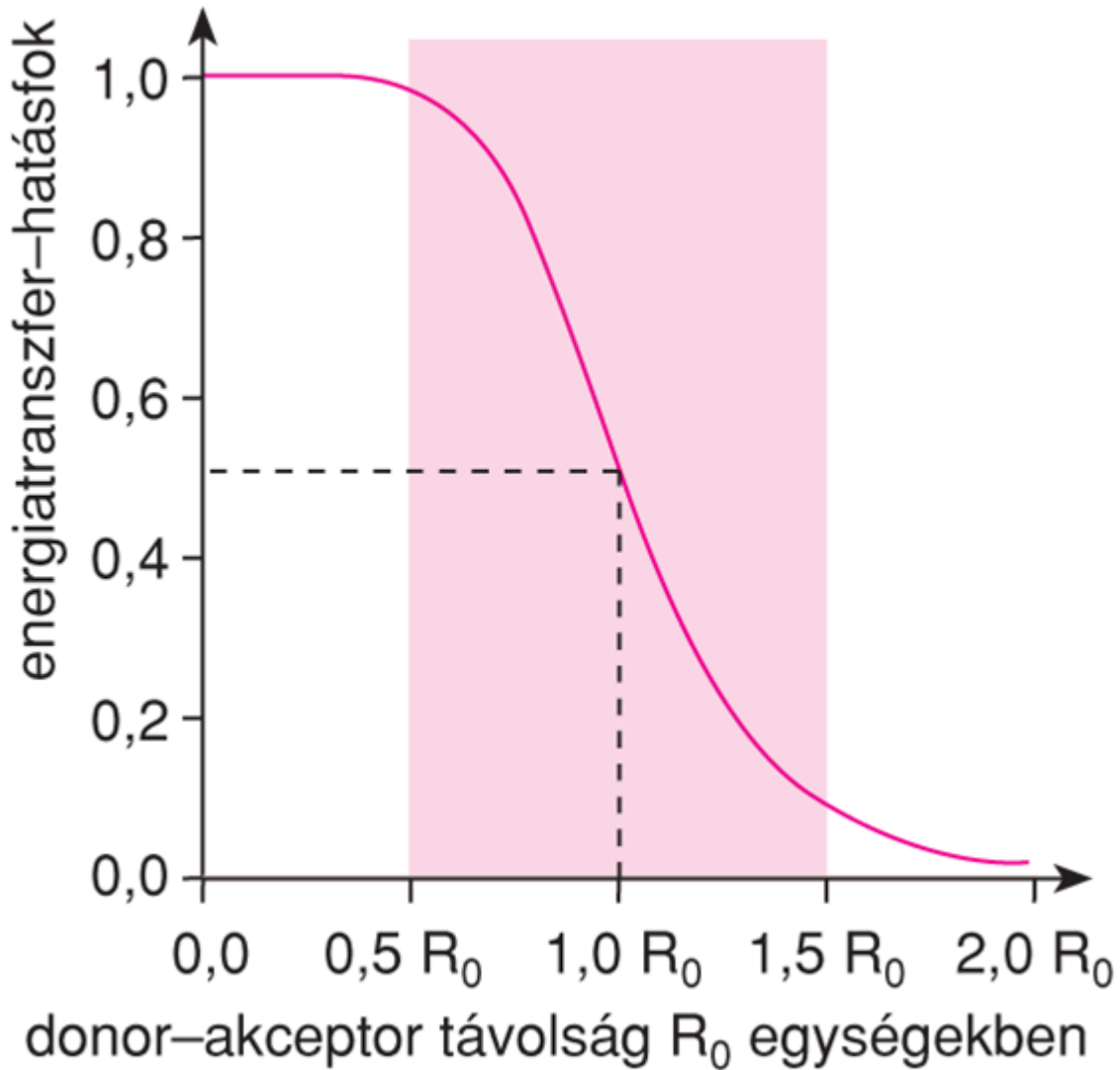
$$\frac{1}{\tau_D} = \text{konst.} \cdot J(\lambda) n^{-4} k_f R_0^{-6} \kappa^2.$$

(X.5)

Innen k_t -re az alábbi összefüggés adódik:

$$k_t = \frac{1}{\tau_D} \frac{R_0^6}{R^6} \quad (\text{X.6})$$

Ez azt jelenti, hogy a transzfer hatásfoka (E) a donor–akceptor távolság függvényében a $0,5R_0$ és $1,5R_0$ közötti intervallumban igen érzékenyen változik (lásd X.3. ábra).



X.3. ábra. A FRET hatásfokának távolságfüggése

Megvizsgálva a (X.6) összefüggést az adódik, hogy az R_0 értéke a donor-akceptor rendszer spektrális sajátosságaitól és a donor-akceptor relatív orientációjától függ. Az n értéke biokémiai rendszerben általában változatlan, a κ^2 értéke pedig mobilis donor és akceptor esetén – a „gyors” mozgás miatti átlagolás következtében – általában $2/3$ -nak vehető. Ez azt jelenti, hogy ugyanazon donor-akceptor pár esetén, nem okoz nagy hibát, ha az R_0 értékét közel változatlannak feltételezzük.

A továbbiakban tehát E meghatározásával az R értéke meghatározható, ami topológiai, sztöchiometriai és egyéb információt szolgáltathat makromolekuláris és szupramolekuláris rendszerekről.

Az E értékét meghatározhatjuk, ha meghatározzuk a donor fluoreszcenciájának élettartamát az akceptor jelenlétében (τ_{DA}), illetve távollétében (τ_D). A két élettartam hányadosa az előzőknek megfelelően:

$$\frac{\tau_{DA}}{\tau_D} = \frac{k_f + k_{nr}}{k_f + k_{nr} + k_t} = \frac{k_f + k_{nr} + k_t - k_t}{k_f + k_{nr} + k_t} = 1 - E,$$

(X.7)

azaz

$$E = 1 - \frac{\tau_{DA}}{\tau_D} \quad (\text{X.8})$$

Míthogy az előzőek szerint (VI/3.3.2. rész) a fluoreszcencia intenzitás az élettartammal egyenesen arányos, az E meghatározása ennek alapján is lehetséges:

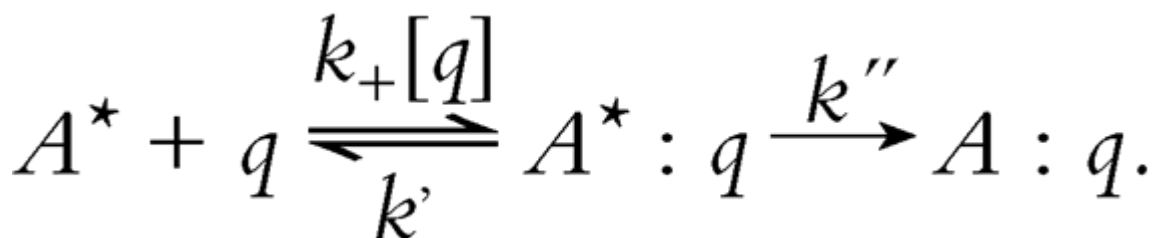
$$E = 1 - \frac{F_{DA}}{F_D} \quad (\text{X.9})$$

ahol az F_{DA} , illetve F_D a donor fluoreszcencia-intenzitása az akceptor jelenlétében, illetve távollétében.

1.1.2. X/1.1.2. Fluoreszcencia-kioltás

Ha fluorofórok tartalmazó oldatban olyan molekulák vagy ionok találhatók, amelyek megfelelő elektronszerkezettel rendelkeznek ahhoz, hogy a gerjesztett állapotban található fluorofórral „ütközve” annak gerjesztési energiáját átvegyék, majd azt valamilyen formában (például hő) disszipálják, akkor azt mint a fluoreszcencia intenzitásának csökkenését figyelhetjük meg, ha a csak fluorofórt tartalmazó minta intenzitásához viszonyítjuk. Ebben az esetben fluoreszcencia kioltásról beszélünk.

Ha folyékony közeget vizsgálunk, akkor az oldatban ütközésen azt értjük, hogy a fluorofór és a kioltó diffúziós folyamatok révén egymás szomszédságába kerülve s abban a pozícióban vibrációs és rotációs mozgást végezve kb. 10^3 - 10^4 alkalommal ütköznek, mielőtt egymástól eltávolodnak („cage effect”). Az ilyen találkozást az angol irodalom „encounter pair formation” (ütközési komplex) néven említi, ami azt jelenti, hogy bár egy tranzienst komplexről beszélhetünk, kémiai értelemben véve ez nem komplex. Egy ilyen ütközési komplex esetén, ami egy gerjesztett állapotban található fluorofór (A^*) és kioltó molekula (q ; kioltás angolul quenching) között kialakul, létrejöhet az energia átadása. Ezen energia átadásának a valószínűsége az ún. erős kioltók esetén 1., az ún. gyenge kioltók esetében ennél kisebb. A továbbiakban csak az erős kioltókkal foglalkozunk. Ez esetben a következő reakcióséma írható fel:



(X.10)

Az $A^* : q$ ütközési komplex kialakulása bimolekuláris reakcióként kezelhető, ami az A^* és q relatív transzportja (egyszerű esetben diffúzió) révén jön létre. Erős kioltó esetén a $k'' \gg k'$, ezért egy ilyen komplex kialakulása biztosan kioltáshoz, a fluorofór alapállapotba történő „azonnali” visszatéréséhez vezet. Míthogy ez a lehetőség a (VI.40) és (VI.36) által figyelembe vett folyamatokhoz képest egy újabb reakcióutat jelent az $A^* \rightarrow A$ átmenet számára, ilyen esetben (hasonlóan a Förster típusú energiaátadás esetéhez) mind az élettartam, mind a kvantumhatásfok csökken a nevezőben megjelenő új sebességi állandó ($k_+[q]$) megjelenésével:

$$\tau_q = \frac{1}{k_f + k_{nr} + k_+[q]},$$

(X.11)

$$Q_q = \frac{k_f}{k_f + k_{nr} + k_+[q]} \cdot$$

(X.12)

A (X.11) egyenletből következik, hogy ha egy fluorofór élettartamát vizsgáljuk különböző kioltókoncentrációk ($[q]$) esetén, beleértve a $[q] = 0$ értéket is, akkor:

$$\frac{\tau_0}{\tau_q} = 1 + k_+\tau_0[q] = 1 + K_{SV}[q]$$

(X.13)

lineáris összefüggést kapunk, ahol τ_0 a kioltó távollétében, τ_q a $[q]$ koncentrációban jelen lévő kioltó esetén mért élettartam. A k_+ a két reaktáns (fluorofór és kioltó) relatív transzportját (például a diffúziós állandók összegét) és a fluorofór hozzáférhetőségét egyaránt tartalmazó állandó. Így a τ_0/τ_q értékét a $[q]$ függvényében ábrázolva egy, az 1-ből kiinduló egyenest kapunk, aminek meredeksége az ún. Stern–Volmer-állandó (K_{SV}):

$$K_{SV} = k_+\tau_0 \quad (\text{X.14})$$

A K_{SV} , illetve k_+ értéke információt adhat például egy fehérje Trp-csoportjának az oldószer számára való hozzáférhetőségéről (vízoldékony kioltó alkalmazása esetén) vagy annak változásáról, s hasonlóan a töltésváltozásról (ionos kioltó alkalmazása esetén). Ezen keresztül pl. fehérjék konformációváltozásaira következtethetünk.

A fluoreszcencia-intenzitás és élettartam között fennálló egyenes arányosság következtében a (X.13) egyenlettel analóg egyenlet adható meg a K_{SV} „steady-state” körülmények között való meghatározására is:

$$\frac{F_0}{F} = 1 + k_+\tau_0[q] = 1 + K_{SV}[q].$$

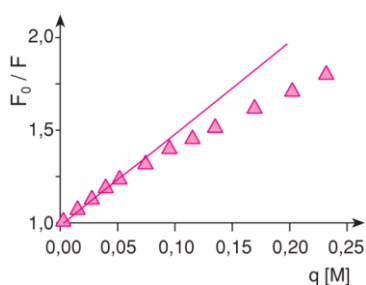
(X.15)

Mínt hogy a „steady-state” mérések műszerigénye jóval kisebb, a (X.15) egyenlet alkalmazása a gyakoribb. Ilyenkor viszont további problémák fellépésével lehet számolni.

Inhomogén fluorofór populáció esetében, mint például több triptofánt tartalmazó fehérje esetében a triptofán fluoreszcencia ionos kioltóval való kioltása azt eredményezheti, hogy van olyan a fehérje belsejébe temetett triptofán(ok)tól származó fluoreszcencia-hányad, amely a kioltó számára nem hozzáférhető. Ekkor a mérési eredmények nem követik a (X.15) egyenletet, eltérnek a lineáristól (X.4. ábra).

Az előzőekben az ún. „dinamikus” kioltást tárgyaltuk. Ez annyit jelentett, hogy a kioltó távollétében gerjesztett állapotba kerülő fluorofór több úton is alapállapotba kerülhet, s ezek közül csak egy az, mely során még alapállapotba kerülése előtt ütközik a kioltóval. Megfigyelhető azonban egy másik jelenség, a „statikus” kioltás

is. Mint előbb már tárgyaltuk, az ütközési komplex rendelkezik egy átlagos élettartammal, ami független attól, hogy a fluorofór alap- vagy gerjesztett állapotban található. Ennek megfelelően az $A : q$ ütközési komplex is létezik, ami az alapállapotban található fluorofór és a kioltó ütközési komplexe. Az ilyen komplexeket szokásos „sötét” komplexnek nevezni. Ha ugyanis a fluorofór ilyen állapotban kerül gerjesztett állapotba, akkor (erős kioltó esetén) az energiáját „azonnal” átveszi a kioltó, és így nincs lehetősége a többi reakcióút, így például a fluoreszcencia-átmenet igénybevételére. Ez azt jelenti, hogy a (X.15) összefüggés csak azokra a fluorofórokra igaz, amelyek a gerjesztés pillanatában nem képeznek ütközési komplexet (nincsenek kontaktusban a kioltó molekulák valamelyikével). Számtalan példa van arra, hogy a kioltás mechanizmusa nem egyszerű. Ilyen esetekben a megfelelő, a mérési adatokkal kompatibilis kiegészítő kísérleti adatok vezethetnek el a megoldáshoz.



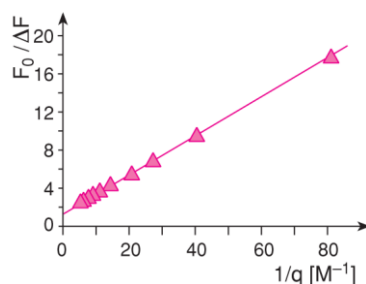
X.4. ábra. A lipáz A enzim triptofán-csoportjai által emittált fluoreszcencia jodidionnal való kioltásának Stern-Volmer ábrázolása

A kioltó számára nem egyformán hozzáférhető kromofórok esetén alkalmazható megfontolások

Az alábbiakban a legegyszerűbb esetet tárgyaljuk. Feltételezzük, hogy a kromofórok két csoportba oszthatók: hozzáférhető és nem hozzáférhető kromofórok. Ez esetben felírható, hogy a teljes F_0 intenzitás $(1-\alpha)F_0$ hányada ($0 < \alpha < 1$) nem kioltható (nem hozzáférhető), míg az αF_0 kioltható intenzitáshányad követi a (X.15) egyenletet. Ennek megfelelően a $[q]$ koncentrációban jelen lévő kioltó esetén a fluoreszcencia-intenzitás csökkenése:

$$\Delta F = F_0 - F = \alpha F_0 + (1 - \alpha)F_0 - \alpha F_0 \frac{1}{1 + K_{SV}[q]} - (1 - \alpha)F_0 = \alpha F_0 \frac{K_{SV}[q]}{1 + K_{SV}[q]}$$

Ez az ún. módosított Stern–Volmer-egyenlet vagy Lehrer-egyenlet. Ha a fenti közelítés jól írja le a rendszert, akkor az $F_0/\Delta F$ mennyiség az $1/[q]$ függvényében egyenest ad. (lásd 1. ábra) Az egyenes tengelymetszetéből és meredekségéből a fluoreszcencia intenzitás kioltható hányada (α) és a hozzá tartozó K_{SV} kioltási állandó értéke egyaránt meghatározható.



1. ábra. A lipáz A enzim triptofán-csoportjai által emittált fluoreszcencia jodidionnal való kioltásának módosított Stern–Volmer ábrázolása

A statikus és dinamikus kioltás együttes figyelembevétele

Legyen P annak a valószínűsége, hogy egy fluorofór nincs kontaktusban kioltó molekulával, akkor a (X.15) helyes alakja:

$$P \frac{F_0}{F} = 1 + k_+ \tau_0 [q] = 1 + K_{SV} [q]. \quad (1)$$

A P meghatározásának egyik lehetősége a Poisson-eloszlás alkalmazása. Eszerint a P definiálható úgy, mint annak a valószínűsége, hogy egy adott V térfogatban pontosan 0 kioltó molekula tartózkodik. A V itt a (fluorofór és a kioltó átmérőjével megadható) térfogat, amelyen belül tartózkodó kioltó kontaktusba kerül a fluorofórral. A P értéke ekkor a $[q]$ függvényében

$$P = e^{-V[q]} \quad (2)$$

alakban adható meg, s innen az (1) átrendezett alakja:

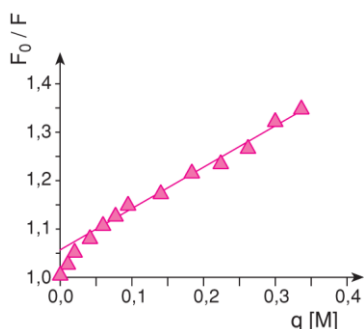
$$\frac{F_0}{F} = e^{V[q]} (1 + K_{SV} [q]). \quad (3)$$

Tekintve hogy $V[q]$ általában sokkal kisebb, mint 1, az e^x sorfejtését felhasználva s a magasabb rendű tagokat elhanyagolhatóságuk okán elhagyva ($e^x \approx 1 + x$, ha $x \ll 1$), az

$$\frac{F_0}{F} = 1 + (K_{SV} + V) [q]. \quad (4)$$

alakra jutunk. Ez a forma azt jelenti, hogy – bár a V értéke általában a K_{SV} értékének kicsiny (kb. 10%) hányada – „steady-state” körülmények között a K_{SV} értéke egyedül nem vagy csak pontatlanul határozható meg. Mivel K_{SV} és V a különböző fizikai és fizikokémiai paraméterektől (például hőmérséklet, viszkozitás stb.) különböző módon függ, a $V + K_{SV}$ összeg meghatározása csökkenti a módszerrel szerezhető információ mennyiségét. (További problémát okozhat a „statikus” kioltás jelenléte, ha V nagyobb és a (4) egyenletet eredményező sorfejtés nem engedhető meg. Ez esetben a (3) formát követi a kioltási görbe, vagyis az egyenestől ($1 + K_{SV}[q]$) felfelé mutató eltérést mutat.)

A következőkben kiderül, hogy időfüggő mérések esetén (például a τ meghatározásánál) az emittált fluoreszcencia időfüggését határozzuk meg valamilyen módon. Ennek megfelelően a sztatikus kioltást eredményező „sötét komplex” jelenléte – lévén, hogy az ilyen komplexben lévő fluorofór gerjesztése nem jár fotonemisszióval – nem befolyásolja a mérhető élettartam idejét. Ezért a statikus kioltás jelenléte nem torzítja az élettartam meghatározásán alapuló kioltási vizsgálatok eredményét, azaz a (X.13) egyenlet a sötét komplex jelenlétében is változatlan formában alkalmazható a dinamikus kioltásra. Itt megjegyezni, hogy (homogén fluorofórpopuláció esetén) a fentieknek megfelelően „steady-state” és időfüggő kioltási kísérletek párhuzamos végzésével a V és K_{SV} értéke külön-külön is meghatározható, minthogy a (X.13) egyenletből a K_{SV} , s a (4) egyenletből a $V + K_{SV}$ értéke a meghatározó paraméter.



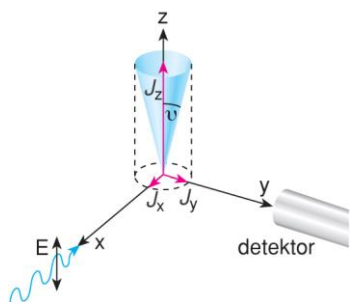
2. ábra. A foszforiláz b-hez kötött koenzim, a piridoxál-foszfát fluoreszcenciájának kioltása jodid-ionnal (q a kioltókoncentráció)

A fentiekben tárgyaltaknál bonyolultabb képet s ennek megfelelően bonyolultabb leírást kapunk, ha például a statikus komponens hatását vizsgáljuk inhomogén – nem teljesen kioltható – populáció esetén. Egy másik példát szemléltet a 2. ábra, ahol a foszforiláz b koenzimje, a piridoxál-foszfát (PLP) által emittált fluoreszcencia jodidionnal való kioltási görbéje látható. Ebben az esetben a görbe lefutása két párhuzamos kioltási út feltételezésével írható le: az egyik kioltási út a PLP-hez közeli helyre kötődő ion általi kioltás, a másik pedig a nem kötött (szabad) ion kioltása. Nagyobb kioltó- (ion-) koncentrációnál a kötőhely telített, így itt csak a szabad kioltó hatása érvényesül, míg az ez alatti koncentrációtartományban a két hatás együttesen jelenik meg.

1.1.3. X/1.1.3. A fluoreszcencia-polarizáció mérése és alkalmazásai

Ha a VI.26. ábrán bemutatott fluorimétert kiegészítjük két polarizátorral, az egyiket az M_1 monokromátor, a másikat az M_2 monokromátor és a minta (S) közé illesztjük, akkor polarizált megvilágítással detektálhatjuk a fluoreszcencia tetszőleges (az emissziós útba helyezett polarizátor segítségével beállítható) síkban polarizált komponensét.

Ha vertikálisan poláros fényt alkalmazunk a megvilágításra, akkor a X.5. ábrának megfelelően a mintában elsődlegesen a z tengellyel párhuzamos vertikális abszorpciós vektorral rendelkező fluorofórok kerülnek gerjesztett állapotba (a gerjesztő fény x irányú és az x - z síkban polarizált, a detektálás az y tengellyel megegyező irányú). A fotoszelekciónak megfelelően, a gerjesztett állapotú fluorofórok a z tengely köré rajzolható igen kis kúpszögű (?) forgáskúpon belül helyezkednek el. Ekkor az emissziós oldalon elhelyezkedő polarizátor segítségével kiválaszthatjuk például az emisszió J_{VV} , illetve J_{VH} komponensét a polarizátor vertikális, illetve horizontális pozícióba állításával. Ha egy „fagyott” ($T = 0$ °K) rendszert vizsgálunk, akkor azt várjuk, hogy az emittált fény (fluoreszcencia) erősen polarizált lesz, azaz a VI.43. összefüggés alapján definiált p polarizációfok nagy ($J_{VV} > J_{VH}$).



X.5. ábra. A vertikálisan (x - z síkban) polarizált fényt abszorbeáló molekulák abszorpciós vektorának eloszlása a θ félnyílásszögű kúpon belül

A polarizációhoz hasonló paraméter az **emissziós anizotrópia** (r):

$$r = \frac{J_{VV} - J_{VH}}{J_{VV} + 2J_{VH}} \quad (\text{X.16})$$

A X.6. ábrán látszik, hogy az adott (vertikálisan polarizált) megvilágítással:

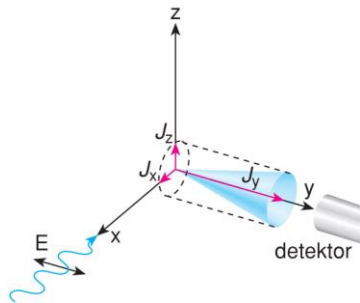
$$J_x = J_y \text{ (X.17)}$$

s eszerint az anizotrópia esetében a nevező (a normálási faktor) az intenzitás három komponensének összege, vagyis a teljes intenzitás. Ez az oka, hogy míg a polarizáció nem, addig az anizotrópia additív, azaz J_1 , illetve J_2 fluoreszcencia intenzitású jelen lévő fluorofórok esetében a mérhető anizotrópia (r):

$$r = \frac{J_1}{J_1 + J_2} r_1 + \frac{J_2}{J_1 + J_2} r_2,$$

(X.18)

ahol az r_1 és r_2 az egyes fluorofórok anizotrópiája.



X.6. ábra. A horizontálisan (x - y síkban) polarizált fényt abszorbeáló molekulák abszorpciós vektorának eloszlása

Az eddigiekben „fagyott” rendszerről, azaz mozdulatlan fluorofórok esetéről tárgyaltunk. $T \neq 0$ esetén azonban a fluorofórok rotációs diffúziós mozgást végeznek, az emissziós vektorok iránya random módon elfordul (szétszóródik), ami a X.5. és X.6. ábra forgáskúpjának „kiszélesedését” (a ? növekedését) eredményezi. Ez azzal jár, hogy az J_z és J_x különbsége s így a polarizáció és anizotrópia értéke csökken. Ennek mértéke attól függ, hogy a gerjesztett állapot élettartama (τ) alatt milyen mérvű a fluorofórok elfordulása, amit a rotációs diffúzió szab meg, s eszerint az átlagos elfordulás mértéke annál nagyobb, minél magasabb a hőmérséklet s minél kisebb a környezet viszkozitása. Ezt fejezi ki a Perrin-egyenlet, miszerint

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{r_0} \left(1 + \frac{kT}{V\eta} \tau \right),$$

(X.19)

ahol r az anizotrópia, T az abszolút hőmérséklet, k a Boltzmann-állandó, V a rotációs diffúziós mozgást végző objektum térfogata, η a viszkozitás, τ pedig a fluorofór élettartama. Látható, hogy r_0 a $T/\eta = 0$ értékre jellemző ún. határanizotrópia, amely a mozdulatlan fluorofórra jellemző. Ha a fluorofór abszorpciós és emissziós vektora egybeesik, az r_0 értéke 0,4. Eszerint ha ábrázoljuk az $1/r$ értéket a T/η függvényében, akkor egy 0,4 értékről kiinduló egyenest kapunk, amelynek meredekségéből a τ ismeretében meghatározhatjuk a rotációs Brown-mozgást végző egység térfogatát.

Korrekciós faktor

A polarizáció, illetve anizotrópia meghatározásához figyelembe kell venni, hogy a készülék (monokromátor, detektor) nem azonosan érzékeny a vertikálisan és a horizontálisan polarizált fényre. Ez azt eredményezi, hogy a mért J_{VV} és J_{VH} értékek közvetlenül nem hasonlíthatók össze. Erre az esetre szükséges bevezetni egy G korrekciós faktort:

$$G = \frac{J_{HV}}{J_{HH}}.$$

A korrekciós faktor jól jellemezhető a X.6. ábra segítségével. Horizontálisan poláros fényvel való gerjesztés esetén ugyanis a gerjesztett állapotú fluorofórok egy, az y tengely körüli forgáskúpon belül helyezkednek el, így a J_z és J_x értéke azonos ($J_z = J_{HV}$, $J_x = J_{HH}$). Ezért a hányadosuk egytől mért eltérése a készülék torzítása, amit korrekcióba véve a polarizáció, illetve anizotrópia helyes (korrigált) értéke:

$$p = \frac{J_{VV} - GJ_{VH}}{J_{VV} + GJ_{VH}} \quad \text{illetve} \quad r = \frac{J_{VV} - GJ_{VH}}{J_{VV} + 2GJ_{VH}}.$$

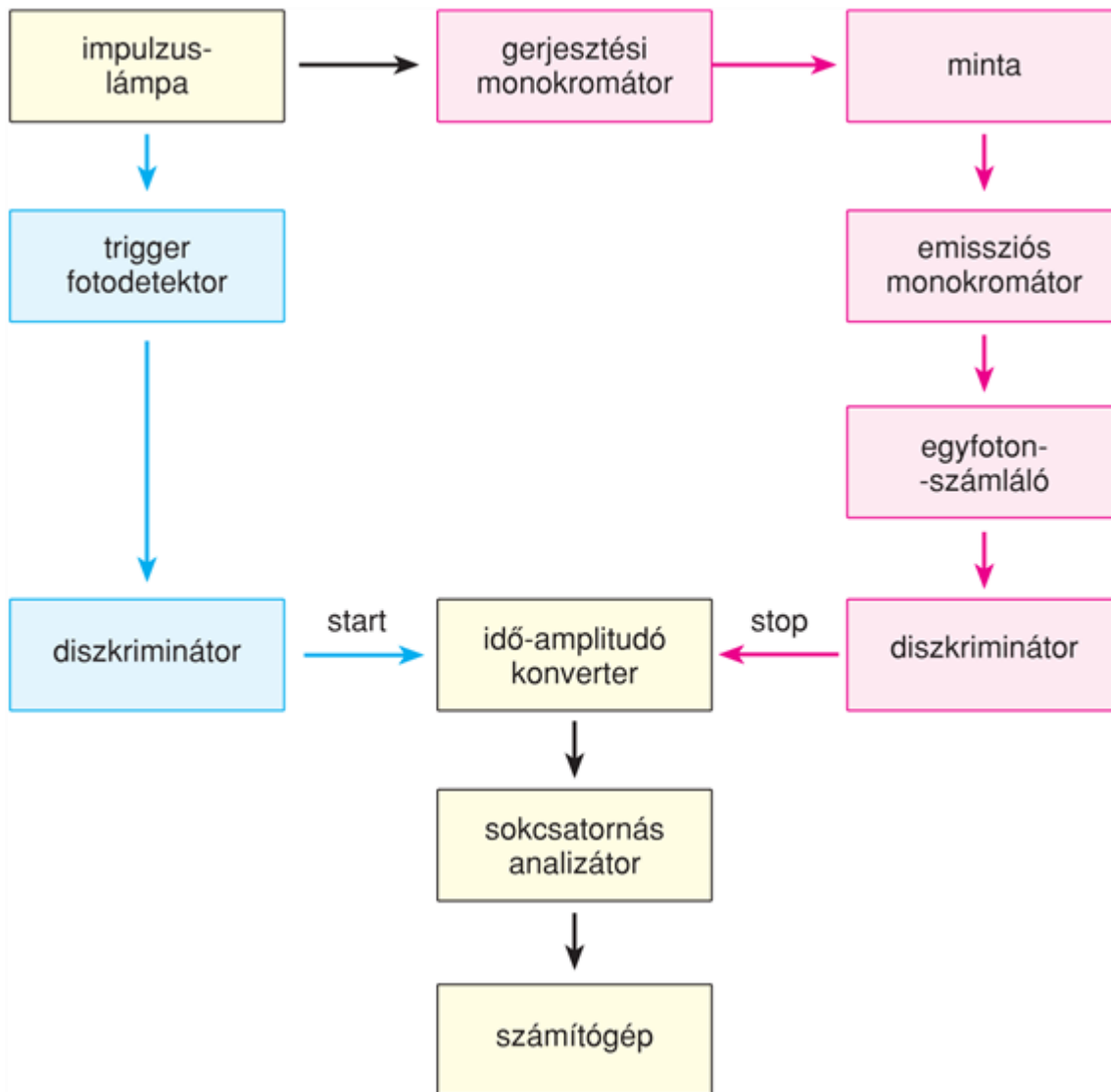
1.1.4. X/1.1.4. Időfüggő fluoreszcencia-paraméterek meghatározása

A fluoreszcencia-élettartam és az emissziós anizotrópia időfüggése (lásd VI/3.2.2.) a „steady-state” mérési eredményekhez képest új információforrást jelent.

Tekintve hogy a fluoreszcencia a nanoszekundumos időskálán lejátszódó folyamat, időbeli kinetikájának követése speciális eljárásokat igényel, amelyeket itt röviden ismertetünk. A következő három módszer mindegyike alkalmas a fluoreszcencia-lecsengés (élettartam) meghatározására, s megfelelő polarizátorok alkalmazásával az anizotrópia-lecsengés ($r(t)$) követésére is.

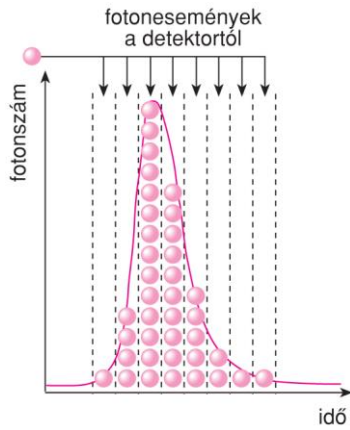
Időkorrelált egyfoton-számlálás

Ha egy rövid élettartamú (ps) fényimpulzust alkalmazunk egy fluorofórokot tartalmazó minta gerjesztésére, és egy detektorral mérjük a gerjesztés után a detektorra érkező első foton beérkezése és a gerjesztés között eltelt időt, akkor egy diagramon ábrázolhatjuk a beérkezési idők gyakoriságát. Ez a diagram megegyezik a fluoreszcencia-lecsengés időfüggésével. Egy ilyen készülék blokkdiagramját mutatja a X.7. ábra.

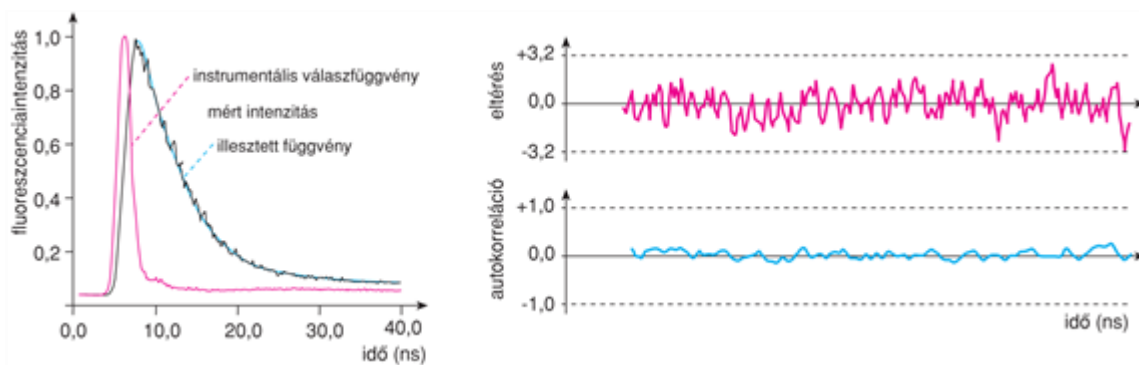


X.7. ábra. Időkorrelált egyfoton-számlálás. A rövid fényimpulzust adó lámpa – a monokromátor által kiválasztott hullámhosszú – fényimpulzusa gerjeszti a fluorofórokat, s egy külön úton (trigger fotodetektor) jelt ad az idő-amplitúdó konverter számára. Az idő-amplitúdó konverter erre a (start) jelre időben lineárisan emeli a kimenetén jelen lévő feszültség értékét egészen addig, amíg nem kap stopjelet. Mint az ábrából is látszik, a stopjelet a mintát figyelő egyfoton-számláló szolgáltatja, ami a mintáról érkező első foton megjelenésére reagál. A stopjel után egy elektronika „kiolvassa” az idő-amplitúdó konverter feszültségértékét, és hozzáad egy egységet egy ún. amplitúdóanalízátor feszültség szerint sorba rakott, a kiolvasott feszültségnek megfelelő rekesz tartalmához.

A X.8. ábra azt szemlélteti, hogy milyen időeloszlásban érkeznek a gerjesztés után az első fotonok, ha a minta fényszóró anyagot (például glikogént) tartalmaz. Ez az eloszlás tulajdonképpen a lámpa intenzitásának az időbeni eloszlása, minthogy fényszórás esetében nincs időbeni eltérés a mintára beérkező és abból kilépő (szórt) fotonok között. Egy ilyen impulzuslámpa egyetlen impulzusának félérték-szélessége (a maximális intenzitás felénél mért szélesség) tipikusan 1-2 ns. Ebből az is következik, hogy egy fluorofór esetében nem egyértelmű, hogy a t idő után detektált foton mely időpontban gerjesztett fluorofórtól származik (a fluoreszcencia mért időfüggése a fluoreszcencia-emisszió és a „lámpafüggvény” vagy „instrumentális válaszfüggvény” konvolúciója, ahol a „lámpafüggvény” egy fényszóró anyag alkalmazásával mért függvény). A két függvény ismeretében a fluoreszcencia-lecsengés alkalmas illesztési művelet segítségével meghatározható. Egy ilyen mérés eredményét mutatja be a X.9. ábra. Az ábra alsó két panelje a mért és az illesztett görbe különbségét, illetve autokorrelációs görbét ábrázolja (az utóbbi jellemzi azt, hogy a feltételezett lecsengési séma mennyire helytálló).



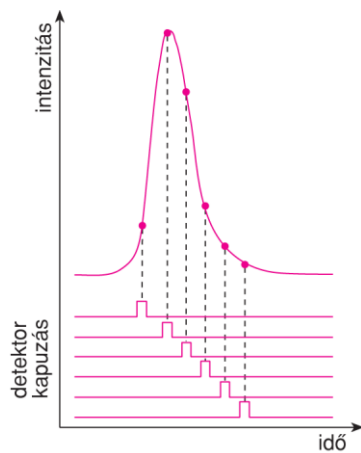
X.8. ábra. A gerjesztés utáni első fotonok időbeli eloszlása (a vízszintes tengely az „időcsatornákat” reprezentálja)



X.9. ábra. Egy tipikus mérési eredmény. A jobb oldali felső panel a mért és az illesztett függvény különbségét, az alsó panel a különbség autokorrelációs függvényét ábrázolja.

Stroboszkópos módszer

Az előző elrendezéshez hasonló a stroboszkópos módszer, bár itt az elektronika nem az első fotonot detektálja, hanem – nagyobb emissziós fotonsűrűséget beállítva – egy, a gerjesztéshez képest különböző időpontokkal kezdve – a X.10. ábrán látható módon – egy-egy Δt ideig méri az összes ezen idő alatt beérkező fotonot. Az előző technikához képest ez a technika jóval kisebb mérési időt igényel, viszont ez az előny esetenként az értékelés bizonytalanságát növelheti.

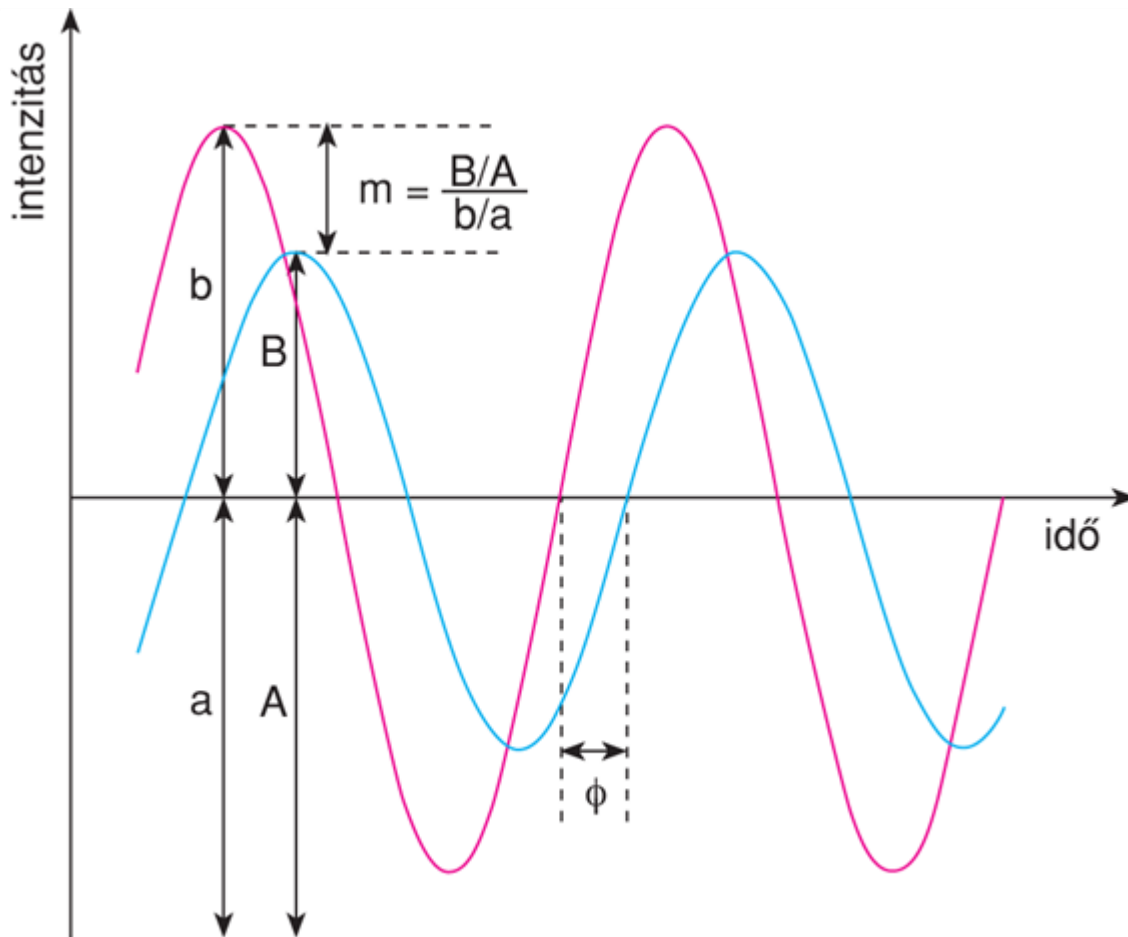


X.10. ábra. A stroboszkóptechnika sémája az instrumentális válaszfüggvény meghatározására. A vízszintes időtengelyen különböző időpontokban megnyíló „kapukat”, a függőleges tengelyen az ezen időkapuk alatt számlált fotonok számát szemlélteti.

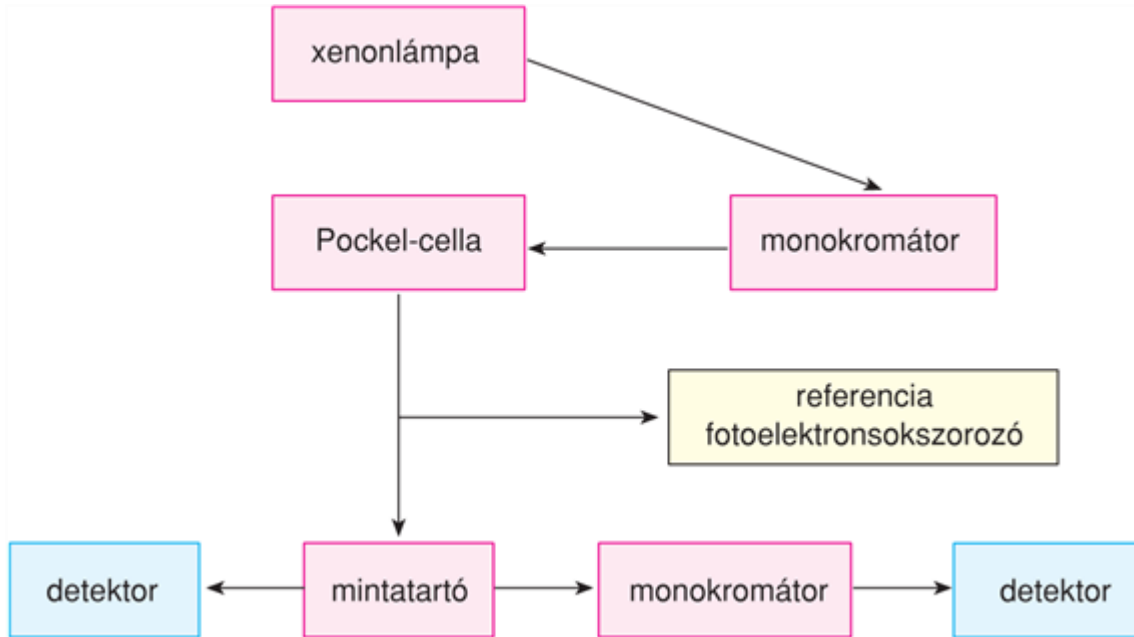
Fázisfluorimetria

Tekintve hogy fluoreszcencia esetén a gerjesztést – nanoszekundumos időskálán – késéssel követi az emisszió, egy szinuszosan modulált intenzitású gerjesztő fény esetén az emittált fluoreszcencia-intenzitás is szinuszosan modulált lesz, de az emisszió egy bizonyos fáziskéséssel követi a gerjesztést. A tény, hogy az emisszió nem egy meghatározott időintervallummal követi a gerjesztést (időben exponenciálisan csökken), azt is eredményezi, hogy az emisszió relatíve kisebb amplitúdóval rendelkezik, mint a gerjesztés, azaz a X.11. ábrán feltüntetett B/A moduláció értéke kisebb lesz, mint a gerjesztő fényre jellemző b/a érték.

A készülék blokkdiagramját mutatja a X.12. ábra (a két detektorblokk azt jelzi, hogy egyrészt monokromátor, másrészt – a másik oldalon – emissziós fényszűrő alkalmazásával is lehet detektálni).



X.11. ábra. A modulált gerjesztés és ugyancsak modulált fluoreszcencia-emisszió viszonya



X.12. ábra. A fázis-fluoriméter bloksémája

A X.11. ábrán feltüntetett Φ fáziskülönbség és az m modulációs mélység segítségével a fluoreszcencia-élettartam meghatározható:

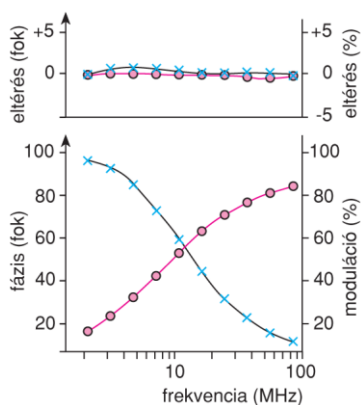
$$\operatorname{tg}\Phi = \omega\tau, \quad (\text{X.20})$$

$$m = \frac{B/A}{b/a} = (1 + \omega^2\tau^2)^{-1/2}, \quad (\text{X.21})$$

(X.21)

ahol az ω a gerjesztő fényintenzitás modulációjának frekvenciája. Bonyolultabb fluoreszcencia lecsengési sémák (például multiexponenciális lecsengés, az élettartam folytonos eloszlása) tanulmányozása azt igényli, hogy a méréseket (az m és Φ meghatározása) több (10-15 vagy több) modulációs frekvencia alkalmazásával is elvégezzük. Ilyen példát mutat be a X.13. ábra.

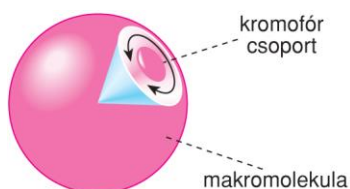
A fentebb ismertetett három módszer mindegyikének megvan az előnye, illetve hátránya a többihez képest, az optimális alkalmazandó technika kiválasztása a vizsgálati rendszer tulajdonságaitól függ (például az időben változó rendszerek esetén jól alkalmazható a stroboszkóptechnika, a fluoreszcencia-élettartamhoz képest hosszú rotációs korrelációs idő tanulmányozására az idő-korrelált egyfoton-számlálás előnyösebb, mint a fázisfluorimetria).



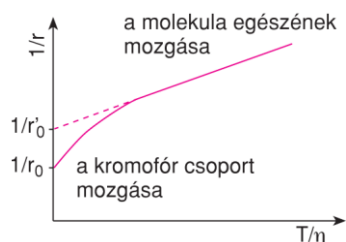
X.13. ábra. A fluoreszcencia-intenzitás fáziskésésének (körök) és modulációjának (x) frekvenciafüggése jelölt Ca-G aktin esetén. A folytonos vonallal jelzett illesztéshez az élettartam Gauss-eloszlását tételezik fel

A kromofór lokális mozgásának elkülönítése a molekula egészének mozgásától

Ha egy makromolekula, például egy fehérje esetét tekintjük, akkor a vizsgált fluorofór lehet természetes (például triptofán, tirozin vagy fenil-alanin, ami a molekula része, vagy fehérjéhez kapcsolódó fluoreszcens koenzim, mint például NAD, PLP stb.), vagy a fehérje valamely csoportjához mesterségesen kötött festék. Ez esetben a kép bonyolultabb, amit az 1. ábra alapján értelmezhetünk.



Egy ilyen rendszer esetén az $1/rT/\eta$ függését a 2. ábra mutatja be.



A két ábra szemlélteti, hogy alacsony T/η értéknél a jóval kisebb „térfogató” fluorofór mozgása dominál, emelve a T/η értéket, egyre jobban „betölti” a rendelkezésre álló teret, míg a nagy térfogatú fehérje mozgása itt elhanyagolható. Egy átmeneti T/η tartomány után viszont már csak a fehérje mozgása dominál (ebben a tartományban a fluorofór csoport eloszlása a rendelkezésre álló térfogatban egyenletes).

A 2. ábrán értelemszerűen egy „steady-state”, azaz a VI.27. ábrán bemutatott készülékkel (állandó megvilágítással) végzett kísérlet sor eredménye látható. A „steady-state” mérések egy időben átlagolt értéknek adnak. Ha azonban a gerjesztést megszüntetjük, nemcsak az emisszió intenzitása, hanem az emisszió polarizációfoka is időben lecsengést fog mutatni. Az 1. ábrán bemutatott rendszer esetében az időfüggő anizotropia $r(t)$ értéke két exponenciális tag összegeként adható meg:

$$r(t) = r_1 e^{-t/\theta_1} + r_2 e^{-t/\theta_2}, \quad (1)$$

ahol r_1 és r_2 megadja a 0 időben mérhető anizotrópia értékét, θ_1 , illetve θ_2 pedig a fluorofór, illetve a makromolekula rotációs diffúzióját jellemző korrelációs idő. Megjegyezzük, hogy bár a fluorofór „mozgásterét” a „steady-state” mérések alapján is jellemezhetjük, az (1) alkalmazásával arról pontosabb képet kaphatunk. Ha feltételezzük, hogy a fluorofór egy forgáskúpon belül mozoghat, akkor a forgáskúp félnyílásszöge (α), és az r_1 és r_2 amplitúdók viszonya az:

$$\frac{r_2}{r_1 + r_2} = \frac{1}{4} (\cos^2 \alpha) (1 + \cos \alpha)^2 \quad (2)$$

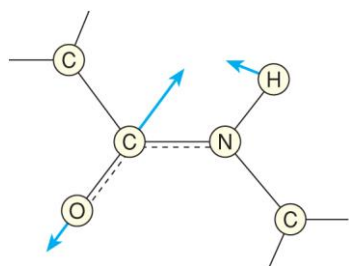
összefüggéssel írható le, ahol r_1 a rövid, r_2 pedig a hosszú rotációs korrelációs időhöz tartozó amplitúdó.

1.2. X/1.2. Infravörös spektroszkópia

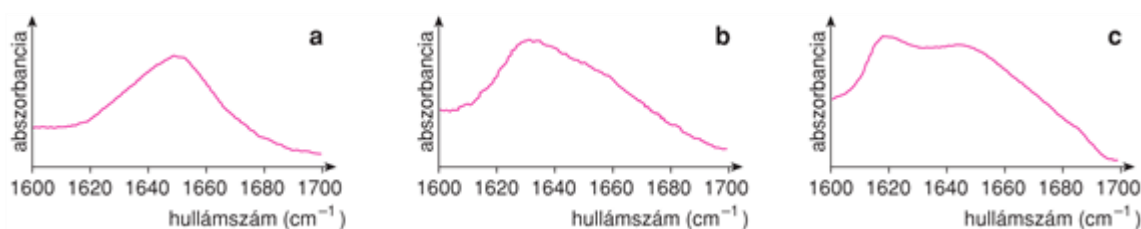
A mérési módszer alapjait a VI. fejezetben írtuk le. Ebben a fejezetben egy példán keresztül szeretnénk bemutatni.

1.2.1. X/1.2.1. Molekuláris biofizikai alkalmazás: fehérjekonformáció meghatározása

A fehérjéknek mint makromolekuláknak természetesen nagyon sok saját rezgésük van. Ezek közül a másodlagos szerkezet által leginkább befolyásolt rezgések az ún. amidrezgések. Ezekben azok az atomok vesznek részt amelyek az aminosavak amidrészéhez tartoznak, azaz amelyek a fehérjelánc gerincét alkotják. A fehérjeszerkezetre leginkább érzékeny módus az ún. amid I rezgés (X.14. ábra), amely nagyrészt a C=O kötés nyújtási rezgése. Mind az α -helix mind pedig a β -redő szerkezet esetén az oxigénatom hidrogénhíd kötését létesít a polipeptid lánc egy másik aminosavjának hidrogénjével. Ez a kötés eltérő erősségű az α és a β szerkezet esetén. Denaturált fehérjéknél a hidrogénkötésben nem a fehérje, hanem az oldószer hidrogénatomja a partner. A hidrogénhíd kötés gyengíti a C=O kötését, és így az amid I rezgés frekvenciája is csökken. A különböző másodlagos szerkezetekhez ezért kissé eltérő rezgési frekvenciák ill. hullámszámok tartoznak. Az amid I rezgés tartománya 1600–1700 cm^{-1} . A X.15. ábrán az α -helix szerkezetű mioglobin ill. az α -krisztallin spektruma látható, amely utóbbiban a β szerkezet dominál. A denaturált fehérje széles amid I sávot mutat, amint az a denaturált mioglobin spektrumán megfigyelhető (X.15c ábra). Itt a széles spektrumra ráül még két oldalsáv (1616, ill. 1685 cm^{-1} -nél), amelyek a hődenaturált fehérjében kialakuló intermolekuláris kötésekre jellemzőek, amelyek a kialakult gélt stabilizálják.



X.14. ábra. A fehérjék amid I rezgése, Ennek a rezgésnek a frekvenciája érzékeny a másodlagos szerkezetre



X.15. ábra. Fehérjék infravörös spektrumai. a) a nagy részben α -helix szerkezetű mioglobin; b) β -redőzött szerkezetű α -kristallin; c) a hődenaturált mioglobin széles spektruma és az aggregációra jellemző két oldalsáv látható

1.2.2. X/1.2.2. Közeli infravörös (NIR-) spektroszkópia

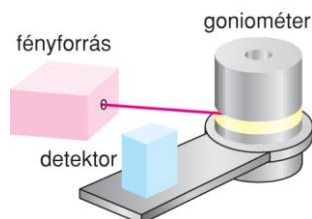
A közeli infravörös fotonok hullámhossza (800 nm–2,5 μ m) kisebb a molekularezgéseket gerjesztő fotonokénál, ezért frekvenciájuk és energiájuk nagyobb. A klasszikus mechanikai kép szerint tehát ez a sugárzás a molekularezgés felharmonikusait tudja gerjeszteni, amelyek az alapfrekvencia egész számú többszörösével rezegnek. Természetesen ezek a felharmonikusok gyengébbek, ezért a NIR abszorpciós vonalak gyengébbek. Éppen ebben van a technika előnye, ugyanis a közép infravörös tartományban a moláris abszorbancia viszonylag nagy, ami miatt nagyon vékony (néhány tized milliméteres vastagságú) mintákat kell alkalmazni. Ha a minta vastagsága nem csökkenthető, akkor lehet előnyös a kisebb moláris abszorbanciával rendelkező NIR-vonalak használata. A közeli infravörös tartományban az egyes testrészeket vagy akár az egész testet is átvilágíthatjuk. Jelenleg már kifejlesztés alatt vannak olyan optikai tomográfias módszerek, melyek a közeli infravörös sugárzást használják.

1.3. X/1.3. Fényszórásmérés

A klinikai módszereknél (lásd VI/3.4.) már megemlítettük a fényszórásmérést mint lehetséges eljárást koncentráció meghatározására. Abban az esetben csupán vagy a továbbhaladó fény intenzitásának csökkenését, vagy a szórt fény intenzitását határoztuk meg és használtuk fel. Ugyanakkor az áramlási citometriában (VI/4. fejezet) is fontos szerepet tölt be a fényszórásjel.

Nagyobb műszerezettség igényű és klinikai gyakorlatban kevésbé, inkább kutatólaboratóriumokban használt módszer a statikus és a dinamikus fényszórásmérés. Mindkét esetben a szórt fény további tulajdonságainak vizsgálatával juthatunk több, részletesebb információhoz az adott részecskéket illetően.

Ezekben az eljárásokban csak igen monokromatikus fényforrás, lézer jöhet szóba. A mintatartó az ún. goniométer, ami a detektor nagyon pontos elhelyezkedését teszi lehetővé. Ugyanis a lézerfénynek és a detektor optika tengelyének egy síkba kell esnie és a mintának a két egyenes metszéspontjában kell lennie (X.16. ábra).



X.16. ábra. A fényszórásmérő vázlata

1.3.1. X/1.3.1. Statikus fényszórásmérés

A vizsgált oldat által szórt fény intenzitását különböző koncentrációban és különböző megfigyelési szögek alatt határozzuk meg. Ezekből a mérésekből extrapolálhatunk a 0 mol/l koncentráció és 0° esetében mérhető értékre, a következő összefüggés segítségével:

$$\frac{Hc}{R_{ex}} = \frac{1}{MP(q)} + A_2c,$$

(X.22)

ahol H több fizikai állandó összevonásából származó konstans, M a részecske móltömege, $P(q)$ az ún. alakfaktor, A_2 egy másik állandó, c a koncentráció, R_{ex} pedig a szórt fény intenzitásából kiszámolt érték:

$$R_{ex} = \frac{J_{oldat} - J_{oldoszer}}{J_0 R^2} .$$

(X.23)

A J_{oldat} és $J_{oldoszer}$ a megfelelő intenzitásértékek, J_0 a beeső fény intenzitása, R pedig a detektor távolsága a szóró térfogattól.

Kisméretű részecskék esetében (a fény hullámhosszánál sokkal kisebb méret) következtethetünk a részecske móltömegére. Nagyobb méretű részecskék esetében a móltömeg mellett egyéb információ is nyerhető. Ilyen esetben az egész objektum nem tekinthető pontszerűnek, hanem tartományokra bontható, tehát struktúrával rendelkező egységnek. A teljes részecske egésze által sugárzott fény intenzitáseloszlása az elemi részek által kibocsátott fény amplitúdójának szuperpozíciója utáni eredő amplitúdóból származtatható, figyelembe véve az eltérő helyből adódó fáziskülönbségeket. Ezt foglalja magában a $P(q)$ alakfaktor.

A nagyobb méretű részecskék esetében a fényszórás intenzitásának szög szerinti eloszlásból lehetőség nyílik az alak meghatározására. A meghatározás alapja, hogy ismert alakú részecskék esetében kiszámíthatjuk a szórásprofil és összevethetjük a megmérttel. Azt az alakot fogadjuk el a részecskére jellemzőnek, amely esetében a legnagyobb mértékű egyezést tapasztaljuk. Természetesen egyszerűbb a helyzet, ha vannak előzetes részinformációink a részecske alakjára vonatkozólag.

1.3.2. X/1.3.2. Dinamikus fényszórásmérés

Ebben az esetben általában egy adott szög alatt mérjük a szórt fény intenzitásának időbeli ingadozásait. Ugyanis csak hosszabb idő (pl. tized másodpercek) átlagában mondhatjuk azt, hogy a szórt fény intenzitása állandó és megfelel a VI.44. egyenletnek. Rövid idejű megfigyelésekben (mikroszekundumok) azt tapasztaljuk, hogy véletlenszerű ingadozások figyelhetők meg. Ennek oka a részecskék véletlenszerű mozgása.

A mérés során meghatározott ideig (néhány másodperc) rövid időközönként (mikroszekundum vagy még rövidebb időtartam) megmérjük az intenzitást. (Gyakorlatilag olyan kicsi az intenzitás, hogy gyakran fotonszámolást végzünk, és intenzitás helyett a Δt időtartam alatt beérkező fotonok számát használjuk fel.) A mért időfüggvényből származtatjuk az ún. autokorrelációs függvényt (lásd magyarázat). Egyszerű esetben (monodiszperz rendszer: minden részecske ugyanolyan alakú és méretű) az autokorrelációs függvény exponenciális, aminek kitevőjében szerepel a részecske translációs diffúziós együtthatója (D), mint a részecskék mozgására jellemző mennyiség. Ebből gömb alakú részecskék esetében az Einstein-formula segítségével megadhatjuk a részecske méretét is:

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}, \quad (X.24)$$

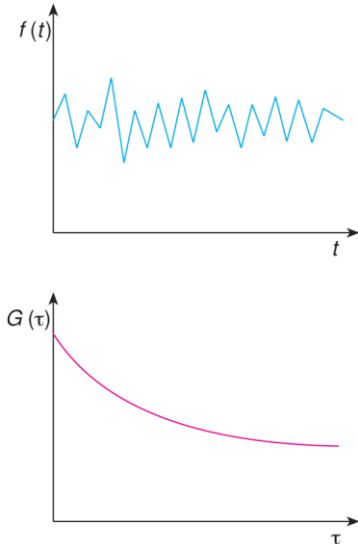
ahol η a közeg viszkozitása, r pedig a részecske sugara.

Nem gömb alakú részecskék esetében bonyolultabb a kép, de ekkor azt mondhatjuk, hogy a részecske, nagy átlagban, egy ekkora méretű gömbnek megfelelően mozog.

Általában az oldatok nagyon különböző méretű részecskéket tartalmaznak, azaz polidiszperzek, még akkor is, ha azonos részecskékről van szó. Ilyenkor a fentiek alapján meghatározott diffúziós állandó csak egyfajta átlag, ami viszonylag keveset mond. Az ilyen esetekben egy meghatározott érték helyett a részecskék méreteloszlása a

jellemző. A mért autokorrelációs függvényhez nagyon sokféle eloszlás tartozhat. Megfelelő matematikai módszerek segítségével azonban meghatározható, hogy ezek közül melyik a legvalószínűbb és azt fogadjuk el, mint a mintára jellemző eloszlást. Modellrészecskék segítségével azonban igazolni tudjuk, hogy az a feltevésünk, hogy a legvalószínűbb eloszlást fogadjuk el mint lehetséges eloszlást, reális elgondolás.

Az autokorrelációs függvény.



Az autokorrelációs függvény $G(\tau)$ azt adja meg, hogy egy $f(t)$ függvény mennyire hasonlít egy időtartammal későbbi önmagára. Véletlenszerű fluktuációk és homogén minta esetében (a részecskék teljesen egyformák) ez egy egyszerű exponenciális függvény. A felső ábra egy véletlenszerűen változó jel időfüggvényét mutatja, míg az alsó egy ilyen jel autokorrelációs függvényét.

1.4. X/1.4. Cirkuláris dikroizmus (CD) – spektroszkópia

Ez a mérés technika az optikai aktivitás vizsgálatán alapul.

1.4.1. X/1.4.1. Optikai aktivitás

Az olyan molekuláris szerkezeteket, amelyeknél nem létezik olyan sík, amelyre tükrözve a molekulát, az önmagába menne át, **királis molekuláknak** nevezzük. Az ilyen molekulákat poláros fényvel (lásd II/2.1.7.) megvilágítva azt tapasztaljuk, hogy a megvilágító fény elektromos térerősség-vektora által rezgésbe hozott elektronok a továbbított (továbsugárzott) fény polarizációs tulajdonságait megváltoztatják. A királis molekuláknak ezt a tulajdonságait **optikai aktivitásnak** nevezzük.

1.4.2. X/1.4.2. Cirkulárisan és elliptikusan poláros fény

Az optikai aktivitás mérési módszereinek megismeréséhez a lineáris polarizáció mellett meg kell ismernünk a cirkuláris polarizáció jelenségét is (II/2.1.7. fejezet).

Általában a fény polarizáltsága azt jelenti, hogy az elektromágneses térerősség vektorainak iránya a fénysugárban valamilyen szabály által meghatározott. Lineáris polarizáltságnál a fénysugár minden helyén azonos irányba mutatnak, amit szokás az egységnyi hosszúságú vektorral, a „fényvektorral” jellemezni. A fényvektor az elektromos térerősség irányát mutatja, erre merőleges a mágneses térerősség.

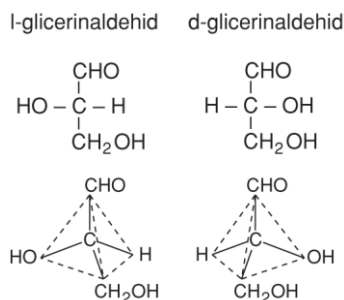
Egy adott pillanatban a fénysugárra fektetett egyenes mint x tengely mentén az egy irányba mutató vektorok nagysága a periodikus szinusz (vagy coszinusz) függvény szerint változik x függvényében.

Cirkuláris polarizáció esetén egy adott pillanatban a fénysugár mentén „ránézve” a vektorok helyzetére azt „látánk”, hogy a minden helyhez hozzárendelt vektorok nagysága azonos, azonban irányuk úgy alakul, hogy a vektorok vége egy körívet rajzol ki. Úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a fénysugár egy adott pontján a vektor az idő függvényében egyenletes körmozgást végez. Ez a körmozgás lehet balra vagy jobbra forgó. Könnyen belátható, hogy ha két egyforma amplitúdójú és azonos sebességű jobbra és balra cirkulárisan poláros

fénysugarat összegzünk, akkor az eredő vektor mindig azonos irányba mutat és rezgőmozgást végez. Ez megfelel a lineárisan poláros esetnek, ami tehát két cirkulárisan poláros komponens eredőjeként fogható fel. Az optikailag aktív molekulák a lineárisan poláros fény polarizációs irányának síkját elforgatják. Ez úgy fogható fel, hogy az aszimmetrikus szerkezetű molekulák a fényvel kölcsönhatásba lépve a jobbra és a balra cirkulárisan poláros összetevők terjedési sebességét nem egyformán befolyásolják, azaz a két komponensre vonatkozó törésmutató különböző.

Ily módon a kilépés után a két komponens forgómozgása között fáziskülönbség lép fel és ezért az eredő vektor más irányba mutat. Az elfordítás iránya és mértéke a molekula térszerkezetére, koncentrációjára és a közegben megtett úthosszra jellemző. Sok molekulánál előállítható a térszerkezet jobbra illetve balra forgató változata. Ezeket a szerkezeteket „enantiomorf” pároknak nevezzük (lásd X.17. ábra). A szerves makromolekulák természetes felépülésekor általában csak az egyik módosulat valósul meg.

Amennyiben az optikailag aktív minta a megvilágító fény hullámhosszán elnyel, akkor a kilépésnél a belépő lineárisan poláros fény cirkuláris komponenseiben nemcsak a fázisban, hanem amplitúdóban is különbségek lesznek. Ez az eredőt **elliptikusan polárossá** teszi, azaz a térerősségvektor végpontja a rezgés során a fénysugár köré rajzolható meghatározott irányú (kis és nagy tengellyel jellemezhető) ellipszis mentén mozog (lásd II.27. ábra). Ezt a jelenséget **cirkuláris dikroizmusnak** (CD: cirkuláris komponensek iránti kettős viselkedés) nevezik. Az effektus mértékét a kétféle cirkuláris komponensre tapasztalható moláris extinkciós állandók különbségével ($\epsilon_b - \epsilon_j$) jellemzik, és a mérés is a kétféle cirkulárisan poláros fény abszorpciójának mérésével történik. A CD-spektrum a két spektrum különbségként áll elő.



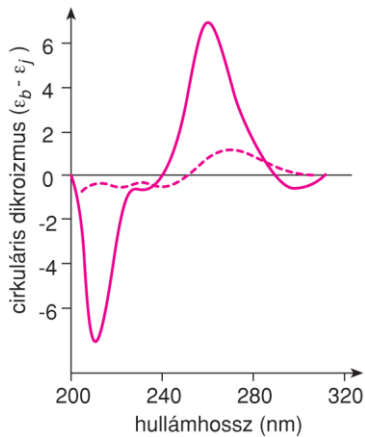
X.17. ábra. A glicerinaldehid enantiomorf módosulatai

1.4.3. X/1.4.3. A CD-spektroszkópia alkalmazása makromolekulák szerkezetvizsgálatában

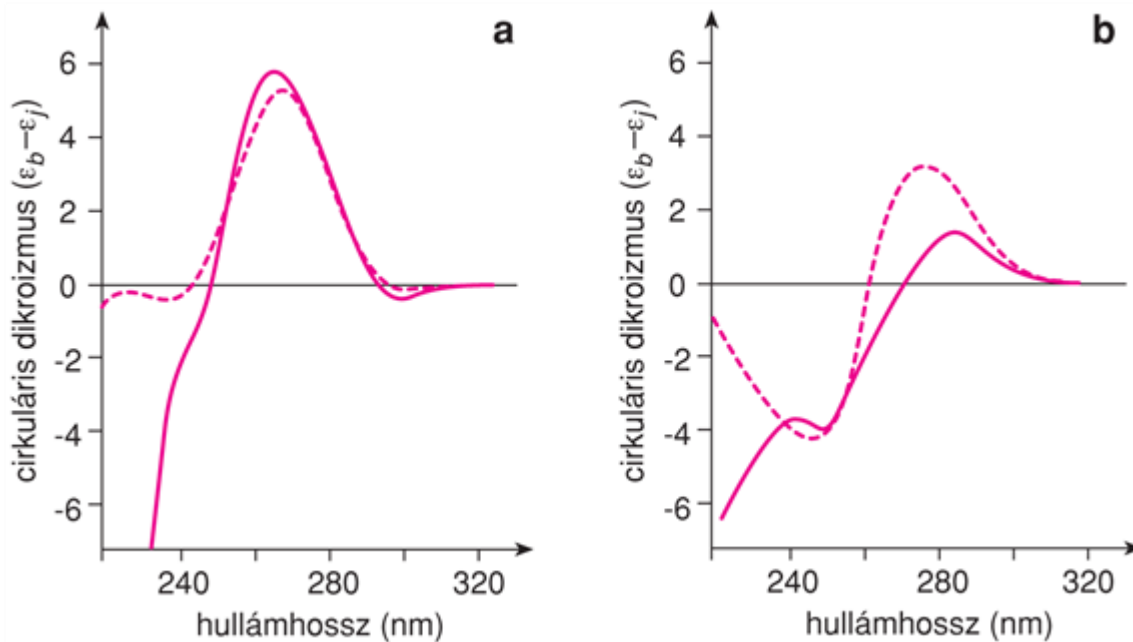
A X.18. ábrán RNS-oldat CD-spektruma látható (kihúzott vonal) összehasonlítva a makromolekulát alkotó nukleotidmonomerek oldatán mért CD-görbével (szaggatott vonal). Látható, hogy az RNS optikai aktivitása jelentős részben a szekunder struktúra következménye.

A nukleinsavak térbeli szerkezetét és ezen keresztül optikai aktivitásukat a fehérjével való kölcsönhatás is befolyásolhatja, és pedig a kölcsönhatástól függően különböző mértékben. Hasonlítsuk össze a X.19. ábra a) és b) részét. Az előbbiben egy RNS-tartalmú bakteriofág, az MS2 fág és izolált nukleinsavának, az utóbbin a DNS-tartalmú T7 fág, valamint nukleinsavának CD-spektrumait tüntettük fel. Az izolált nukleinsavak esetében a spektrumok (szaggatott vonal) 270 nm tájékán rendelkeznek maximummal (vö. X.18 ábra RNS- spektrumával is), ami jellemző az oldatban levő nukleinsav térszerkezetéből következő kiralitásra. Ez a kiralitás lényegében ugyanaz az RNS-nek a fágfehérjével alkotott komplexében is (X.19a ábra kihúzott görbéje), de jelentős eltérés mutatkozik a DNS-tartalmú T7 fág és a T7-DNS CD-spektrumai között. Ez azt mutatja, hogy a fágfejen belül elhelyezkedő DNS konformációja kisebb kiralitású, mint az izolált DNS-é.

Nemcsak a CD mértéke, hanem a lineárisan poláros fény síkjának elfordulása (optikai forgatás) is függ a hullámhossztól. Az erre irányuló mérés technikát, amelyben a forgatási szöveget határozzuk meg a hullámhossz függvényében, *optikai rotációs diszperzió*nak (optical rotatory dispersion, ORD) nevezik. Az ORD- és a CD-módszerek alkalmazása esetén ugyanazt a jelenséget követjük más-más oldalról.



X.18. ábra. CD-spektrumok. Az ϵ_b és ϵ_j a cirkuláris komponensek moláris extinkcióját jelölik. A folytonos görbe egy növényi vírus RNS-ére, a szaggatott görbe az RNS-t felépítő nukleotidbázisokra vonatkozik (Samejima és mtsai, J. Mol. Biol., 34,39,1968; Cantor és mtsai, Biopolymers, 9,1059,1970.)



X.19. ábra. Nukleoproteidek (folytonos vonal) és izolált nukleinsavak (szaggatott vonal) CD-spektrumai azonos oldószerben. Az ϵ_b és ϵ_j a cirkuláris komponensek moláris extinkcióját jelölik. a) RNS-tartalmú nukleoproteid (MS2 fág) és nukleinsava, b) DNS-tartalmú nukleoproteid (T7 fág) és nukleinsava

2. X/2. Pásztázó mikroszkópos módszerek

A biológia és az orvostudomány fejlődésében a mikroszkópos módszerek hagyományosan igen jelentős szerepet játszanak. A betegségek nagy részének felismerése és a terápia pontos meghatározása egyaránt igényeli a fény- vagy elektronmikroszkópos vizsgálatot, illetve megerősítést. A patológiai vizsgálat kórszövettani része az, ami már a műtét alatt vagy a gyógyítás során meghatározza a diagnózist, és csak kisszámú esetben hagy maga után bizonytalanságot. A biológiai kutatások sejtszintű része nagymértékben függ a feltárt morfológiai részletek feloldásától és megbízhatóságától. Ezek a mikroszkópos vizsgáló módszerek mindenkor fejlettségének a függvényei is, különösen ha a modern mikroszkópiai forradalom eredményeit is ideszámítjuk a mikroszkópos spektroszkópiával együtt.

A nyolcvanas évek során valóságos forradalom volt a mikroszkópos vizsgálatok fejlődésében. Egyedi atomok egyértelmű láthatóvá tételéért Binnig és Rohrer (Ruskával együtt, annak jóval korábbi érdemeit ismerve ezzel el) 1986-ban kapott Nobel-díjat. Módszerük, az alagúteffektuson alapuló pásztázó mikroszkópia (újabbán már nem csak) elektromosan vezető felszínek mintázataról adott atomi felbontású képet (Scanning Tunneling

Microscopy, STM). Grafitfelszín szénatomjai voltak az elsők, amelyeket ilyen módon tettek láthatóvá. Ennek egyik feltétele a pásztázás felbontásának a szinte minden határon túli javítása volt. E kijelentés azt mutatja, hogy a pásztázás pontossága ma elvben elérheti a hidrogénatom átmérőjének ($0,5 \text{ \AA}$) kevesebb mint tizedét is.

Az igazi áttörést és a főleg, de nem kizárólag felszíni struktúrák természetes körülmények közötti atomi, sőt szubatomi szintű láthatóvá tételét az atomerőmikroszkóp (Atomic Force Microscopy, AFM) feltalálása és szinte azonnali megépítése jelentette (Binnig, Quate és Gerber, 1986). A pásztázás elve a lézerek megjelenésével az optikai mikroszkópiai eljárásokban is megjelent, ezeket ott tárgyaljuk.

A nyolcvanas években megindult modern mikroszkópos forradalom sorozatban hozott létre további mikroszkópos eljárásokat (scanning capacitance, s. thermal, s. acoustic, s. thermal wave imaging, scanning X-ray, phase measuring interferometric stb.), amelyek elterjedtsége, ha sokkal korlátozottabb is, mint az előbbieké, de számuk (amely jelenleg kb. harmincra tehető) még nőhet is. Összefoglaló néven leghelyesebb pásztázóerő (pásztázószondás) mikroszkópiáknak nevezni [Scanning Force (Probe) Microscopies] a magyarra néha nehezen lefordítható változatos elnevezéseket, amelyekben a pásztázás felhasználása, valamint az anyag felszíne és valamilyen mérhető fizikai paraméter közötti kölcsönhatás képezi az alapját a felszíni (vagy némi manipuláció után a felszín alatti) domborzat atomi méretű leképezésének.

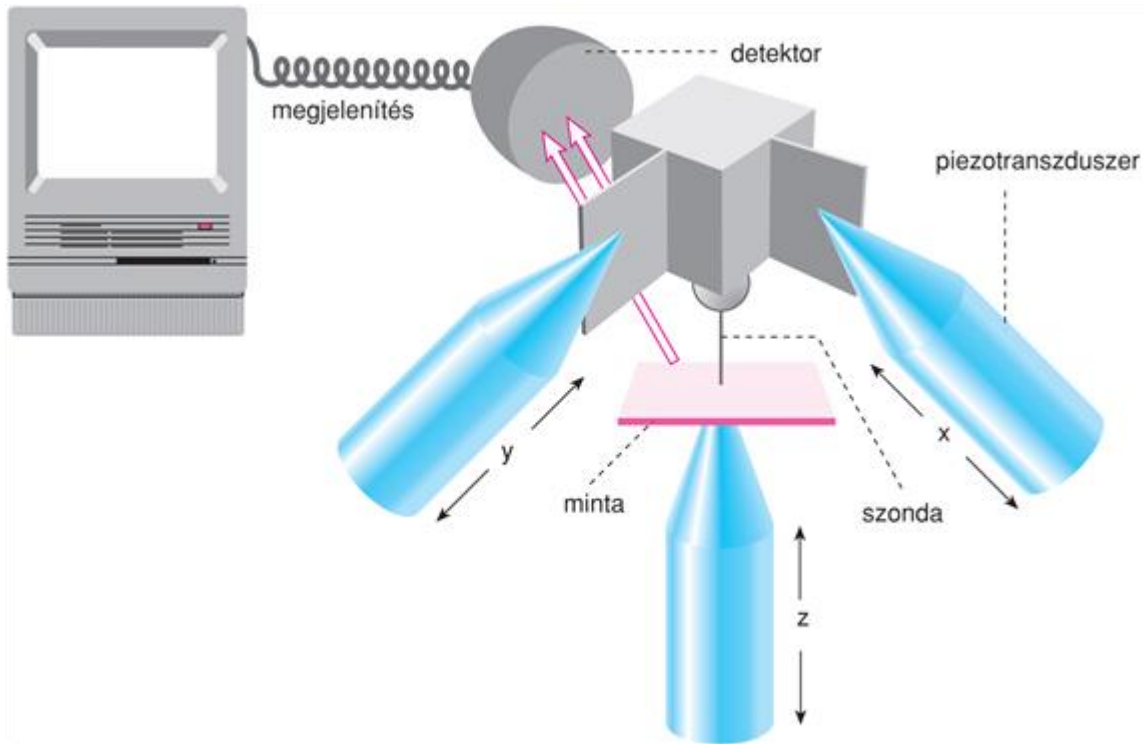
Teljesen természetes, hogy valamennyi ilyen mikroszkópiai módszer esetében felmerül az a probléma, hogy az így nyert „kép” nem azonos azzal a képpel (bár ahhoz sokszor nagyon közel állhat), amelyet szemmel „láthatnánk”. Változatlanul érvényes az az elv, hogy az atomi világ és a makroszkopikus világ képszerű megjelenítése nem keverhető össze, hiszen a fizika törvényei ezt nem teszik lehetővé. De ez a probléma felemlíthető csaknem valamennyi mai képalkotó eljárás esetében, amikor például ionkoncentráció-különbségeket színbeli különbségekké alakító kép – „image” – analízátorok lassan nemcsak a kutatás, de a laboratóriumi diagnosztika mindennapos részét képezik.

2.1. X/2.1. A pásztázás elve

Ahhoz, hogy bármilyen anyagi objektumról atomi méreteket is feloldó képet lehessen kapni, két problémát kellett megoldani. A környezet mozgásától, rezgéseitől a vizsgált rendszert függetleníteni kellett, és az atomi felbontású kép legalább kicsit nagyobb felületre való kiterjesztése érdekében annak kellő finomságú letapogatását, a pásztázást kellett megoldani. A rezgések csillapítása igen változatos módon megoldható. A leggyakoribb módszer az egész mérő és mért rendszer rugalmas, rezgésmentes felfüggesztése vagy alátámasztása.

A nagy felbontású, tized- vagy századangström pontosságú pásztázás megvalósítása a múlt században felismert piezoelektromos jelenségen (lásd VIII/4.2.1.) alapszik. Ez a leginkább közös vonás valamennyi modern optikai és nem optikai mikroszkópiában. A piezoelektromos kristályok mechanikai megnyúlása igen gyors, és akár századangström pontosságú lehet. A lényegében fordított piezoelektromos hatáson alapuló transzducerek segítségével a mikroszkópok tárgyasztala vagy a tárgyat letapogató fizikai kölcsönhatást létesítő „fej” a tér minden irányába mozgatható. Az x tengely mentén meandervonalakban végzett mozgáshoz az y tengely mentén is mozgatni kell a tárgyat vagy a kölcsönhatást létesítő fejet. Ehhez két piezoelektromos transzducer kell. A harmadik transzducer mozgatása z irányban bontja fel a kölcsönhatásokat. A három irány adataiból a komputeres technika, illetve a képalkotó elektronika rakja össze a háromdimenziós képet.

A X.20. ábra mutatja a piezoelektromos pásztázóberendezés lényegét képező transzducerek különböző elrendezéseit. A hosszabb piezoelektromos transzducerek megnyúlása is nagyobb, így nagyobb pásztázási terület hosszabb transzducerekkel érhető el. A szokásos egyetlen pásztázással letapogatható felületek jelenleg általában $20 \cdot 20$, $40 \cdot 40$, és $128 \cdot 128 \mu\text{m}^2$ nagyságúak, az alkalmazott feszültségek nemigen haladják meg a 400 voltot.

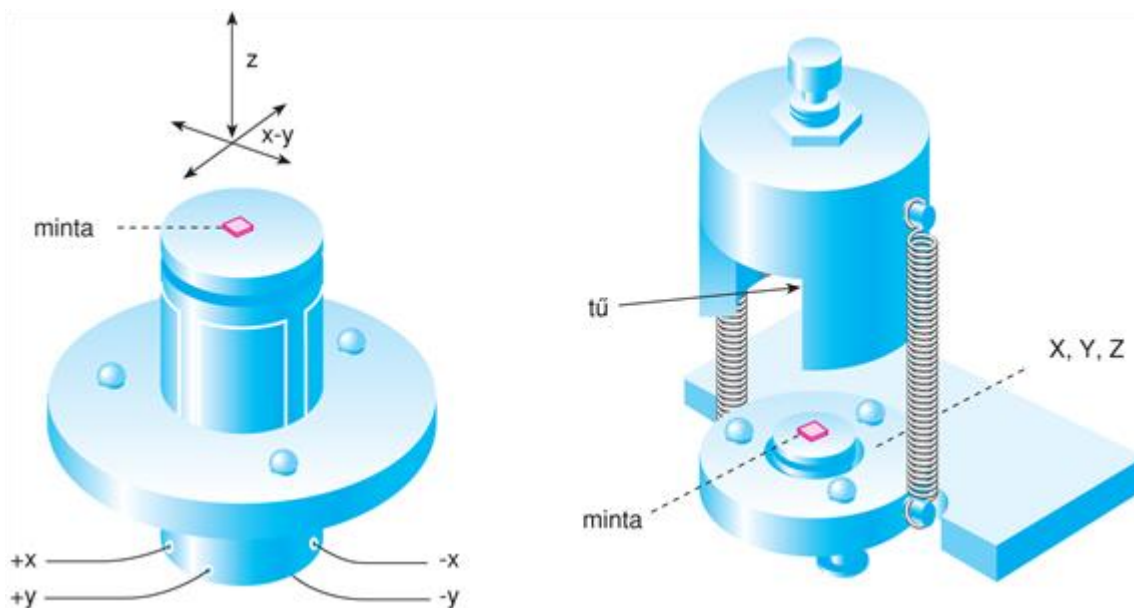


X.20. ábra. A pásztázás megvalósítása

2.2. X/2.2. Az atomerő-mikroszkópia, AFM

Az AFM minden fajta anyag, köztük elektromosan nem vezető anyagok vizsgálatára is kiválóan alkalmazható, szemben az első ilyen jellegű módszerrel, az itt részletesen nem tárgyalt pásztázó alagúteffektusos (STM) mikroszkópiával, amely főleg vezető anyagok vizsgálatára alkalmas.

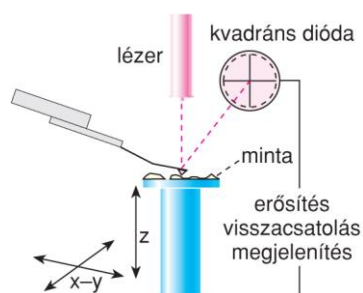
Az atomerő-mikroszkópia (AFM) Gerd Binnig ötlete volt. Feltette a kérdést, hogy ha egy közel atomi méretre kihegyezett tűt mozgatunk pásztázó- transzducerek segítségével atomok, molekulák vagy nagyobb objektumok felett a felszíntől igen kis távolságra, és a tű felfüggesztése olyan, hogy az atomokat nem tudja egymástól elszakítani, mert ahhoz gyenge a felfüggesztés rugóállandója, mennyiben képes a tű mozgása a felszíni – atomi vagy molekuláris méretű – topográfiai viszonyokat tükrözni. A számítások, amelyeket Quate és Gerber professzor együtt végzett el, azt mutatták, hogy ez megvalósítható. Mivel akkor az alagúteffektuson alapuló pásztázómikroszkópia (STM) már rendelkezésre állt, annak a pásztázóberendezését használták, és gyémántporból ragasztottak fel „tűket” vékony sztaniollemezre, hogy a vizsgált felszínt ne szakítsa szét a pásztázó tű és a felszín kölcsönhatása. A kísérlet sikeres volt, és ez vetette meg az alapját az atomerő-mikroszkópiás vizsgálatoknak. A mai modern készülékekben a „tű”, illetve a sztaniollemezke mozgását a tűt tartó V alakú sztaniollemez csúcsára vetített és onnan visszaverődő lézersugár mozgása képezi le, egy ún. kvadráns (négyfelé „hasított”) diódára vagy akár a házi videózásban is használt videokamera CCD-érzékelőire. Az alkalmazott lézer akár a CD-lemezjátszókból ismert kisméretű diódalézer is lehet. Az elv nem változik, akár a tárgyasztal akár a tű mozgatásával végezzük a pásztázást. Ez utóbbi tetszőleges nagyságú felületre ráhelyezhető. A X.21. ábra egy AFM-berendezés vázlatát mutatja.



X.21. ábra. Az AFM felépítése

Az 1986-ban elvégzett első kísérletek sikerén felbuzdulva ma már számos cég állít elő AFM-készüléket. Ezeknek a haszna az iparban a különböző felszíni struktúrák nagy felbontású vizsgálata, amely viszonylag olcsón, az elektronmikroszkópos képek analizálásának a nehézsége nélkül is kivitelezhető (például mikroelektronikai chippek, vezető és nem vezető anyagfelszínek stb. vizsgálata). Azokat a készülékeket, amelyeknek a letapogatófeje a pásztázóegység és így gyakorlatilag bármilyen felületre ráhelyezhetők, stand-alone típusú készülékeknek nevezzük.

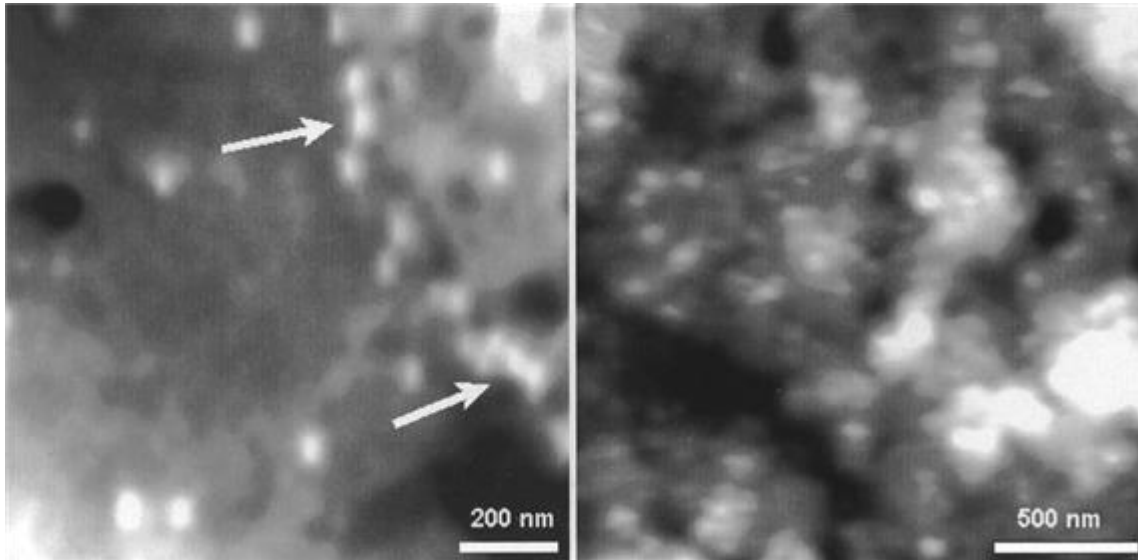
A módszer biológiai alkalmazása rendkívül gyorsan elterjedt. Hamar kiderült, hogy a plazmamembrán alatti struktúrák vizsgálatára is alkalmassá tehető. A X.22. ábra mutatja a készülék vázlatos működési elvét. A mérés elméleti fizikai alapjai meglehetősen bonyolultak. A legegyszerűbb és (talán) közérthető megközelítés az, hogy a Pauli-féle kizárási elv miatt a tű és a vizsgált anyag elektronfelhőinek a taszítóereje az, ami a gyenge rugóállandó mellett nem engedi, hogy a tű behatoljon az anyagba. Ugyanakkor a sztaionál rugóállandója elég erős ahhoz, hogy a tűt a felszínhez nyomja. A lézerfényvel leképezett, felszíni topográfiát követő lézersugárkiteréseket elektronikai úton vissza lehet csatolni a piezoelektromos transzducerek mozgására is, ami számos mérési változatot tesz lehetővé. Mérhető a felszín atomi, molekuláris struktúráján kívül, megfelelő előkezelés után, a citoskeleton, sőt a sejtmag szerkezete is. Ha „tisztá” molekulaszuszpenziókat vizsgálunk, a molekulák konformációs változásai is követhetők. A sejtek felszínén immunológiai módszerekkel megjelölt antigének és receptorok eloszlása és mintázata láthatóvá tehető. Az immunogold módszer különböző nagyságú kolloidális aranygömböcskékkel specifikusan jelzett antigének révén lehetővé teszi egyedi molekulák azonosítását is.



X.22. ábra. Az AFM működési elve

Megmérhető a molekuláris és az atomi struktúrák összetartó ereje is. A módszer nagy előnye az elektronmikroszkópiával szemben, hogy (közel) fiziológiás körülmények közötti méréseket tesz lehetővé. Nem kevés nehézséget okoz azonban az, hogy specifikus jelzések nélkül ritkán lehet azonosítani az éppen vizsgált struktúrákat. A X.23. ábrán látható képek mutatják, hogy az aranygömbökkel jelzett sejtfelszíni antigének nem egyenletesen oszlanak el, hanem különböző mintázatot képezhetnek, amelyeknek a sejtek közötti kommunikációban lehet szerepe. A sejtek AFM-vizsgálatának egyik fő akadálya a sejtek igen változatos

domborzatú felszíne. Az AFM-vizsgálatok fő jelszava: „the flatter the better”, azaz minél laposabb valami, annál jobban vizsgálható. Ezért igaz az a paradoxon, hogy molekulaszuszpenzió egyedi molekula-konformáció-változását azonosítani könnyebb akár angström-szinten is, mint megtalálni például egy 30 nm átmérőjű (tehát sokkal nagyobb) kolloidális aranyjelzést egy nem nagyon lapos sejt felszínén. Ennek ellenére a sejtek számos olyan tulajdonsága vált így vizsgálhatóvá, amelyek elektronmikroszkóposan ugyan vizsgálhatóak lennének, de a műtermékek megjelenését a preparálási és mérési körülmények miatt nehéz elkerülni.



X.23. ábra. Immunogold jelöléssel láthatóvá tett sejt felszíni receptor mintázatok AFM-es képe

A letapogatást végző tű gyártása maga is technikai vívmány, hiszen a tű hegye néhány nm, esetleg angström átmérőjű „félgömb”. Az anyaga pedig igen kemény szilícium-nitrid vagy szilíciumkristály. Természetesen a letapogatással kapott „kép” nem teljesen tökéletes, mert azt a tű alakja is befolyásolhatja. Magát a pásztázást is különböző üzemmódokban lehet végezni. Ilyen például a kontakt AFM esetén alkalmazott konstans erő és konstans magasság módozatok. A sejtbiológiai kísérletekhez különösen megfelelőnek tűnik az oszcilláló (tapping) üzemmódban és vizes közegben üzemeltetett, néhány (1–10) nm átmérőjű tű. A szembetűnő lényeges különbség az elektronmikroszkópos és az AFM-mérések között az előbbi megállapításból is nyilvánvaló, mivel AFM-mel vizes közegben is lehet dolgozni, ami lehetetlen az elektronmikroszkópos vizsgálatok során.

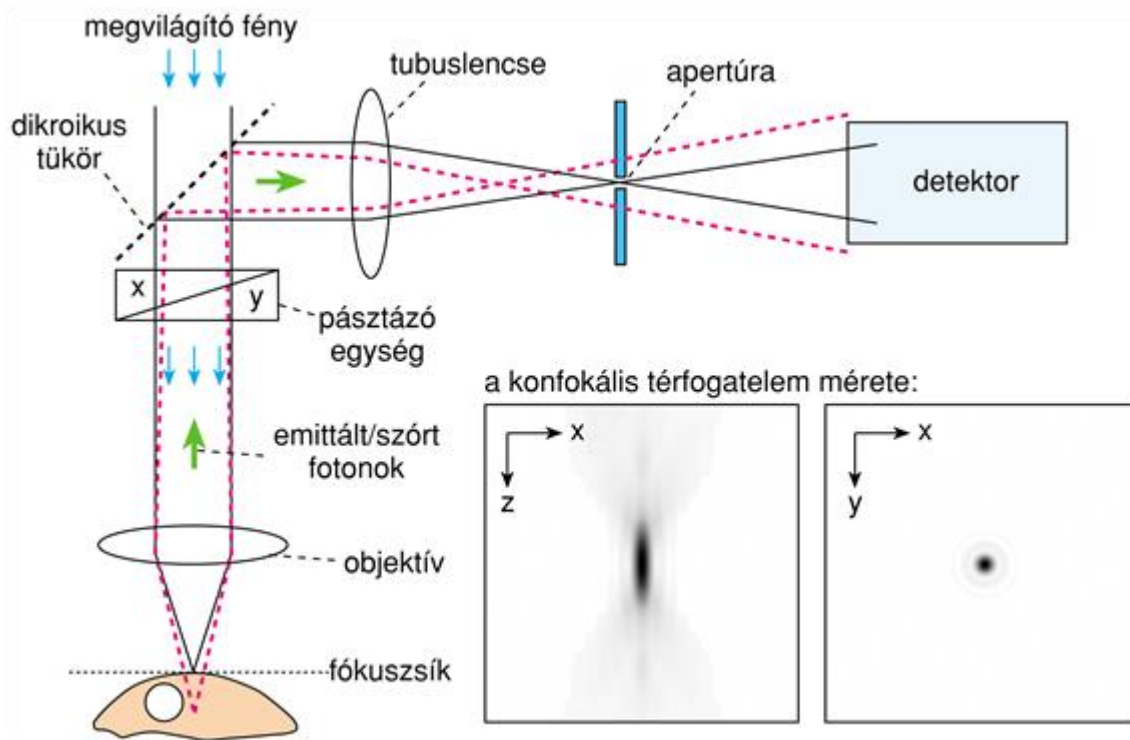
3. X/3. Modern fénymikroszkópiai eljárások

3.1. X/3.1. Konfokális lézer-pásztázómikroszkópia, CLSM

Tematikailag a pásztázás bevezetése és a hagyományos mikroszkópos feloldási lehetőségek drámai kibővülése miatt a konfokális lézer-pásztázómikroszkópia (Confocal Laser Scanning Microscopy, CLSM) is a mai modern mikroszkópiák közé tartozik annak ellenére, hogy tulajdonképpen hagyományos optikai mikroszkópia. Egy, a beállítással kiválasztott mélységben elhelyezkedő rétegről a képet pontonként, pásztázással állítja elő a rendszer. A vastagabb biológiai preparátumok, szövetek, sejtcsoportok vizsgálatában a CLSM meg tudta oldani azt a problémát, hogy az egymás fölött elhelyezkedő rétegek egymásra vetülő leképzése helyett egy adott beállításban egy optikailag élesen elválasztható vékony rétegből kapjanak képet a minta fizikai felszeletelése nélkül. Ily módon egy adott sejt belsejébe „betekinthetünk” anélkül, hogy azt elmetszenénk. Bár a kapott kép x - y síkbeli felbontását az Abbe-elv szabja meg, a konfokális optika igen lényeges előrelépést jelent a hagyományos fénymikroszkópiai teljesítőképességéhez mérten, részben mert a z irányú (optikai tengely menti) feloldás javult, részben pedig azért, mert az egyes optikai szeletek képeit számítógép tárolja, és belőlük utólag is tetszőleges térbeli orientációjú kétdimenziós metszeteket vagy akár háromdimenziós képeket állíthatunk össze.

A CLSM működési elvét a X.24. ábra szemlélteti. A mintáról érkező fotonok az optikai rendszer hátsó fókusz síkjában elhelyezett szűk apertúrán keresztül juthatnak a detektorra. A hátsó fókusz sík az objektív fókusz síkjával **konjugált** viszonyban van (innen a módszer neve – **konjugált fokalitás**), ami azt eredményezi, hogy az elülső fókusz síkból érkező fotonok az objektívet párhuzamos nyalábként hagyják el, és a tubuslencse által az apertúra nyílására fókuszálódnak, s azon veszteség nélkül áthaladnak a detektorhoz. Az elülső fókusz sík alatti és feletti síkokból érkező fotonok az objektívet össze-, illetve széttartó nyalábként hagyják el, a

tubuslencsére is így érkeznek, s emiatt a hátsó fókusz sík (és az apertúra) elé, illetve mögé fókuszálódnak. Mindkét esetben a hátsó fókusz síkban ezek a nyalábok nagyobb átmérőjűek, mint az apertúra, és így fotonjaik egy része nem jut át a nyíláson. Minél távolabb van a fotonforrás az elülső fókusz síktól, annál kevesebb foton jut át az apertúrán. A fókusz síkon kívüli fotonok progresszív kirekesztése pedig azt eredményezi, hogy ezzel a módszerrel a hagyományos mikroszkópos képhez képest keskeny, jól definiált rétegből lehet éles képet kapni. A z tengely menti feloldóképesség azzal fokozható (a szeletvastagság azzal csökkenthető), ha az apertúra méretét csökkentjük. A gyakorlatban ez a szeletvastagság néhány mikron, tehát az x - y irányú feloldásnál a z irányú lényegesen rosszabb. A lézertényforrás nélkülözhetetlensége abból fakad, hogy a keskeny apertúrán (amely egy mm-nél kisebb átmérőjű lyuk) áthaladó fénysugár intenzitása igen kicsiny a teljes gerjesztőintenzitáshoz képest. A lézertényforrás intenzitása azonban még így is elegendő ahhoz, hogy az elektrooptikai érzékelők észlelhessék.



X.24. ábra. Konfokális lézert-pásztázó- mikroszkóp felépítése, és a leképezett konfokális térfogatelem mérete. Az objektív fókusz síkjából érkező fotonok (folytonos/fekete vonal) a hátsó fókusz síkban elhelyezett apertúrán áthaladnak, és hozzájárulnak a kialakuló képhez, a fókusz síkon kívülről érkező fotonok az apertúra előtt vagy mögött fókuszálódnak, így nagy részük kirekesztődik a képalkotásból. Az eredmény a z (optikai tengely) irányú feloldás megjelenése, (és ezáltal optikai szeletelő képesség) amely azonban még mindig lényegesen rosszabb az x - y irányú, Abbe-elv által megszabott feloldásnál. Az ábrán látható az egyes leképezett térpontokhoz tartozó jelforrás, a konfokális térfogatelem x - z és x - y irányú metszete: az x - y metszet szimmetrikus, az x - z viszont a gyengébb z -feloldással összhangban megnyújtott. Ennek megfelelően a konfokális térfogatelemet egy forgási ellipszoidhoz szokás hasonlítani

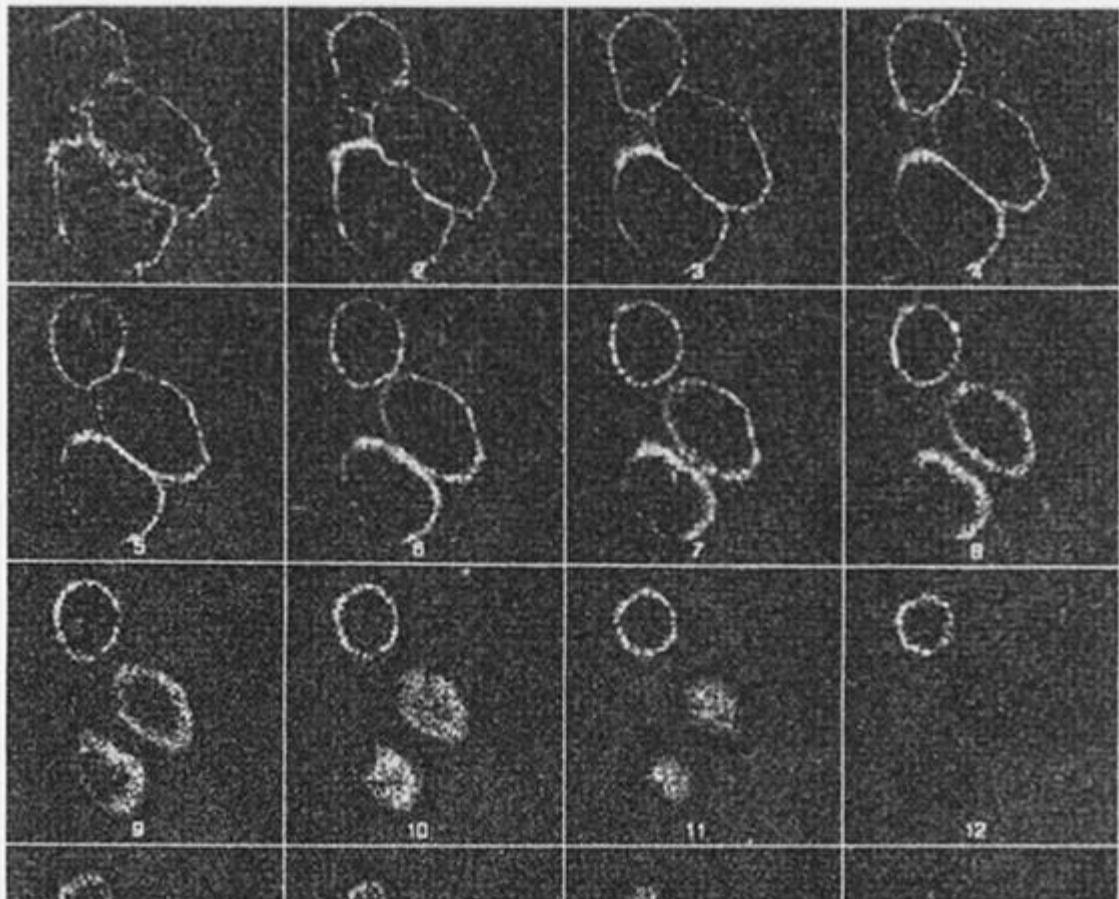
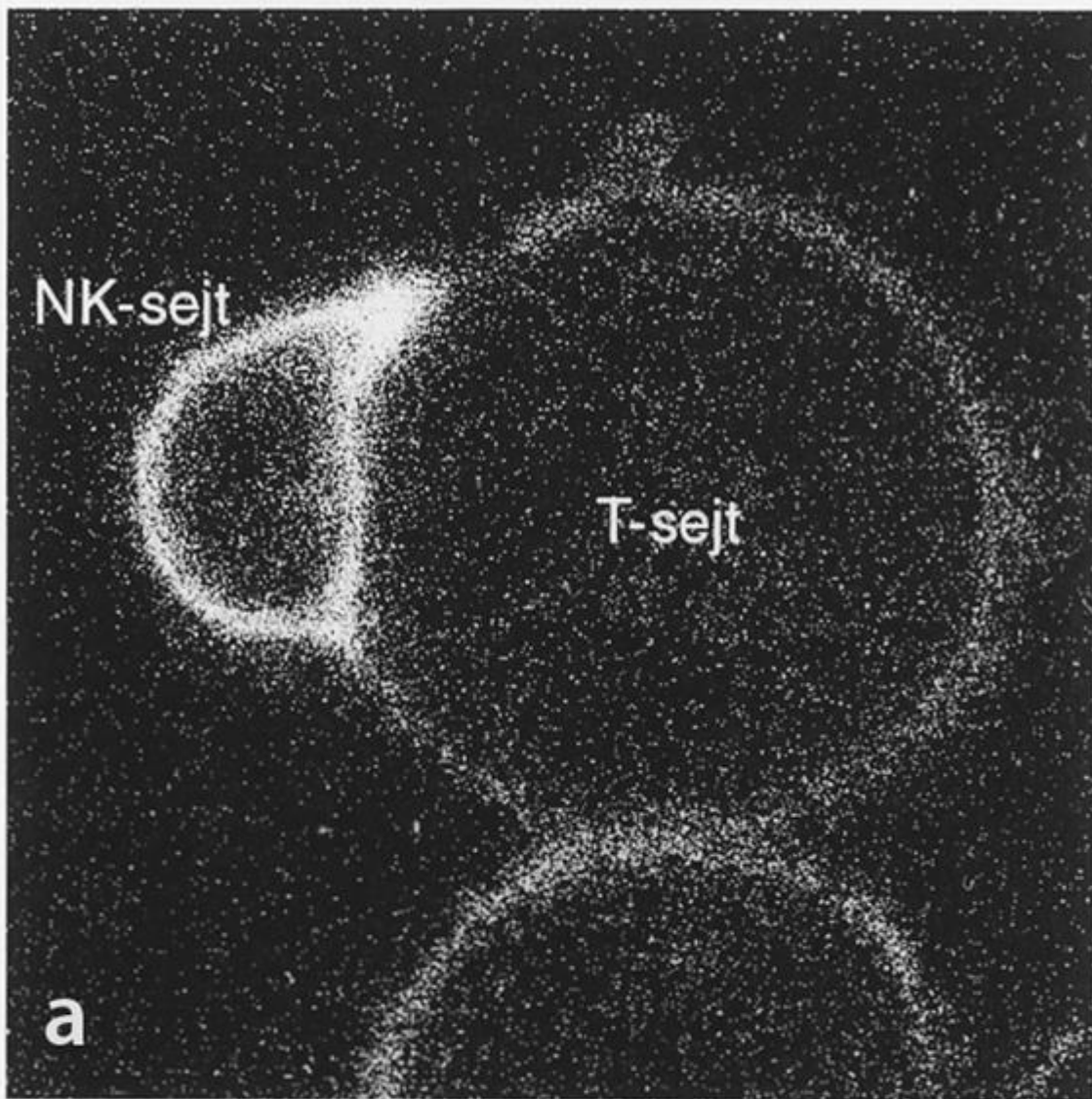
A kétdimenziós kép létrehozása pásztázás útján valósul meg. A modern rendszerekben a kollimált megvilágító lézernyalábot valamilyen optikai rendszer (pl. mozgó tükör) rendre a minta vizsgált területének pontjaira irányítja. Léteznek azonban olyan készülékek is, melyekben a mintát mozgatja apró lépésekben a motorizált tárgyasztal. A megvilágított pontokból emittált, vagy visszavert fotonok megfelelő szűrés után a detektorba kerülnek, amely többnyire fotoelektron-sokszorozó, ritkán diódasor vagy lavina-fotodióda. A mért fotonfluxust egy arányos számértékké alakítja át az elektronika (A/D konverzió, VII/1.5.1), s ezt a számot hozzárendeljük az éppen megvilágított térfogatelemhez (ill. a kétdimenziós képben ennek megfelelő ponthoz). Az így létrejött digitális képeket számítógép tárolja. Háromdimenziós képek létrehozásához a mikroszkóp típusától függően az objektív, vagy a tárgyasztal helyzetét változtatjuk lépésekben, és minden pozícióban felvesszük a fókusz sík kétdimenziós képét. A z lépések nagysága általában néhány száz nm-től néhány mikronig terjed, szűkebb apertúránál kisebb az optikai szeletvastagság, így kisebb z lépések is értelmet nyernek, de a jel-zaj arány csökken.

A képalkotás, ha keskenyebb rétegből, élesebb fókusz síkban történik is, hagyományos optikai képalkotás, így az Abbe-féle feloldási korlátok érvényben vannak. A kép feloldása az x - y síkban ennek megfelelően néhány száz

nm az emittált (ill. visszavert) hullámhossztól függően. A konfokális mikroszkópiában, tekintve hogy egyszerre egy igen kicsiny térfogatelemet világítunk meg kollimált lézersugárral, és az ebből származó jelet detektáljuk, úgy is fogalmazhatunk, hogy a feloldóképességet az szabja meg, hogy mennyire kicsiny, mennyire pontszerű ez a kis térfogatelem. A kép nyilván annál élesebb, minél kisebb a fénypont szétterülése, vagyis, minél kisebb kiterjedésű az ún. „point spread function”. Ennek a függvénynek az ismerete lehetővé teszi, hogy matematikailag leírjuk a minta pontjainak optika általi „szétterítését”, és ezt akár korrekcióba is vehetjük a kép feldolgozása során. Mint a X.24. ábrán látszik, a fókuszált lézernyaláb által legnagyobb fotonűrűséggel megvilágított térfogatelem egy forgási ellipszoidnak felel meg, melynek x - y irányú mérete diffrakciólimitált. Z irányban a fókusz síkban maximális a fotonűrűség, tehát onnan származik a legtöbb jel, de az optikai tengely mentén a megvilágító fény a minta teljes vastagságán áthalad. A konfokális apertúra szolgál arra a célra, hogy a fókusz síktól távolodva egyre nagyobb arányban zárjuk ki az emittált, vagy visszavert fotonokat a képalkotásból. Mindezekből arra következtethetünk, hogy a konfokális feloldás két faktortól függ: a megvilágított térfogatelem nagyságától (mennyire kis térfogatba tudjuk a fotonok többségét „belezsúfolni”), és a detektált térfogat nagyságától (mennyire tudjuk a számunkra érdektelen fotonokat kirekeszteni a képalkotásból). A két térfogatelem manipulálása lehetőséget ad a konfokális mikroszkóp feloldóképességének további növelésére. Három, a mindennapok kutatási gyakorlatába bevonulófélben lévő alapvető módszerről érdemes említést tenni: a kétfotonos gerjesztésről, a teta mikroszkópiáról, és a 4π mikroszkópiáról. Ezekon felül számos egyéb, a nemlineáris optika jelenségeit kihasználó módszer áll fejlesztés alatt jelenleg is.

A modern, nagy teljesítményű asztali számítógépek ugyancsak hozzájárultak ahhoz, hogy a Davidovitz és munkatársai által 1969-ben megkonstruált CLSM elterjedjen és valóban igen használható készülékké váljon. Kiindulópontnak bizonyos értelemben Nomarski (1955) differenciál-interferencia-kontraszt optikai mikroszkópját tekinthetjük abból a szempontból, hogy optikai szeletelésre alkalmasnak bizonyult, s ezzel a a Zernike-féle hagyományos fáziskontraszt-mikroszkópot (lásd VI/2.3.5.) jelentősen felülmúlta. A CLSM működési elve ezektől eltérő, de mint azt a X.24. ábra is mutatja, a készülék alig valamivel bonyolultabb, mint a hagyományos optikai mikroszkóp, mégis forradalmasította a biológiai ismeretek szerzésének lehetőségeit. A X.25. ábra olyan sejtnek az átmetszetét mutatja, amely a valóságban még majdnem teljesen ép, eltekintve attól, hogy egy természetes ölésejt (natural killer sejt, egy speciális limfocita-fajta) éppen a felvétel idején öli meg, mert felismerte, hogy daganatsejt.

A pásztázóerő és lézer konfokális mikroszkópiák forradalmasították nem csupán a felületi, alkalmazott biofizikát, de a sejtbiológiát és sok szempontból a biokémiát is. E módszereknek a rutin laboratóriumi diagnosztikába való bevezetése valószínűleg csak idő kérdése. A felhasználást és a széles körű alkalmazást feltehetőleg pozitívan fogja befolyásolni, hogy e módszerek, illetve műszerek ugyan egyelőre még elég drágák, de lényegesen olcsóbbak az elektronmikroszkópoknál, és az is, hogy gyakorlatilag a minták természetes, natív állapotában alkalmazhatóak.

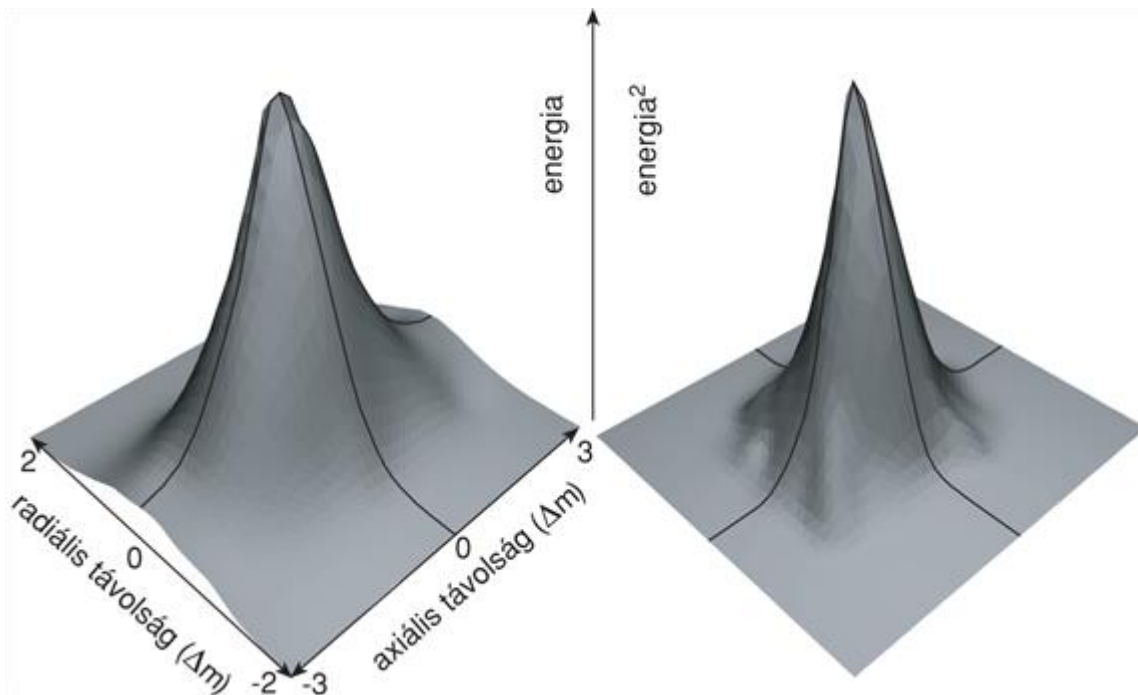


X.25. ábra. a) Immunofluoreszcens jelöléssel láthatóvá tett természetes ölösejt (NK) és az általa megtámadott T-sejt konfokális mikroszkópos „optikai metszete”. b, c, d) Immunofluoreszcens módszerrel jelölt EGF-receptorok konfokális mikroszkópos képe emlőtumorsejteken. b) „Optikai metszetek” a minta különböző mélységben elhelyezkedő rétegeiből. c) Az optikai metszetek egymásra vetített képe. d) A minta oldalnézeti képe. Ilyen látószögből valójában nem is készül felvétel, a képet a rétegekről készült felvételek alapján a számítógép hozta létre

A konfokális mikroszkóp feloldóképességének javítási lehetőségei

Többfotonos gerjesztés. A Goepert–Mayer által már 1930 körül elméletileg megjósolt két- vagy többfotonos gerjesztés a CLSM lehetőségeit jelentősen továbbfejlesztette. Igen kis valószínűséggel előfordulhat, hogy az egy elektron gerjesztéséhez szükséges fotonenergiát egy molekula elektronrendszere nem egy foton elnyelésével, hanem pl. két, együttesen a gerjesztési energiával azonos energiát szolgáltató foton azonos idejű elnyelésével kapja meg. Egy fluoreszcencián alapuló mikroszkópi vizsgálatnál ez annyit jelent, hogy a festéknek a látható fény tartományába eső gerjesztési energiáját pl. feleakkora fotonenergiájú, azaz az IR-tartományba eső fotonokkal is ki lehet váltani, ha az IR gerjesztő nyaláb megfelelően nagy intenzitású. Mivel egy foton elnyelési valószínűsége a foton-sűrűséggel arányos, két foton egyidejű elnyelésének valószínűsége a foton-sűrűség négyzetével lesz arányos. Az 1. ábrán a foton-sűrűség, valamint négyzetének az eloszlása az x és a z tengely mentén látható. Nyilvánvaló, hogy a sűrűség-négyzet-függvény mind x , mind z irányban jelentősen keskenyebb eloszlást mutat, tehát a kétfotonos gerjesztéssel kiválasztott térfogatelem minden dimenzióban kisebb az egyfotonos gerjesztés térfogateleméhez képest.

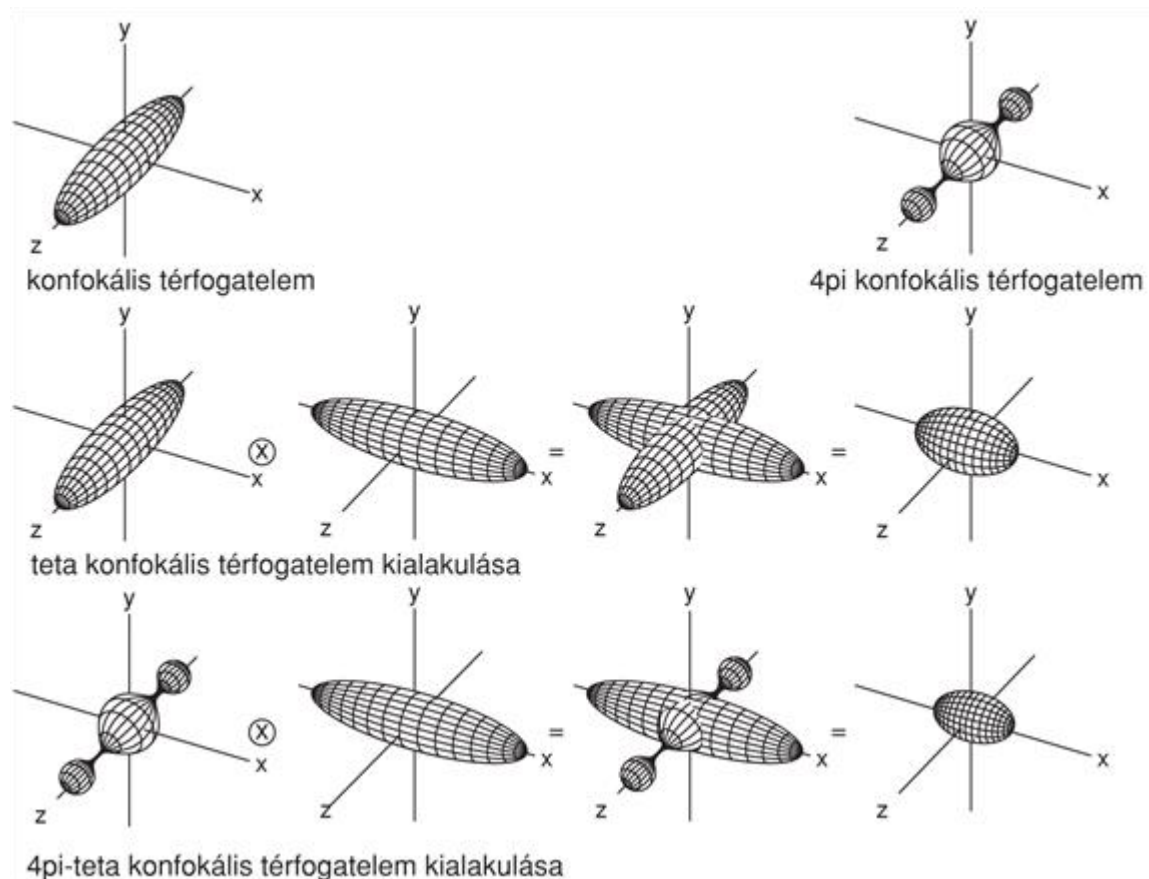
Így önmagában nagy intenzitású lézernyaláb fókuszálásával ki lehet választani a minta azon mélységű elemét (pásztázás esetén síkját), ahonnan a gerjesztés hatására fluoreszcencia-jel várható. Tehát a jelenség konfokális optika nélkül is megoldja a mélységbeli felbontás problémáját, hozzávetőleg a konfokális mikroszkóppal azonos feloldást biztosít. Konfokális optika mellett alkalmazva pedig tovább javítja annak feloldóképességét. A módszer másik nagy előnye, hogy az IR-tartományú gerjesztő fény behatolási mélysége jóval nagyobb, mint a látható tartományú fénysugaraké (lásd II/2.3.3.), tehát a mélyen fekvő rétegek, sejtek, vastagabb szövetek is jól vizsgálhatók. A harmadik előny, hogy a kétfotonos gerjesztésnél a fluoreszcens festékek kiegészése (fotoelhalványulása) csak a konfokális síkban történik, hiszen csak itt történik meg a festékmolekulák gerjesztése. A klasszikus konfokális mikroszkópnál ugyanakkor a fókusz sík alatt és felett is gerjesztődnek bizonyos mértékig a fluoreszcens molekulák, így előfordulhat az, különösen fotoelhalványításra érzékeny festék (pl. fluorescein) esetén, hogy mire a fluoreszcens jelölt objektumok utolsó síkjairól készítünk felvételt, a fluoreszcens jel a háttérrel lesz közel egyenlő, lehetetlenné téve a háromdimenziós kép reális rekonstrukcióját.



1. ábra. Az energia térbeli eloszlása lézernyalábban

4Pi mikroszkópia. A fénymikroszkóp felbontóképességének tárgyalása során (lásd VI/2.2.2.) láttuk, hogy az a megvilágító és detektáló optikai rendszer (kondenzor és objektív) numerikus apertúrájával arányos. Az is kiderült, hogy egy jó minőségű objektív NA-értéke sem haladhatja meg ($n = 1,5$ törésmutatójú közeg esetén) az 1,5-ös értéket, hiszen az objektív látószöge 180° alatti lehet csak. Ha azonban két nagy NA-jú objektívet irányítunk egymással szemben egy vékony mintára úgy, hogy azok elülső fókuszsíkjai egybeesnek, és mindkettőt egyaránt használjuk megvilágításra és detektálásra, a kettő NA-ja összeadódik. Ekkor a fotongyűjtő képesség megduplázódik, hiszen a teljes 4π térszöget megközelítő maximális látószög alatt gyűjtjük az emittált fotonokat – innen nyeri a módszer a nevét. A 2. ábrán látható, hogy a 4Pi konfokális térfogatelem z irányban jelentősen rövidebb a hagyományos konfokálisnál, de két, potenciálisan zavaró melléklobey is létrejön. Az utóbbiakból származó jel a point spread function ismeretében matematikailag korrekcióba vehető, levonható. A módszer elsősorban a z irányú feloldást javítja, de az x - y síkban is eredményez némi javulást.

Tetamikroszkópia. Mint a konfokális mikroszkópia tárgyalása során említettük, a megvilágított és detektált térfogatelemek együttesen szabják meg a feloldást. A teta mikroszkópia során ezt úgy használjuk ki, hogy egymásra merőlegesen (vagy ahhoz közeli szögben) helyezzük el a megvilágító és a detektáló objektíveket. A gerjesztett és a detektált forgási ellipszoid így egymásra merőleges (lásd 2. ábra), a metszetük pedig egy lényegesen kisebb méretű, kissé megnyúlt gömbölyded térfogatelem. Mind z , mind x - y irányban javíthatjuk ezzel a módszerrel a konfokális mikroszkóp feloldását. A tetamikroszkópia kombinálható a 4Pi metodikával is, ami tovább javítja a feloldást (lásd 2. ábra), azonban mivel ehhez három nagy NA-jú objektívet kell a minta köré közös fókusszal elhelyezni, a megközelítés kevésbé praktikus.



2. ábra. A térfogatelem alakja különböző konfokális mikroszkópokban

Fluoreszcencia-korrelációs spektroszkópia: a konfokális térfogatelem speciális kiaknázása

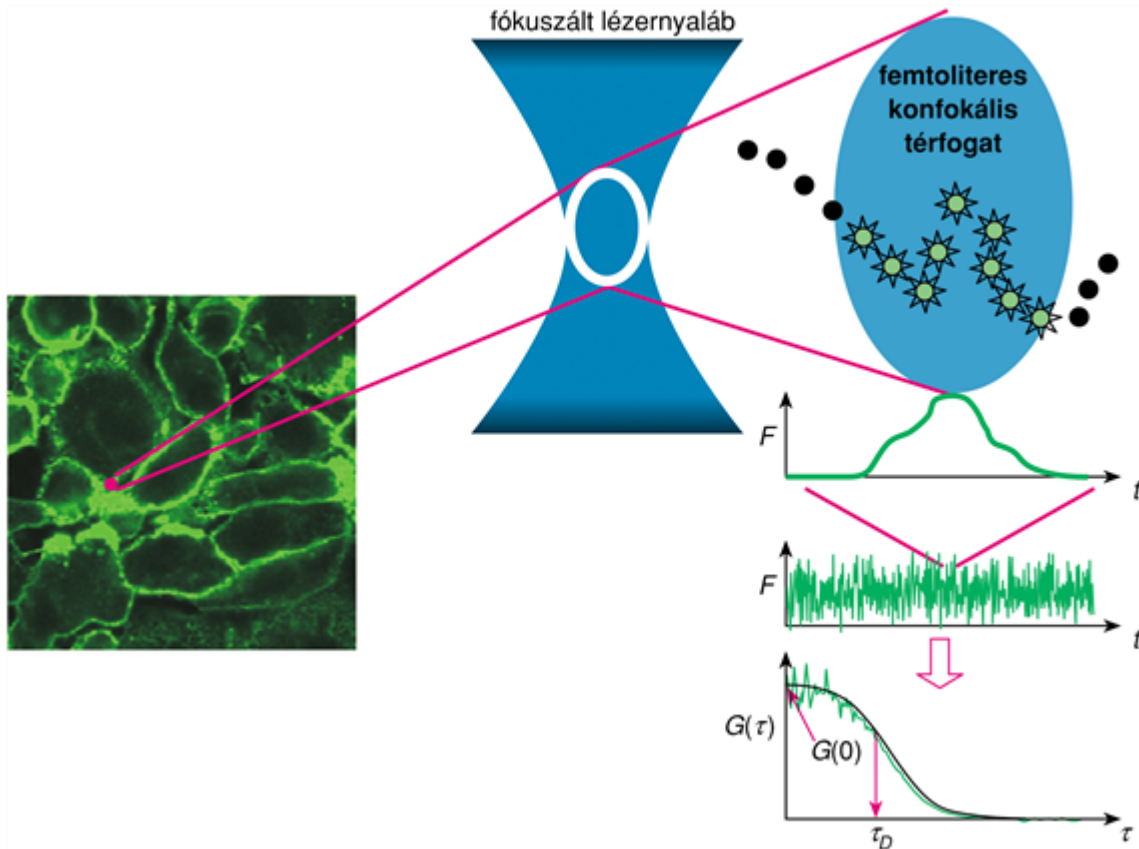
A konfokális térfogat kicsinységét, femtoliteres nagyságrendjét felhasználhatjuk egyedi molekula érzékenységu korrelációs spektroszkópiái mérések kivitelezéséhez is. A mérés a vizsgált molekulák által emittált fluoreszcencián alapszik, ezért fluoreszcencia korrelációs spektroszkópiának (fluorescence correlation spectroscopy, FCS) nevezik. Alapja, hogy a fluoreszkáló molekulák diffúziójuk során „beúsznak” a megvilágított konfokális térfogatba, ott fluoreszcens jelet adnak, melyet érzékeny lavina-fotodiódával detektálunk, majd mikor a térfogatból kilépnek, a jel megszűnik (1. ábra). Amennyiben elég kicsiny a megfigyelt

térfogat és elég híg a fluorofórokra nézve az oldat, adott megfigyelési intervallumban csak egy vagy néhány molekula tartózkodik a konfokális térfogatban. Mivel ekkor a molekulák száma a térfogatban statisztikus (Poisson) ingadozást mutat, az időben regisztrált $F(t)$ fluoreszcencia függvény is fluktuációkat fog mutatni. A fluktuációkból a X/1.3 fejezetben ismertetettek szerint autokorrelációs függvényt számíthatunk. A $G(\tau)$ autokorrelációs függvény alakját a konfokális térfogat alakja, mérete, valamint a fluoreszkáló molekulák abszolút koncentrációja és diffúziós állandója fogja megszabni. Az ábrán látható példában egy sejtmembránban diffundáló fluoreszcensen jelzett receptorról szeretnénk információt szerezni. Ez esetben az autokorrelációs függvényt a

$$G(\tau) = \frac{1}{N} \cdot \frac{1}{1 + \frac{\tau}{\tau_D}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\tau}{S^2 \cdot \tau_D}}}$$

képlettel illeszthetjük, ahol N a térfogatelemben átlagosan található fluoreszkáló részecskék száma, $\tau_D = \omega_{xy}^2 / 4D$ az ún. diffúziós korrelációs idő, amely a membránban történő kétdimenziós diffúzió miatt a konfokális térfogat sejtmembrán általi elmeszesítésének ω_{xy} sugarától és a D diffúziós állandótól függ, $S = \omega_z / \omega_{xy}$ pedig a konfokális térfogat axiális (hosszabb) ω_z sugarának aránya a horizontális ω_{xy} sugarhoz képest. A megillesztett függvényből az ω_{xy} és ω_z sugarak ismeretében a D diffúziós együttható, a konfokális térfogat és a benne átlagosan található molekulák száma ($N = 1/G(0)$, ahol $G(0)$ a $\tau = 0$ értékre extrapolált $G(\tau)$ érték) egyetlen mérésből meghatározható. A térfogat és N ismeretében pedig a vizsgált molekulák abszolút koncentrációja is kiszámítható.

A diffúziós állandó korrelációs spektroszkópiával történő mérésének speciális esete, mikor két különböző fluorofórral jelölt molekula együttes diffúzióját vizsgáljuk. Ekkor a X/1.3. fejezetben ismertetett képlet annyiban módosul, hogy az egyik fajta molekula t időpillanatban mért fluoreszcenciáját a *másik fajta* molekula különféle időközök múlva mért jeléhez viszonyítjuk. Ez a keresztkorrelációs spektroszkópia (fluorescence crosscorrelation spectroscopy, FCCS). Amennyiben a két jel egymással is korrelációt mutat, a közös diffúziós korrelációs idő a két molekula komplexének diffúziós ideje lesz, és az, hogy ilyenkor az ún. keresztkorrelációs függvény egyáltalán kialakul, annak a csalhatatlan jele, hogy a kétfajta jelölt molekula populációban vannak olyan egyedek, melyek stabilan komplexet alkotnak legalább annyi időre, amennyi a konfokális térfogaton együtt történő átdiffundáláshoz szükséges. Ezt nevezhetjük az „együtt mozgás” jelenségének, amely egy dinamikus módszerrel feltárt, időben állandó (statikus) asszociációra utal, szemben pl. a X/1.1.1 alatt leírt fluoreszcenciarezonancia-energiatranszfer módszerrel demonstrálható „pillanatnyi együttállással”.



Fluoreszcensen jelölt receptorok diffúziójának mérése élő sejtek membránjában. A fókuszált lézernyalábbal megvilágított femtoliter nagyságú konfokális térfogatba belépő és onnan kilépő fluoreszkáló molekulák a nagy érzékenységgel detektált $F(t)$ időbeli fluoreszcencia-függvényben fluktuációkat okoznak. Az $F(t)$ függvényből generálható $G(\tau)$ autokorrelációs függvény segítségével a molekulák átlagos $N=1/G(0)$ száma és $D = \omega_{xy}^2 / 4\tau_D$ diffúziós együtthatója egy mérésből meghatározható.

A módszer természetesen nem csak a diffúzióból eredő fluktuációk analizésére alkalmas; a különféle kémiai reakciók, a fluorofór gerjesztése kapcsán kialakuló triplétt állapotok sebességi állandói is meghatározhatók segítségével. Legelterjedtebb a gyógyszeriparban, ahol molekuláris kölcsönhatások úgy vizsgálhatók vele nagyon egyszerűen és gyorsan, hogy az egyik vizsgált molekulát szilárd fázishoz vagy lassan diffundáló nagyméretű részecskékhez kötik, és a hozzávegyített másik molekula diffúziójának megszűnéséből vagy lassulásából következtetnek a kölcsönhatásra. Sejteken történő alkalmazása egyelőre nem tartozik a rutinmérések közé, de az eddigi eredmények alapján úgy tűnik, a sejtmembránon lejátszódó, vagy a sejten belüli molekuláris kölcsönhatások (pl. ligandum és receptor, DNS és transzkripciós faktor) vizsgálatára jól használható. Az a tulajdonsága, hogy a viszonylag kis koncentrációk esetén megjelenő fluktuációk mérésén alapszik, különösképpen hasznossá teszi az alacsony expressziós szintű, ritka molekulák vizsgálatában.

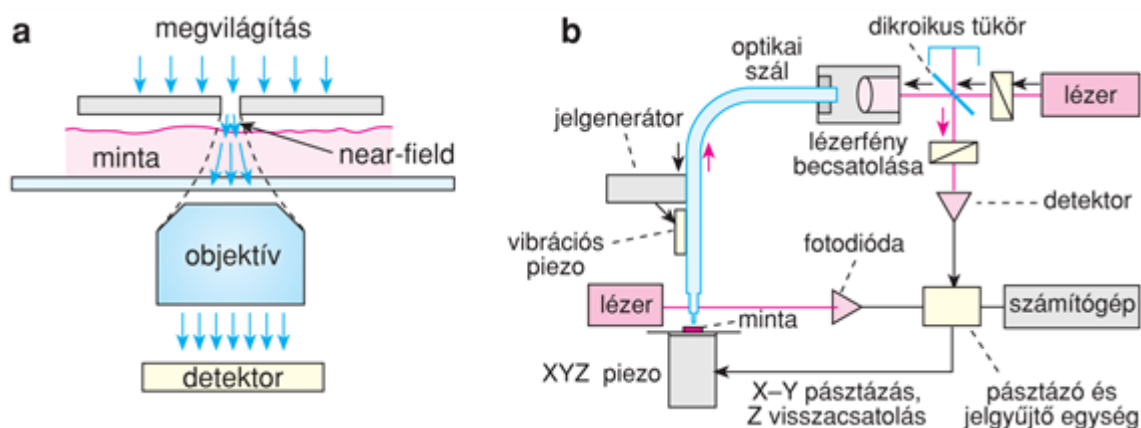
3.2. X/3.2. A közeli mező optikai mikroszkópia, NSOM

A közeli mező optikai mikroszkópia (nearfield scanning optical microscopy, NSOM) valódi optikai módszer, melynek tárgyalása mind a pásztázómikroszkópiák, mind a nagy felbontású optikai mikroszkópiák között helyénvaló. A módszer alapja a diffrakcióhatárolt képalkotás megkerülése. A vizsgálandó minta minél kisebb pontjának megvilágítására a konfokális és egyéb, az előző fejezetben említett mikroszkópiák az Abbe-elvnek engedelmeskedő optikát használnak, tehát a megvilágított térfogatelem méretét a diffrakciós küszöb szabja meg. Ha ezt a megvilágító optikát, mely a párhuzamos, koherens fénysugarakat kis pontba fókuszálni hivatott, elhagyjuk, és helyette csupán egy igen kicsiny nyílást alkalmazunk, melyen át a nyílás méretével nagyjából egyező felületet világítunk meg, a diffrakciós küszöb helyett a nyílás (apertúra) mérete szabhatja meg a feloldást. Azonban ez csak akkor érvényesülhet, ha diffrakció nem lép fel, és ehhez az apertúrának a hullámhossz törtrészig (néhány 10 nm-ig) meg kell közelíteni a megvilágított felszint. Ekkor az apertúryanílásnál keletkező ún. közeli mező (nearfield) lép kölcsönhatásba a fluorofórokkal, innen ered a módszer neve. Az elmondottakból az is kiviláglik, hogy a Lewis, Fischer, Pohl és munkatársai által létrehozott

NSOM-mikroszkóp elsősorban az apertúrához közel eső felszín vizsgálatára alkalmas (bár a közeli mező – a megvilágító apertúra fizikai szerkezetétől, geometriájától függően – bizonyos mélységre képes a felszín alá is behatolni transzparens anyagok esetén).

A megvilágítás céljára többnyire száloptikát használnak, amely elég hajlékony ahhoz, hogy a lézertényforrásból a felszín fölé vezesse a fotonokat, és a felszín fölötti pásztázást is megengedje. A száloptika végét a patch-clamp pipetták húzásához hasonló módszerrel szokás elvékonyítani. A szál külső burkolatát a kihúzott részen az elvékonyításhoz el kell távolítani, így ott a teljes visszaverődés burok híján nem teljesülhet. Ha meg kívánjuk akadályozni, hogy a kihúzott rész oldalán is fotonok lépjenek ki, vékony fémgözzel vonhatjuk be ezt a részt.

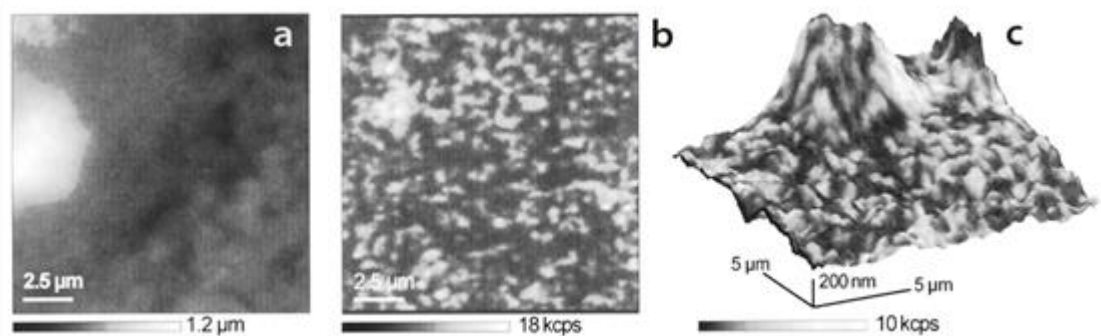
A felületelem megvilágítását követően a fotonok szóródhatnak vagy fluorofórok gerjeszthetnek. A szórt vagy emittált fotonokat kétféleképpen detektálhatjuk. Elhelyezhetünk egy nagy NA-jú objektívet a távoli mezőben (X.26a ábra), vagy a megvilágító apertúrán belépő fotonokat is detektálhatjuk (X.26b ábra). Ez utóbbi esetben az epifluoreszcenciás mikroszkóphoz hasonlóan dikroikus tükröt használhatunk a gerjesztő és az emittált fotonok szétválasztására.



X.26. ábra. a) Közeli mező-gerjesztés és távoli mezőben való detektálás NSOM-mikroszkópban. b) Közeli mező-gerjesztésen és -detektálás alapuló NSOM felépítése. A fluoreszcens jelet itt ugyanaz az optikai szál gyűjti össze, amelyik a gerjesztő lézertényt a mintához vezeti

A korrekt méréshez, képalkotáshoz elengedhetetlen, hogy az apertúrát a felszín felett egyenletes magasságban tartsuk. Ehhez legalkalmasabb egy, az AFM-ben is alkalmazott pásztázó és magasságbeli visszacsatolást végző szerkezet, ami a kétdimenziós fluoreszcenciás (vagy reflexiós) kép létrehozása mellett a felszín domborzati viszonyairól is képet tud alkotni. Az NSOM az AFM-hez képest gyengébb domborzati és oldalirányú feloldást biztosít (ez utóbbi kb 30–100 nm), viszont nagy előnye, hogy specifikus fluoreszcens (pl. immunfluoreszcens) jeleket képes detektálni, és más spektroszkópiai módszerekkel is kombinálható. Emellett egyedi molekulák érzékeny megfigyelésére is alkalmazható.

A X.27. ábra sejt felszíni receptorok aggregációját mutatja a receptorokhoz kötött fluoreszcenciás jelzőanyag indukált fénykibocsátása segítségével. Míg az atomerő-mikroszkópia nem képes a fénykibocsátást érzékelni és így a felszíni struktúrák azonosítása nehezebb, a near field optikai spektroszkópia rendelkezik a fluoreszcenciás azonosítás minden előnyével.



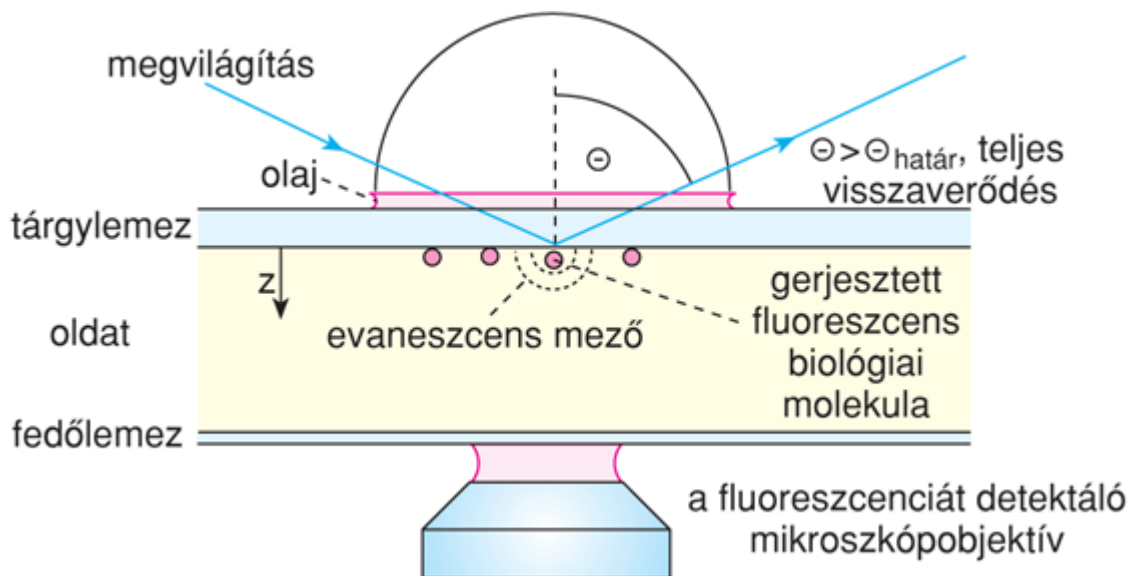
X.27. ábra. Fluoreszcensen jelölt emlő-tumorsejtek NSOM-mikroszkópos képe. a) Domborzati kép; a szürke árnyalatai a sejt magasságviszonyait jellemzik. b) Fluoreszcenciaintenzitás-eloszlási kép; a szürke árnyalatai a fluoreszcens monoklonális antitesttel megjelölt sejtfelszíni receptorok sűrűségét jellemzik. c) Kombinált kép, amelyen a domborzatot a térhatású ábrázolás, a fluoreszcencia- intenzitást pedig a szürke árnyalatai jelenítik meg

3.3. X/3.3. „Tovatûnô” (evaneszcens) fluoreszcencia

Molekuláris kölcsönhatások irányítják és szabályozzák a biológiai folyamatokat a sejtek életfolyamatai és a sejtek közötti információcsere során. Ezeknek a kölcsönhatásoknak a teljes megértése szükségessé teszi egyetlen molekula-pár közötti kölcsönhatás fizikai természetének vizsgálatát. A fehérje-fehérje, fehérje és DNS vagy RNS, vagy bármilyen más (makro-) molekuláris kölcsönhatás tanulmányozását az tette lehetővé, hogy olyan vizsgálati rendszereket hoztak létre, amelyek két molekula kölcsönhatása során optikai vagy elektromos jeleket bocsátottak ki. Ezeknek a jeleknek az analízise tette lehetővé az egyetlen molekulapáron lejátszódó intermolekuláris folyamatok vizsgálatát.

Az egyik ilyen módszer a fluoreszcencia egy különleges formáján alapul. Ha olyan igen vékony optikai visszaverő felületet tekintünk, amely adott fénycsugár teljes visszaverődését teszi lehetővé, akkor a teljes visszaverődés klasszikus fizika értelmezése szerint annak valószínűsége, hogy a teljes visszaverődés során a fénycsugár (vagy bármilyen elektromágneses sugárzás) egyéb hatásokat is kifejtsen, gyakorlatilag nulla. Ha azonban a teljes visszaverődés térbeli helyéhez elegendően közel (molekuláris nagyságrendű közelségben) az adott fénycsugár abszorpciójára képes molekulát helyezünk el, az képes a kialakult elektromágneses térből mintegy „ellopni” egy kvantumot. Ez elegendő lehet a molekula gerjesztéséhez és fluoreszcencia – azaz érzékelhető fényjelenség – kiváltásához. A „molekuláris közelség” feltételezi, hogy a közeli molekula a teljes visszaverődést szenvedő fénycsugár elektromágneses terében van. A jelenség neve teljes belső visszaverődés kiváltotta fluoreszcencia (total internal reflection fluorescence, TIRF).

Ahhoz, hogy ezeket a jelenségeket megérthessük, először a teljes visszaverődés fluoreszcencia-jelenségét kell megvizsgáljunk. Az optika elemeiből ismert, hogy ha fénycsugár esik egy olyan felületre, amelyet a beesés irányából magasabb törésmutatójú közeg határol el egy alacsonyabb törésmutatójú közegtől, akkor egy adott kritikus szögnél ($\Theta_{\text{határ}}$) nagyobb szögben beeső valamennyi fénycsugár teljes visszaverődést szenved, ahol $\Theta_{\text{határ}} = \arcsin(n_2/n_1)$, és n_1 és n_2 az első és a második közeg törésmutatói (X.28. ábra).



X.28. ábra. Az evaneszcens fluoreszcencia vizsgálata

Az ún. evaneszcens elektromos erőtér intenzitása a két törőközeg határára merőleges irányba exponenciálisan csökken. Azaz:

$$J(z) = J_0 e^{-z/d} \quad (\text{X.25})$$

ahol z a határfelülettől mért távolság és d a behatolási mélység a kritikus szögnél nagyobb szögben beeső hullámok esetében. A fluoreszkáló festék, ha elegendően közel van az elektromágneses térhez, abból „ellop” egy foton és ezáltal gerjesztődik.

Ezáltal minden háttér-fluoreszcencia nélkül lehetséges egyetlen molekula gerjesztése és a kiváltott fluoreszcencia érzékelése, mivel más azonos tulajdonságú és abszorpcióra képes molekula jelenléte azonos közelségben nagyon kicsi. Így tehát az egyetlen molekula fluoreszcenciájának az érzékelése megvalósítható. Az ilyen módon elvégzett kísérletek tették lehetővé a molekuláris kölcsönhatások eddigi legfinomabb felbontású meghatározását. Megmérték a miozin és az aktin molekula kölcsönhatását, egyetlen ATP bomlásából felszabaduló energia által létrehozott aktinszál összehúzódásának erőviszonyait stb.

3.4. X/3.4. Az optikai csipesz

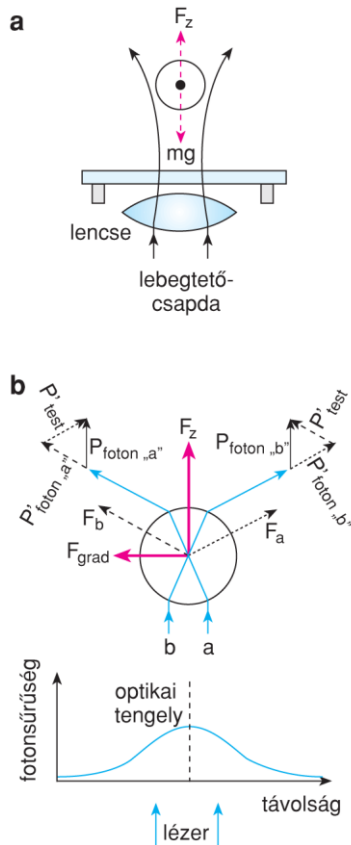
A sejtbiológiai manipulációk új fegyvereként terjed az ún. optikai csipesz. A sejtek pusztá megfigyelését a sejtbiológiában korán felváltotta vagy kiegészítette a sejteken végzett rendkívül nagy felbontású és finomságú műveletek sora. A biokémiai preparatív módszerek igen gyakran nem egyebek, mint sejtek nagy tömegén véghezvitt eljárások, amelyek végén valamilyen sejtalkotó részt a sejt feltárása és homogenizálása, azaz összetörése árán tisztán állítunk elő. Ezekből a mintákból a molekuláris biológiai analízis szinte csodákat művelve igen értékes megállapításokat tesz. Sem az előbbi, sem a modern szövettenyésztő eljárások bevezetése és az egyedi sejtanalízist nagyszámú sejten rövid idő alatt lehetővé tevő áramlási citometria nem teszi azonban lehetővé egyedi sejtek közötti kölcsönhatások reprodukálható megfigyelését.

Az optikai csipeszek (optical tweezer) vagy más néven optikai csapdák (optical traps) bevezetése különleges lehetőséget kínál a sejtbiológiai kutatásokban. Egyetlen sejtet, mikroszkópos megfigyelés és megfelelő protokoll szerinti kezelés után fel tudunk emelni anélkül, hogy észrevehető mértékben sérülne, és szinte tetszőleges helyre (másik közegbe, másik sejt mellé stb.) áthelyezhetjük, miközben a rendelkezésünkre álló optikai és spektroszkópiás módszerekkel megfigyeléseket végezhetünk. Egyedi kémiai kötések erősségét lehet megmérni optikai csipeszek kombinált alkalmazásával. Sejteken belüli részecskéket lehet áramlásukban feltartóztatni szinte tetszőleges ideig. Molekulákra lehet csomót kötni és ezáltal a kémiai kötések „hajlíthatóságát” vizsgálni.

Artur Ashkin 1970-ben alkotta meg az optikai csapda vagy népszerű nevén lézer-„csipesz”-nek nevezett eszközt, amely két évtized alatt mind az atomfizika, mind a biológia és a biofizika igen fontos eszközévé vált. A jelenség önmagában igen egyszerű. Ashkin a fénynyomás hatásának vizsgálatára irányuló mikroszkópos vizsgálatok során megfigyelte, hogy a plazmatikgömböcskék lézersugárzás hatására adott magasságba felemelkednek, és ott maradnak egészen a lézer kikapcsolásáig. A jelenség, amelynek megértéséhez a X.29. ábra nyújt segítséget, alkalmas arra, hogy töltetlen részecskéket mintegy optikai csapdába ejtve azokat helyzetükben rögzítse, illetve közvetlen környezetükből kiemelve más környezetbe átvigye.

Mikroszkópban fókuszált lézersugár képes részecskéket a fókuszpontban csapdába ejteni és a sugárzás intenzitásától függően ott tartani. A X.29b ábra mutatja, hogy az optikailag sűrűbb közegbe belépő és az optikailag ritkább közegbe kilépő fénysugár törése nyomán olyan erőkomponensek jönnek létre, amelyek az ott lévő részecskéket a fókuszpontba kényszerítik. A sugárzás kikapcsolásakor szabadon engedi a részecskét, amely ezután például leülepszik az alátámasztó üveglemezre. A jelenség mind levegőben, mind vizes közegben létrejön. Amennyiben a részecske fénytörése kisebb, mint a közegé, akkor nem megfogja, de eltaszítja a fénynyomás a részecskét, amit Ashkin eredetileg glicerinben μm átmérőjű levegőbuborékokon tapasztalt.

A biológiai és biofizikai alkalmazásokra koncentrálva könnyű elképzelni, hogy milyen sejt- és molekuláris biológiai kísérleti lehetőségeket kínál a jelenség. Sejteket (és molekulákat) emelhetünk fel, mozgathatunk vagy rögzíthetünk struktúrájuk megsértése nélkül. Azelőtt a fantázia birodalmába tartozó kísérletek váltak elvégezhetővé, nm-es elmozdulások és pikonewtonos (pN) erők mérhetővé. Két sejt kölcsönhatása olyan szinten vált mérhetővé és akár fényképezhetővé, amelyről korábban elképzelésünk sem lehetett.



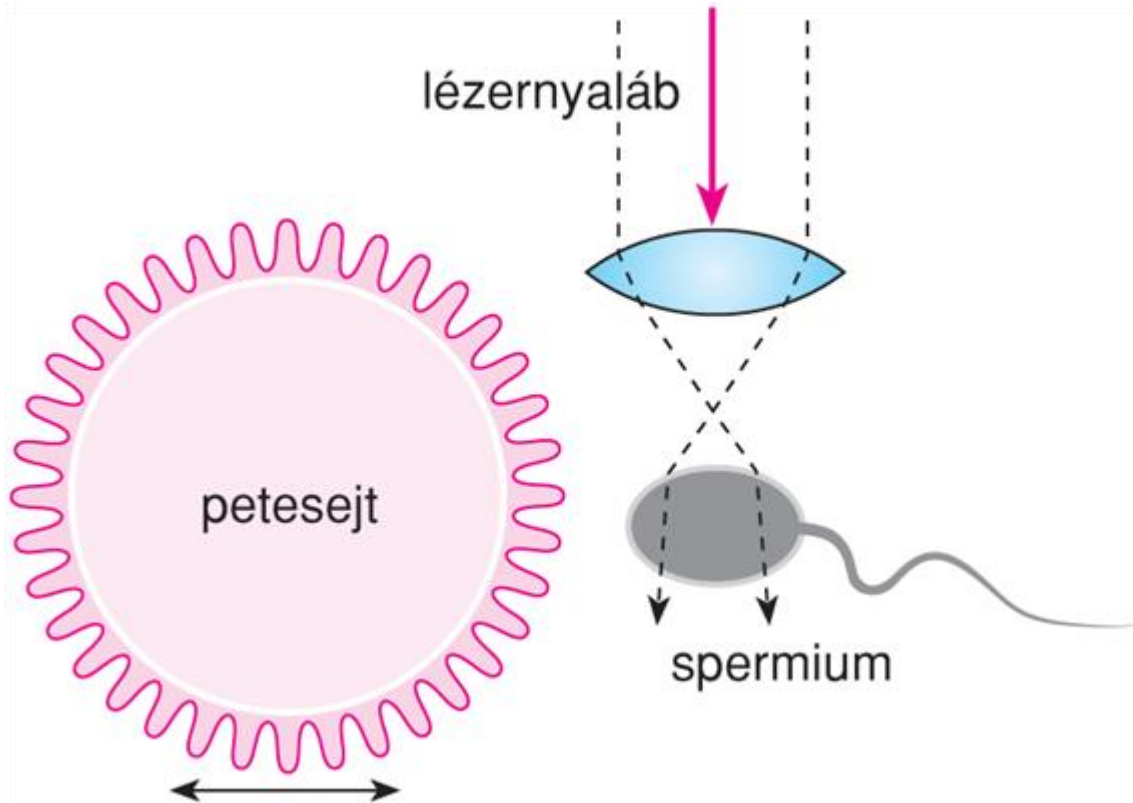
X.29. ábra. a) Optikai csapda. A fénynyomásból származó F_z erő és a gravitációs erő egyensúlyt tart egymással.
b) A fénynyomásból származó eredő erő fókuszáló hatása

Mint a X.29. ábra mutatja, a részecskébe behatoló lézersugárral a manipuláció lehetősége a sugárnyomás erején múlik. Ezek az erők a sugárzás impulzusán alapulnak. Inkoherens sugárzással ezen erők földi körülmények közötti alkalmazása szóba sem kerülhetett, bár a csillagászat régen tudja, hogy sugárnyomás jelentős anyagmennyiségek mozgatására képes. A lézerek (amelyeket sugárzási intenzitásuk valamennyi eddig ismert anyag megolvasztására és elpárologtatására is alkalmassá tehet) rendkívüli intenzitású sugárzásuk révén új helyzetet teremtettek.

Az új manipulációs lehetőség jelentőségét az adja, hogy a lézersugárzás hullámhosszától és intenzitásától függően atomi részecskéktől és molekuláktól egészen a sejtekig fizikai és biológiai rendszerek sokasága tanulmányozható egyedenként, és a kísérletek tervezésének szinte csak a fantáziánk szab határt.

Yanagida japán kutató képes volt a miozin és aktin közötti kölcsönható erők direkt mérésére és annak meghatározására is, hogy a miozinmolekula az aktinon 5,3 nm-es lépésekkel halad. Ezeket a méréseket két parányi plasztikgömböcskéhez kötött molekulákon végezte.

Az ilyen nm-es távolságok és pN nagyságú erők mérése vezetett oda, hogy ma „nanobiológiáról” beszélhetünk. Az atomfizika atomi órákat képes konstruálni „hideg” (1 cm/s sebességű) atomok és optikai csapdák segítségével és az abszolút zérus fokot eddig elképzelhetetlen mértékben (a mikrokkelvin törtrészének értékéig) sikerült megközelíteni. A biofizika olyan eszközt nyert, amely képes intermolekuláris erők egyetlen molekulapáron végzett kísérletes meghatározására, egyetlen kiválasztott spermiumnak a petesejtbe való bejuttatására, mivel a csak igen kevés elnyelődő (például infravörös, 1,06 μm) hullámhosszúságú lézersugarak a sejteket azok sérülése nélkül képesek mozgatni (X.30. ábra). A nagyobb energiájú lézerek segítségével a sejtmembránon akár lyukakat fúrhatunk, és az azokon keresztüli anyagmozgást is vizsgálhatjuk, illetve anyagot juttathatunk be a sejtek belsejébe. A jobban elnyelődő 514,5 nm hullámhosszúságú argonionlézer egyetlen baktériumot is képes kiválasztani és megölni. A jelenséget optocutionnak, fény által okozott halálnak is nevezik.



X.30. ábra. Sejtek manipulálása optikai csipesszel, felhasználás mesterséges megtermékenyítésre

A leírt jelenségsor lehetővé teszi, hogy permanens optikai csapdát hozzunk létre, amely alkalmas szinte tetszőleges objektumok izolált vizsgálatára. A dohánymozzaik-vírus és az *Escherichia coli* baktérium az első optikai csapdával vizsgált anyagok közé tartozik. Vörösvértesteken végzett vizsgálatok során a sejtek alakjának deformálódása mutatta, hogy az optikai csipesz ereje könnyen meghaladja a membrán rugalmas erőinek a nagyságát.

Újabban érdekes kísérletekben bemutatták, hogy a lézercsipeszek képesek például aktinszátra csomót kötni. A szál meghúzása a „csomó”, vagyis a molekula külső felszínének olyan görbülését okozhatja, amelytől az „eltörik”. Ezzel ellentétben a DNS-re kötött csomó nem képes eltörni a DNS-molekulát.

Az optikai csapda kedvelt eszköze a mikrokémiának is. Kísérleteket lehet kombinálni fluoreszcenciával, abszorpciós spektroszkópiával, foto- és elektrokémiával.

Biológiai és biofizikai mérésekre Greulich alkalmazta UV- és infravörös lézerek kombinációját, ahol az UV-lézerrel lehetett például kromozómákat felszabdalni és géneket izolálni. Sejtfúziót lehetett létrehozni két egymás mellé helyezett és lézercsipesszel megfogott, majd UV-lézerrel az érintkezési helyen megsértett membránú sejt között.

A sejtbológiának ez a már nem is olyan nagyon új eszköze számos egyéb sejtbológiai manipulációs lehetőséget kínál. Már most elmondhatjuk, hogy a molekuláris motorok (aktin, miozin) működésének, a kölcsönható erők nagyságának a feltárásában az optikai csipesz vagy más néven optikai csapda alkalmazása döntő szerepet játszott.

Erőhatások a lézercsipeszben

Ashkin átlátszó partikulák mozgását vizsgálta sugárzási térben. A partikulák mozgási paraméterei igazolták a várt sugárnyomási effektusokat, de egy nem várt jelenség is fellépett. A nem várt erőhatás a lézernyaláb széli részéről az alkalmazott fénynyaláb számára átlátszó partikulákat a nagyobb intenzitású középső rétegek felé irányította, és azok ott is maradtak, és amikor a sugárnyalábot mozgatták, követték a mozgást. A X.29b ábra Ashkin eredeti ábrájának egyszerűsített változata. Tekintsünk két párhuzamosan haladó foton (*a* és *b*), melyek a gömb szimmetriatengelyének két oldalán szimmetrikusan hatol be a gömb belsejébe, és annak középpontja felé megtörve áthaladnak rajta. Kilépéskor a két foton ellenkező irányba törnek meg. Az eredeti fotonimpulzusok

(P_{foton}) az optikai tengellyel párhuzamosak, de a kilépő fotonok szöget zárnak be vele (P'_{foton}). Az impulzusmegmaradás törvénye alapján a fotonok a gömbnek P'_{test} impulzusokat adnak át. Az ezekhez kapcsolható erőhatásokat az a és b oldalon lévő fotonokra az F_a , illetve F_b eredő erők írják le. Ha a lézernyalábnan a gömb nem szimmetrikusan az optikai tengelyben helyezkedik el, akkor az optikai tengelyhez közelebb több foton halad át rajta, és így például az F_b erő nagyobb lesz, mint az F_a erő. Emiatt a két erő eredőjének optikai tengelyre merőleges komponense egy, a sugárnyaláb közepe felé mutató, zérustól különböző gradiens erő (F_{grad}) lesz, amely a partikulát az F_a és F_b erők kiegyenlítődéig hajtja a sugárnyaláb közepe felé. Az F_a és F_b erők Z tengely irányába eső vetületének összege pedig az F_z erőt adja, mely az mg gravitációs erővel szemben a részecskét lebegésben tartja.

4. X/4. Rádióspektroszkópiai módszerek: mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR) és elektronspin-rezonancia spektroszkópia (ESR)

Az atommag és az elektronburok mágneses sajátosságai a biológiai anyagszerkezet-kutatás és az orvosi diagnosztikai képalkotás szempontjából nagy jelentőségű fizikai vizsgáló módszerek kialakulásához vezettek. Az elektronburok mágneses vizsgálatát lehetővé tevő jelenséget paramágneses rezonanciának vagy elektronspin-rezonanciának (Electron Spin Resonance, ESR), az atommagok mágneses tulajdonságaira épülő hasonló jelenséget mágneses magrezonanciának (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) nevezzük. Mindkét jelenség alapja a mágneses térbe helyezett minta által történő, rezonanciaabszorpció jellegű elektromágnesesenergia-elnyelés. Előidézésük a rádiófrekvenciás tartományba tartozó elektromágneses sugárzás használatát igényli, ezért a vonatkozó fizikai vizsgáló módszereket összefoglaló néven rádióspektroszkópiai módszereknek is szokás nevezni. Az NMR- és az ESR-módszer biológiai alkalmazása napjainkban igen széles körű, mindkét módszert felhasználják például membránkomponensek mobilitásának mérésére, makromolekulák, többek között enzimek szerkezeti tulajdonságainak felderítésére. A kémiai és a biológiai alkalmazásokban játszott, jelenleg is alapvető szerepe miatt az NMR nagyságrendekkel nagyobb jelentőségűnek bizonyult az ESR-módszerhez képest. Napjainkban az orvosi diagnosztikai módszerek közül kiemelt jelentőségre tett szert a mágneses magrezonancia spektroszkópia alapelveire épülő és a testszöveteket nem károsító képalkotó módszer, a mágneses magrezonancia képalkotás (lásd VIII/4.1.). A két módszer fizikai alapjainak közös tárgyalását követően a fenti okok miatt az NMR tárgyalására fektetünk nagyobb hangsúlyt.

4.1. X/4.1. Az NMR és az ESR fizikai alapjai

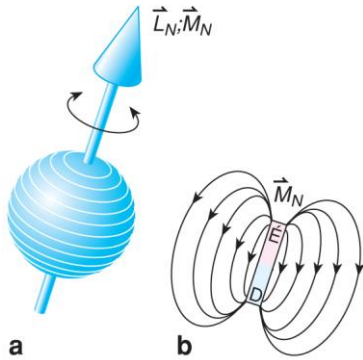
Az NMR- és az ESR-módszer fizikai alapelvei hasonlóak, a két módszer esetében mégis különbségek adódnak a mágneses kölcsönhatások erősségében és irányában tapasztalható eltérések miatt, amelyek végső soron az alkalmazott kísérleti technikák különbözőségéhez vezetnek. Az atommagot alkotó protonok és neutronok, valamint hasonlóan az elektron is feles spinű részecskék. A spin nem más, mint az elemi részecskék (illetve együtteseik) saját perdülete (impulzusmomentuma), az őket jellemző más fizikai mennyiségekhez (pl. tömeg, töltés, méret) hasonlóan a részecskék alapvető fizikai tulajdonságainak egyike. A spin szemléletes jellemzésére és ugyanakkor az NMR-rel és az ESR-rel kapcsolatos sok jelenség részleteinek megértésére célszerű az ún. pörgettyűmodell bevezetése, amikor is az elemi részecske, illetve az atommag saját impulzusmomentumának létét a részecske forgómozgásával hozzuk összefüggésbe (X.31a. ábra).

Az NMR-módszer tárgyalását igen leegyszerűsíti és egyben az ESR-rel közös alapra helyezi, amennyiben az NMR esetében feles spinű magok (mint például a H-atom magja) vizsgálatára korlátozzuk figyelmünket. Ez utóbbi esetben proton mágneses rezonanciáról (PMR) beszélünk. Bonyolultabb összetételű magok spinje viszonylag egyszerűen meghatározható, ui. az atommagon belül is érvényesül egy, a Pauli-elvhez hasonló szabály, amely befolyásolja a különböző energiaszinteken elhelyezkedő eltérő (párhuzamos, illetve ellentett) spin beállású nukleonok számát. Ennek megfelelően minden páratlan tömegszámú mag rendelkezik spinnel, ami alatt az elemi részecskék, illetve azok együttesének impulzusmomentumát értjük. A spinmomentum (L) vektormennyiség, nagysága

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, \quad (\text{X.26})$$

ahol $\hbar = h/2\pi$ és h a Planck-állandó, l pedig az eredő spinkvantumszám. Páratlan tömegszámú mag esetében a spin értéke az $1/2$ páratlan számú többszöröse. A páros tömegszámú magok vagy nem rendelkeznek spinnel, ha a magtöltés páros szám, vagy a spin kvantumszám egész értéket vesz fel, ha a magtöltés páratlan. A biológiai

rendszerrel kapcsolatban leginkább a feles spinű magok vizsgálata került előtérbe, ezek közül is a legfontosabbak a ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F és a ^{31}P .



X.31. ábra. a) A hidrogén magját jelképező gömb saját tengelye körül forog, ennek megfelelően saját impulzusmomentummal (spin) rendelkezik. b) A proton saját mágneses momentummal is rendelkezik, amelyet kis rúd-mágnessel szemléltetünk az ábrán

A **magok töltésének és spinjének együttes** jelenléte a forgó töltés révén saját mágneses momentum (M_N) megjelenéséhez vezet, amely függ a spin nagyságától:

$$M_N = g_N \frac{e}{2m} L = g_N \frac{e}{2m} \sqrt{l(l+1)} \hbar,$$

(X.27)

illetve

$$M_N = \gamma_N L = g_N \mu_N \sqrt{l(l+1)},$$

(X.28)

ahol $\gamma_N = g_N e / (2m)$ a mag giromágneses hányadosa, g_N a mag g faktora, e és m a proton töltése és tömege, $\mu_N = h \cdot e / (2m)$ a mag-magneton. l és g_N értéke magra változik. A töltéssel rendelkező protonok mellett a semleges neutronok is rendelkeznek a protonokéhoz képest kb. 2/3 nagyságú saját mágneses momentummal, amit az őket alkotó részecskék (kvarkok) töltésének a forgástengelytől számított egyenlőtlen térbeli eloszlásával lehet magyarázni. Az elemi részecskék és az atommagok mágneses momentuma, valamint a keltett mágneses erőtér jól modellezhető egy parányi rúd-mágnessel, valamint annak erőtérével (X.31b ábra).

Az **elektronspin mágneses momentumára** az előbbihez igen hasonló kifejezést kapunk, amelyben az elektron g faktora, S a spinkvantumszám és μ_B , a Bohr-magneton szerepel:

$$M_e = -g \mu_B \sqrt{S(S+1)}.$$

(X.29)

Az egyenletbeli negatív előjel az elektron negatív töltéséből adódik.

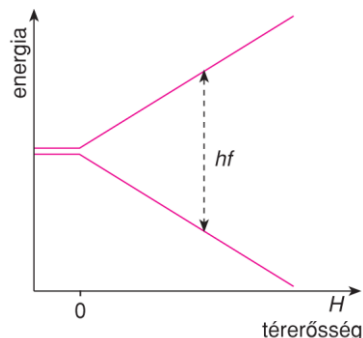
A kvantumelmélet szerint a megengedett spinállapotok kvantáltak és a magspinvektor egy kijelölt z irányra – amely egyben a külső mágneses tér iránya – vonatkozó vetülete, L_z , csak diszkrét értékeket vehet fel. Proton (a legegyszerűbb mag) esetén $L_z = \pm 1/2 h$, ahol $+1/2$ és $-1/2$ a mag spinmágneses kvantumszáma által felvehető lehetséges értékek. Hasonló kvantálás érvényes az elektron saját (spin) impulzusmomentumára is.

Külső mágneses tér (H_0) jelenlétében a tér és a mágneses momentum kölcsönhatása eredményeként a proton (és hasonlóan az elektron) energiaszintje felhasad két energiaszintre, amelyek közül az alacsonyabbik a részecske alap, a magasabb pedig a gerjesztett állapotának felel meg (X.32. ábra). A felhasadás mértéke függ az alkalmazott mágneses térerősségtől:

$$\Delta E = hf_0 = g_N \mu_N H_0.$$

(X.30)

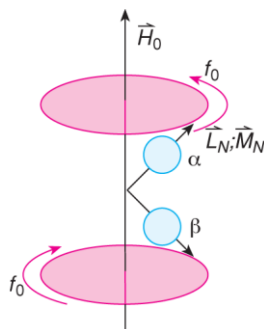
Ennek magyarázata a következő: Adott H_0 térerősség mellett az M_N magmágneses momentum H_0 irányába eső M_z komponenséhez $E_z = H_0 M_z$ energia tartozik. A (X.30) egyenlet alapján $M_z = \gamma_N L_z$, tehát $M_z = (g_N e / (2m)) L_z$. Az $L_z = \pm 1/2 h$ helyettesítést elvégezve és $h-e/(2m)$ helyére a μ_N mag magnetont írva kapjuk, hogy $E_z = \pm 1/2 g_N \mu_N H_0$, s így E_z két lehetséges szintje között a különbség pontosan a (X.30) egyenlettel írható le.



X.32. ábra. A proton energiaszintjének felhasadása külső mágneses térben

A proton (magspin) által elfoglalható energiaszintek között **átmenet indukálható** f_0 frekvenciájú elektromágneses sugárzás alkalmazásával. Az előbbi egyenletet gyakran **rezonancia-feltételnek** hívják. Amennyiben a frekvenciát rögzítjük, a különböző magok a g faktorok és spinek különbözősége miatt különböző H_0 mágneses térerősségnél mutatnak rezonanciát. Példaként a protonok rezonanciafrekvenciája 1 T (tesla) térerősségnél 42,58 MHz.

A mágneses térben lévő proton (atommag) alap- és gerjesztett állapota nem csak energetikailag különbözik egymástól. A saját impulzusmomentummal rendelkező („forgómozgást végző”) proton helyzetét leíró spin, illetve mágneses momentum vektorok alapállapotban a külső mágneses térhez képest párhuzamos, α -val, gerjesztett állapotban pedig ellentett, β -val jelzett irányban állnak be. A két mágneses momentum vektor ugyanakkor a mágneses erővonalakat körülvevő kúp palástja mentén precesszáló mozgást végez a rezonancia-feltételnek megfelelő f_0 frekvenciával (X.33. ábra).



X.33. ábra. Feles spinű mag, például proton két lehetséges beállása a külső mágneses tér irányához viszonyítva. A magspinek a külső mágneses tér iránya körül precessziós mozgást végeznek f_0 rezonanciafrekvenciával

A nagyszámú protont (atommagot) tartalmazó mintában (MRI esetén szövetmintában) külső mágneses tér hiányában a magspinek véletlenszerűen állnak be (X.34a ábra). Az NMR-kísérlethez szükséges H_0 külső mágneses tér bekapcsolásakor a véletlenszerű beállításoknak megfelelő állapot megszűnik, és a magspinek a tér irányához viszonyítva rendezett állapotot vesznek fel. Egyes protonok a párhuzamos α , mások az ellentett β spinállapotba kerülnek, és az adott beállításban precesszáló mozgást végeznek H_0 körül (X.34b ábra.). Adott hőmérsékleten a két állapot között a spinek megoszlását a Boltzmann-eloszlás szabályozza, ennek megfelelően a spinek száma:

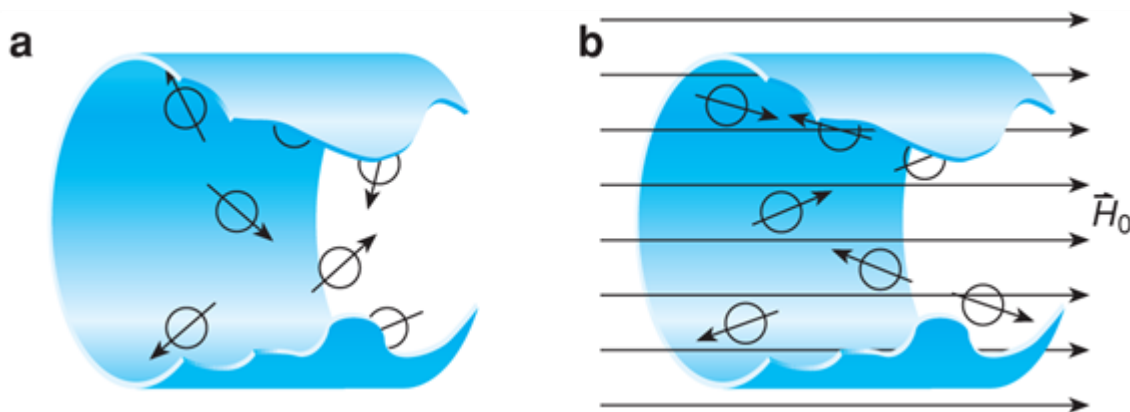
$$\frac{N_{\beta}}{N_{\alpha}} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (\text{X.31})$$

kifejezéssel írható le. Ez azt jelenti, hogy a környezetével hőegyensúlyban levő mintában kissé több proton található az α -állapotban, mint a β -ban.

Az NMR-kísérlet során a mintát homogén mágneses térbe helyezzük, és a mintára ható elektromágneses sugárzás frekvenciájának szabályozásával a besugárzott energia egy részének abszorpcióját idézzük elő a (X.30) egyenletnek megfelelő paraméterek mellett. Az elnyelt elektromágneses sugárzás intenzitásának frekvenciafüggése az **NMR-spektrum**. Egymással kölcsönhatásban nem álló protonok NMR-spektruma egy olyan spektrumvonal, amely jól közelíthető egy Gauss-görbével. Ideális körülmények között az észlelt NMR-vonal véges szélessége (Γ) kizárólag a gerjesztett állapot véges (τ) élettartamának köszönhető és a Heisenberg-féle határozatlansági reláció alapján számítható: $\Gamma \cong h/\tau$. Az NMR-vonal görbe alatti területe a mintában jelen lévő abszorbeáló atommagok (protonok) számával arányos. Amennyiben a magok (protonok) egy molekula különböző kémiai csoportjaihoz tartoznak, az NMR-spektrum bonyolultabb lesz. A magokat körülvevő elektronfelhő befolyásolja a H_0 külső mágneses tér érvényesülését, így a magok helyén a H_0 -tól kissé eltérő lokális térerősség lesz észlelhető. Ezt a változást az ún. δ -árnyékolási tényezővel vesszük figyelembe, amelyet a következő összefüggés alapján számolunk:

$$H = H_0(1 - \delta). \quad (\text{X.32})$$

Ez a hatás az adott magra vonatkozó rezonanciafrekvencia, így az NMR vonal helyének megváltozásával jár. A vonal eltolódása a vizsgált mag kémiai környezetének függvénye, ezért ebben az esetben **kémiai eltolódásról** beszélünk.



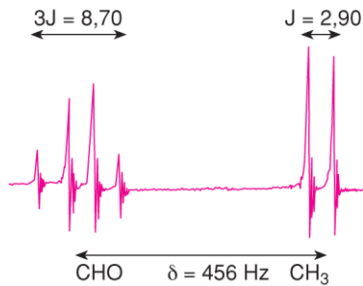
X.34. ábra. a) Külső mágneses tér hiányában a magmágneses dipólusok rendezetlenül helyezkednek el a tér irányához képest. b) A külső mágneses tér bekapcsolása után a magmágneses dipólusok a kvantummechanika törvényeinek engedelmeskedve 2 fő irányt – parallel, illetve antiparallel – vesznek fel, és precessziós mozgást végeznek a külső mágneses tér iránya mint tengely körül

A X.35. ábrán látható az acetaldehidmolekula egyszerűnek mondható PMR-spektruma. Az egyes vonalcsoportok a $-\text{CHO}$ és a $-\text{CH}_3$ csoportoknak felelnek meg. Az egyes kémiai csoportok jelei nem egyszerű abszorpciós vonalak, mivel azokat a szomszédos spinekkel való kölcsönhatások dublett, illetve kvadruplett szerkezetűre módosítják. Az NMR-vonalak kémiai eltolódását általában valamilyen referenciavegyület jól

meghatározott frekvencián jelentkező jeléhez szokás viszonyítani (például tetrametil-szilán) és praktikus okokból milliomodrész (parts per million = p. p. m.) egységekben szokás kifejezni:

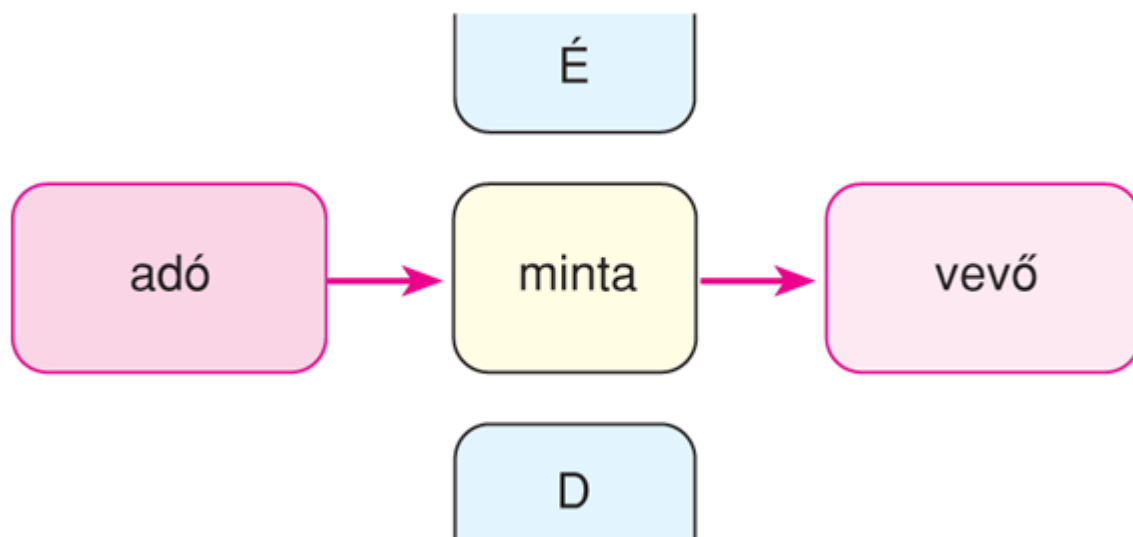
$$\delta = \frac{f_s - f_0}{f_0} 10^6 \quad (\text{X.33})$$

ahol f_s a minta rezonanciafrekvenciája és f_0 a referenciavegyület rezonancia-frekvenciája. Az NMR-vonalak felhasadását a J csatolási állandóval jellemzik, amely az egy maghoz tartozó spektrumvonalak közötti távolság mértéke Hz-ben kifejezve. Proton mágneses rezonancia kísérletek során az oldószer nem tartalmazhat protonokat, így főként nehézvízben (D_2O), illetve más deuterált oldószerekben szokás a kísérleteket végrehajtani.



X.35. ábra. Az acetaldehydmolekula protonmágneses rezonanciaspektruma

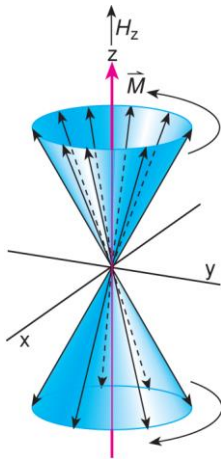
A X.36. ábrán egy tipikus NMR-spektrométer blokkdiagramját tüntettük fel. A mintát a spektrométerbe helyezve az nagy intenzitású, homogén mágneses térbe kerül, amelyet elektromágnissal állítanak elő. Az oszcillátor szolgáltatja a kívánt frekvenciájú elektromágneses sugárzást, amelyet megfelelő erősítés után a csatolótekerccs közvetít a mintához. Amennyiben a rezonanciafeltétel teljesül, az elektromágneses sugárzás a mintával való kölcsönhatás során részben elnyelődik. A mintától származó NMR-jel a detektortekercs segítségével észleljük, amely igen érzékeny és szelektív rádióvevő készülékhez csatlakozik. Az ismertetett elrendezés a korai folyamatos hangolású (CW, continuous wave) spektrométerek alapelveinek felel meg, amelyekben a rezonanciafeltétel teljesüléséhez általában a mágneses térerősséget változtatták lassú ütemben.



X.36. ábra. Egy tipikus NMR-spektrométer blokkdiagramja

Napjainkban, a modern NMR-spektrométerek az ún. **Fourier Transform (FT) üzemmódban** dolgoznak. A módszer megértéséhez meg kell vizsgálnunk, hogy mi történik a mintában található spinnel rendelkező, ún. NMR-magok mágneses momentumaival, amennyiben azokat a rezonanciafrekvenciának megfelelő

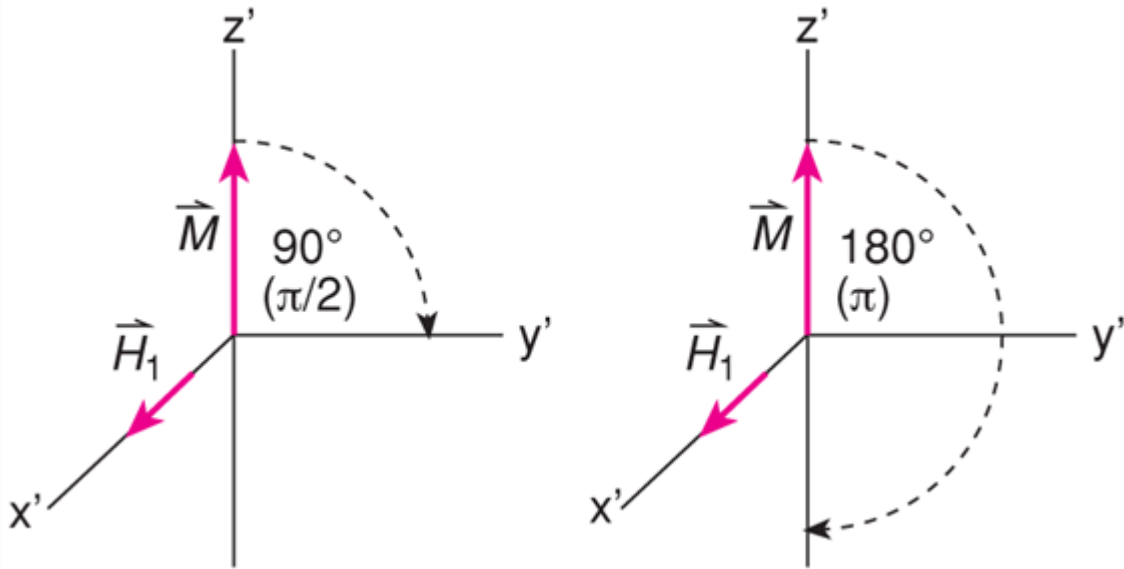
elektromágneses sugárzásnak tesszük ki meghatározott ideig. A mintában található NMR-magok mágneses momentumai a H_z mágneses térrel parallel, illetőleg antiparallel állnak be, és vektoriálisan összegezve létrehozzák a minta makroszkopikus mágnesezettségének nevezett fizikai mennyiséget (M) (X.37. ábra). A jelenséggel kapcsolatban fontos megjegyezni, hogy a makroszkopikus mágnesezettség létrehozásában részt vevő, két ellentétesen álló kúppalást mentén tömörülő spinek a rezonancia-körfrekvenciának ($\omega_0 = 2\pi f_0$) megfelelő sebességgel precessziós mozgást végeznek a nyilakkal jelzett irányokban az álló (x, y, z) derékszögű koordináta-rendszerben. Az egyes mágneses momentumok a kúppalást mentén véletlenszerűen oszlanak el, a spinek kitüntetett irányáról az x, y síkban így nem lehet beszélni. Az eredő makroszkopikus mágnesezettség vektor viszont az előbbi koordinátarendszerben állónak tekinthető, mivel a rezonancia-körfrekvenciával precesszáló spinek precessziós tengelye a koordináta-rendszer z tengelyével egybeesik.



X.37. ábra. A minta makroszkopikus mágnesezettsége (M) a külső térhez képest parallel, illetőleg antiparallel beálló magok mágneses momentumainak vektoriális összegeként jön létre. A két ellentétesen álló kúppalást mentén tömörülő spinek a rezonancia-körfrekvenciának ($\omega_0 = 2\pi f_0$) megfelelő sebességgel precessziós mozgást végeznek a nyilakkal jelzett irányokban az álló (x, y, z) derékszögű koordináta-rendszerben

A további tárgyalás egyszerűsítése céljából vezessünk be egy új forgó derékszögű koordináta-rendszert, amelynek z' forgástengelye a korábbi álló koordináta-rendszer z tengelyével egybeesik, x' és y' tengelyei viszont együtt forognak a párhuzamos beállású spinekkel a rezonancia-körfrekvenciának megfelelően. A továbbiakban átvesszük megfigyelési székelyünket a forgó koordináta-rendszerbe, képzeletben felülünk egy, a spinekkel együtt forgó körhintára, és a spinekkel együtt forogva szemléljük a történeteket.

Amennyiben a mintát véges ideig tartó, a rezonanciafrekvenciának megfelelő rádiófrekvenciás impulzussal gerjesztjük, a minta makroszkopikus mágnesezettsége kölcsönhatásba kerül a rádiófrekvenciás tér körhintával együtt forgó – és így azon ülve állónak látszó –, az x' tengely irányába mutató H_{rf} mágneses (amelyet H_1 segédtereknek nevezünk) komponensével (X.38. ábra). Ezen kölcsönhatás következményeként a minta mágnesezettsége a rádiófrekvenciás tér mágneses komponensének iránya (x' tengely) körüli precessziós mozgást végez a forgó koordináta-rendszerben a rádiófrekvenciás tér jelenlétének időtartama alatt és így az alkalmazott idő hosszának megfelelő mértékben elfordul az y', z' síkban. A rádiófrekvenciás impulzusok hosszát az azok jelenléte alatti makroszkopikus mágnesezettség szögelfordulásával (ω) szokás jellemezni. Így létezik 90, 180 stb. fokos és természetesen tetszőleges hosszúságú rádiófrekvenciás impulzus is (lásd X.38. ábra).



X.38. ábra. A precesszáló spinekkel együtt forgó derékszögű koordináta-rendszerből szemlélve a folyamatokat, az annak x' tengelyével egy irányba mutató H_1 mágneses segédter a minta makroszkopikus mágnesezettségét az x' tengely körüli precessziós mozgásra készíti. A H_1 tér fennállásának időtartama alatt, az alkalmazott idő hosszának megfelelő mértékben, a makroszkopikus mágnesezettség vektor elfordul az $y'z'$ síkban. Az elfordulás szögének megfelelően beszélhetünk 90, 180 stb. fokos NMR-impulzusokról

A **90°-os impulzus** (X.39a ábra) kitüntetett szerepet játszik az NMR-kísérletek során, mivel alkalmazásával a makroszkopikus mágnesezettséget éppen az x', y' síkba fordítjuk be (X.39b ábra). A 90°-os impulzust követően a rádiófrekvenciás tér megszűntekor, a minta körül az x', y' síkba leforgatott mágnesezettségvektor az ugyancsak e síkban elhelyezett (álló) vevőtekercsben időben változó elektromos feszültséget indukál.

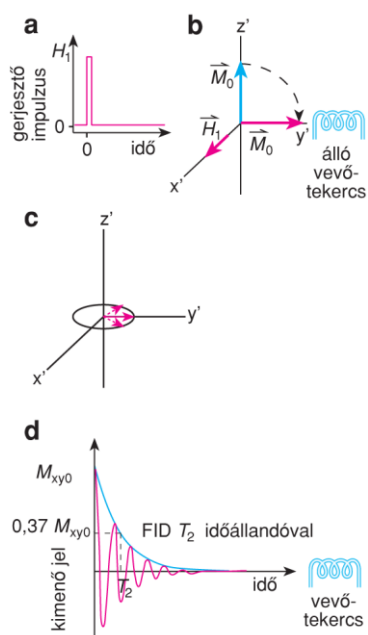
A gerjesztő 90°-os impulzus befejezésekor az összes spin a forgó koordináta-rendszer y' tengelyének irányába fog mutatni, ekkor forgásukat azonos fázisszöggel is végzik (X.39c ábra). A kialakult állapot a spinekhez kapcsolódó mágneses momentumok számára mesterségesen létrehozott kényszerhelyzetet jelent. A spinek az azonos fázisú helyzetből szabadulni igyekeznek, és egymástól eltávolodva fázisvesztéssel az x', y' sík mentén egyenletes eloszlást vesznek fel (X.39c ábra). A jelenséget exponenciálisan lecsengő mágnesezettség és indukált feszültség jellemzi (X.39d ábra). A folyamat időállandóját **spin-spin relaxációs időnek (T_2)** hívják. Az észlelt jel nem más, mint a spinrendszer időtartománybeli szabad válasza, az ún. **FID, free induction decay**.

Közvetlenül a spin-spin relaxáció folyamatának kezdetén a makroszkopikus mágnesezettség értéke nulla az x, y síkban, a mintában található mágneses dipólusok a H_z térerő komponensre merőleges x', y' síkban véletlenszerű orientációval helyezkednek el, így z irányú eredő mágneses komponensük nincs.

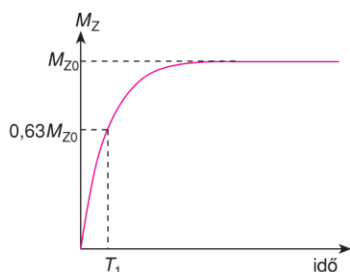
A gerjesztésre használt külső elektromágneses sugárzás kikapcsolása után a spin rendszer a felvett „többlet”-energiától (az orientáció átfordítását jelentő energiaátmenet energiájától) igyekszik megszabadulni azt a környezetét alkotó „rácsnak” átadva. E folyamat során a makroszkopikus mágnesezettség a z' tengely mentén növekvő amplitúdóval visszatér kiinduló egyensúlyi állapotába. A folyamat a mintától függő T_1 időállandóval, az ún. **spin-rács relaxációs idő**jellemezett exponenciális függvény szerint zajlik le, aminek végén a magspinek egyedi mágneses dipólusai újra beállnak a H_z térrel párhuzamos vagy ellentétes irányban a X.37. ábra szerinti egyensúlyi állapotot jellemző képnek megfelelően. A 90°-os impulzus után a makroszkopikus mágnesezettség időbeli alakulását és ezzel a spin-rács relaxáció exponenciális függvényvel jellemezhető folyamatát a X.40. ábra mutatja. Az NMR-kísérletek során általában a X.37. ábra által jellemzett egyensúlyi állapotból indulunk ki, amelyhez egy megelőzően alkalmazott NMR-impulzusszekvenciát követően – a folyamat exponenciális jellegéből következően – a spin-rács relaxációs idő (T_1) ötszörösét kivárva tér vissza a vizsgált rendszer. Ezt az időt az NMR-kísérletek során, két soron következő impulzusszekvencia között általában ki kell várni annak érdekében, hogy mérési eredményeinket ne torzítsuk el azzal, hogy nem a termikus egyensúlynak megfelelő nyugalmi állapotból indultunk ki a kísérlet kezdetén.

A fent részletezettek szerint előállított és elektronikus rögzített FID matematikai átalakításával, nevezetesen Fourier-transzformációjával (FT) közvetlenül a korai CW- (continuous wave: folytonos gerjesztésű) spektrométerekkel előállított hagyományos NMR-spektrumhoz juthatunk. Az ilyen elven működő FT NMR

módszer előnye, hogy a hagyományos mérésnél sokkal kevesebb időt igényel, ugyanakkor inherens stabilitása miatt több egymás utáni mérés eredményei számítógépesen összegezhetők, és ezzel a mérések jel/zaj aránya javítható. Tipikusan n egymást követő mérés eredményének átlagolásakor a jel/zaj arány \sqrt{n} -szeresére növelhető.



X.39. ábra. A 90° -os impulzus a) alkalmazásával a makroszkópikus mágnesezettséget az x' , y' síkba fordítjuk be b). Az impulzus megszűnése után az álló vevőtekerccsben a spin-spin relaxáció folyamata miatt c) az exponenciálisan csökkenő mágnesezettség vektor ugyancsak exponenciálisan csökkenő feszültséget indukál d). Az így detektálható jel a spinrendszer szabad válasza



X.40. ábra. A makroszkópikus mágnesezettség felélédeése a 90° -os impulzus után. A folyamat időbeli lefolyását a spin-rács relaxáció folyamata befolyásolja

4.2. X/4.2. Az ESR-spektroszkópia néhány biológiai vonatkozása

Az NMR elméletével kapcsolatban a bevezető részben leírtak kis megszorítással érvényesek az ESR-spektroszkópiára is. A magmagneton és a Bohr-magneton közötti közel 2000-szeres különbség miatt az ESR-frekvenciák sokkal magasabbak, mint azt az NMR-nél tapasztaltuk. A szabad elektron rezonanciafrekvenciája például 1 T esetén 28,03 GHz. Az ilyen frekvenciák már a mikrohullámok tartományába esnek, ennek megfelelően az ESR-spektrométerek technikailag eltérő felépítésűek az NMR-spektrométerektől. Meg kell jegyezni, hogy az elektron negatív töltése miatt az ESR-spektroszkópiában az $Iz = -1/2$ az alacsonyabb energiájú állapot és az $Iz = +1/2$ a magasabb, egyébként a X.28. ábra erre az esetre is hibátlanul alkalmazható. Az NMR és ESR közötti további különbség a ΔE energiakülönbség mértékében keresendő, amely kb. 2000-szer nagyobb az ESR esetében. A Boltzmann-eloszlásnak megfelelően így sokkal több elektron tartózkodik az alacsonyabb energiájú spinállapotban, így több a gerjeszthető elektron. Ennek megfelelően a gerjesztés után kapott jel nagyságrendekkel nagyobb lesz, ezért a méréshez sokkal kisebb anyagmennyiség szükséges, mint az NMR-spektroszkópiái alkalmazásokban. az ESR-módszer sokkal érzékenyebb, mint az NMR.

Az ESR-spektroszkópia alkalmazása azokra a rendszerekre korlátozódik, amelyekben az elektronok eredő mágneses momentuma nullától különbözik, azaz az atomok vagy a molekulák paramágnesesek. A paramágneses tulajdonságot egyrészt a pálya alakja, másrészt az elektron saját mágneses momentuma (elektronspin) befolyásolja. Ugyancsak módosító tényező lehet az atommagok nullától különböző mágneses momentuma, a magspin és az elektronspin kölcsönhatásán keresztül.

Amint azt az NMR-nél megállapítottuk, a paramágneses molekula érzékeny a környezetére, annak változására. Fokozottan igaz ez az ESR spektroszkópiában, hiszen az elektronok közelebbi kölcsönhatásban vannak a környezetükkel, mint az atommagok. Az NMR-től eltérő, nagyobb frekvenciájú (1-250 GHz tartományú) elektromágneses sugárzás alkalmazása azt is jelenti, hogy a molekuláris mozgások dinamikája (pl., az ún. rotációs diffúzió), szélesebb időtartományban figyelhető meg. Ennek alapján, speciális mérési eljárások segítségével a molekulák mozgásai a 10^{-4} – 10^{-2} s időtartományban, azaz mind a kis molekulák, mind a makromolekulák, s ezen utóbbiak intramolekuláris mozgásai vizsgálhatók.

Az elektronspin-magspin kölcsönhatás következtében a spektrumokon kialakul egy ún. hiperfinom szerkezet, ami további információt ad a kölcsönhatásokról. Ezek közül érdemes kiemelni a molekuláris rendezettséget, ami egyrészt mikroszkopikus, másrészt makroszkopikus szinten is jelentkezik. A mikroszkopikus rendezettség azt jelenti, hogy egy adott molekula mozgása mennyire korlátozott a tér valamely szögtartományára: gondoljunk pl. egy fehérje szegmensének vagy a lipidmolekuláknak a membránban történő térbeli mozgására.

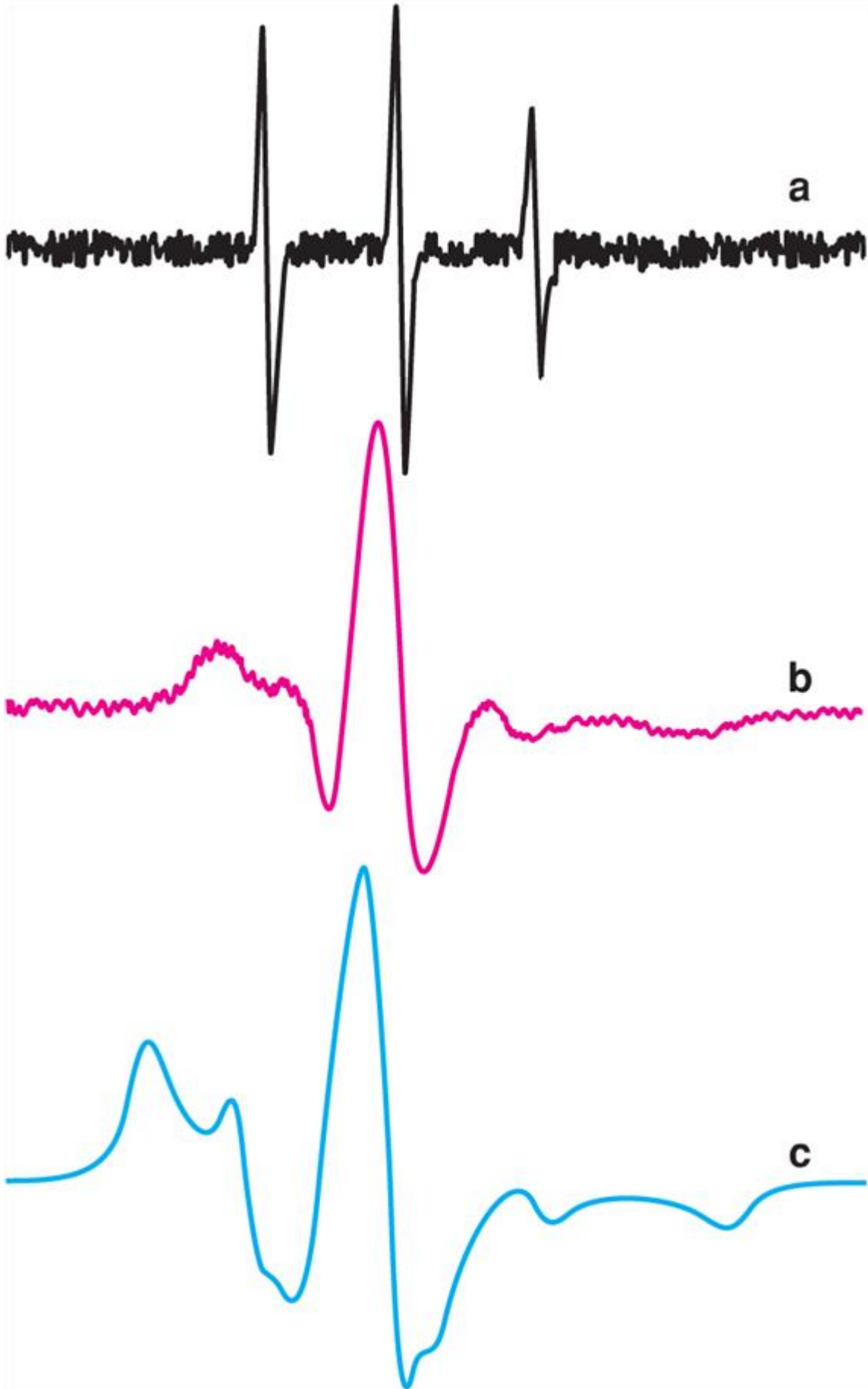
A makroszkopikus rendezettségre tipikus példa a miozin molekuláknak az aktinfilamentumhoz való kapcsolódásakor fellépő térbeli irányítottsága. Az enzimatisz fehérjék, működésük során gyakran vesznek fel különböző konformációkat. Ennek során a fehérjemolekula egyes részei a mélyből a felszínre kerülhetnek, avagy ellenkezőleg a vizes fázisból átkerülnek a fehérjén belüli kevésbé poláris környezetbe. Ilyenkor két lehetőség adódik az ESR-spektroszkópia számára:

1. a spektrum hiperfinom szerkezete érzékeny a közeg polaritására, s ezen keresztül mutatható ki a változás;
2. a vizsgált fehérjerész mozgása a két különböző konformációban eltérő mikroszkopikus rendezettséget, esetleg más időtartományú molekuláris mozgást végez, s ez vezet a spektrum változásához.

Az eddigiektől eltérő módszert kínál a paramágneses jel amplitúdójának időbeli megfigyelése. Ahogy azt korábban megállapítottuk, ESR-jelet csak akkor mérhetünk, ha a vizsgált rendszerben jelen van paramágneses centrum: pl. egy szabad gyök. Ezek keletkezését, eltűnését a biológiai (redox-) folyamatok következtében kinetikai mérések segítségével lehet nyomon követni. Tipikus példát szolgáltatnak erre a reaktív oxigénszármazékok, amik lehetnek pl. hidroxilgyökök, szuperoxidgyökök stb., de maga az oxigénmolekula is paramágneses tulajdonságokkal rendelkezik.

A modern biológiai kutatásokban az ESR-módszert sikerrel használták fel szabad gyökök kimutatására, ún. spinjelző vegyületek segítségével különböző biológiai rendszerek (enzimek aktív centruma, sejtmembrán stb.) komponenseit jellemző mobilitási adatok mérésére.

ESR-spektrumok időskálája.



Az ábrán három különböző időtartományú molekuláris mozgáshoz és rendezettséghez tartozó rendszer ESR-spektrumát mutatjuk be. Az a) ábra paramágneses monitorcsoportot tartalmazó sztearinsav származék ESR-spektruma. Ebben az esetben a rotációs diffúziót jellemző, ún. korrelációs idő mintegy 10^{-10} s, a zsírsavmolekulák forgása a térben rendezetlen. A b) ábrán az előzőekben említett zsírsavszármazékot liposzómába inkorporáltuk. A liposzómákban a lipidek rendezetten helyezkednek el, ami a molekulák rotációs diffúzióját a térben korlátozza, valamint a forgás sebessége is csökken: a korrelációs idő $\sim 10^{-8}$ s. A c) ábra spinjelölt gél állapotban levő aktinfilamentum ESR-spektrumát mutatja. Ebben az esetben a korrelációs idő tovább nő, $\sim 10^{-7}$ s, valamint a rotációs diffúzió még kisebb szögtartományra korlátozódik, mint a liposzómák esetében.

5. X/5. Elektronmikroszkópia

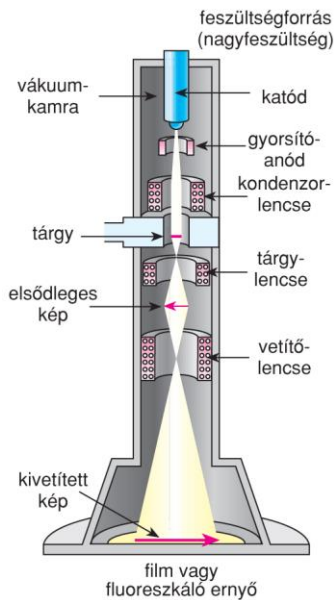
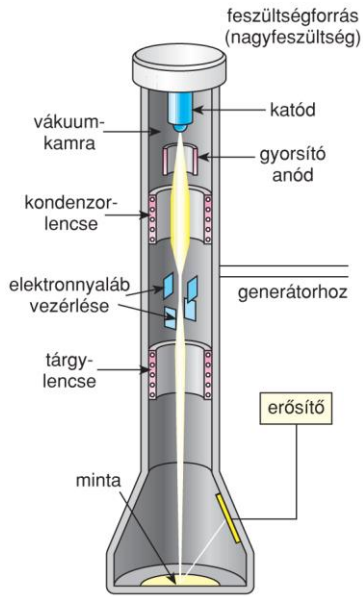
Az elektronmikroszkóp ötlete a XX. század első évtizedeiben érlelődött meg, amikor világossá vált, hogy a fénymikroszkóp feloldása limitált, 0,2 mikron értéknél finomabb részletek fényel való leképezéssel nem feloldatók. Nincs tehát remény arra, hogy a fénymikroszkóp tökéletesítésével a felbontást olyan mértékben javítsuk, hogy a sejten belüli világ részleteiről is információkhoz jussunk. Ugyanakkor 1923-ban de Broglie megfogalmazta azt az igen fontos gondolatot, hogy minden anyagi tömeghez az impulzusával meghatározott hullámhossz, és így hullámtermészet tartozik. Ezt a gondolatot kísérletileg, elektronnyalábbal végrehajtott interferenciaképek előállításával igazolták 1927–1928-ban (I/1.1.3). Alig néhány évvel ezen felfedezések után, 1931-ben, Max Knoll és Ernst Ruska megalkotta az első elektronmikroszkópot, a közönséges fénymikroszkóppal teljes analógiában.

5.1. X/5.1. Az elektronmikroszkóp felbontása

A mikroszkópi leképezés felbontásának javítása az elektronnyaláb hullámtermészetén alapult. Az ebben az esetben alkalmazandó formula az ún. anyaghullám hullámhosszát megadó összefüggés (I/1.1.3. fejezet) : $\lambda = h/mv$. Az elektronnyaláb kialakításakor alkalmazott gyorsítófeszültség nagysága 10–100 kV, ebből kiszámítható az elektronnyalábra jellemző hullámhossz. (Az elektronok sebessége igen nagy lesz, összemérhető a fénysebességgel, ezért a számolásnál a tömegnövekedéssel is számolni kell.) Ha az Abbe-elvből származtatjuk a leképezésnél felbontható legkisebb távolságot, akkor ez: $d = \lambda/NA$, ahol az NA numerikus apertúra a fénymikroszkópban ~ 2 . Így adódik a fénymikroszkóp esetén a legrövidebb látható fény hullámhosszának fele, ~ 200 nm erre a paraméterre. Ha az elektronnyalábra ugyanezzel az apertúraértékkel számolhatnánk, akkor d -re az elektronnyalábbal történő leképezésnél nagyságrendileg 0,01 nm adódna. Az elektronmikroszkópban azonban az elektronoptika tulajdonságai az NA $\sim 10^3$ értéket adják, és így a **felbontható legkisebb távolság $\sim 0,5$ nm** lesz. Ez még így is jelentős javulást jelent a felbontásban, megnyitja a sejteken belüli részletek megjelenítésének lehetőségét.

5.2. X/5.2. Az elektronmikroszkóp felépítése

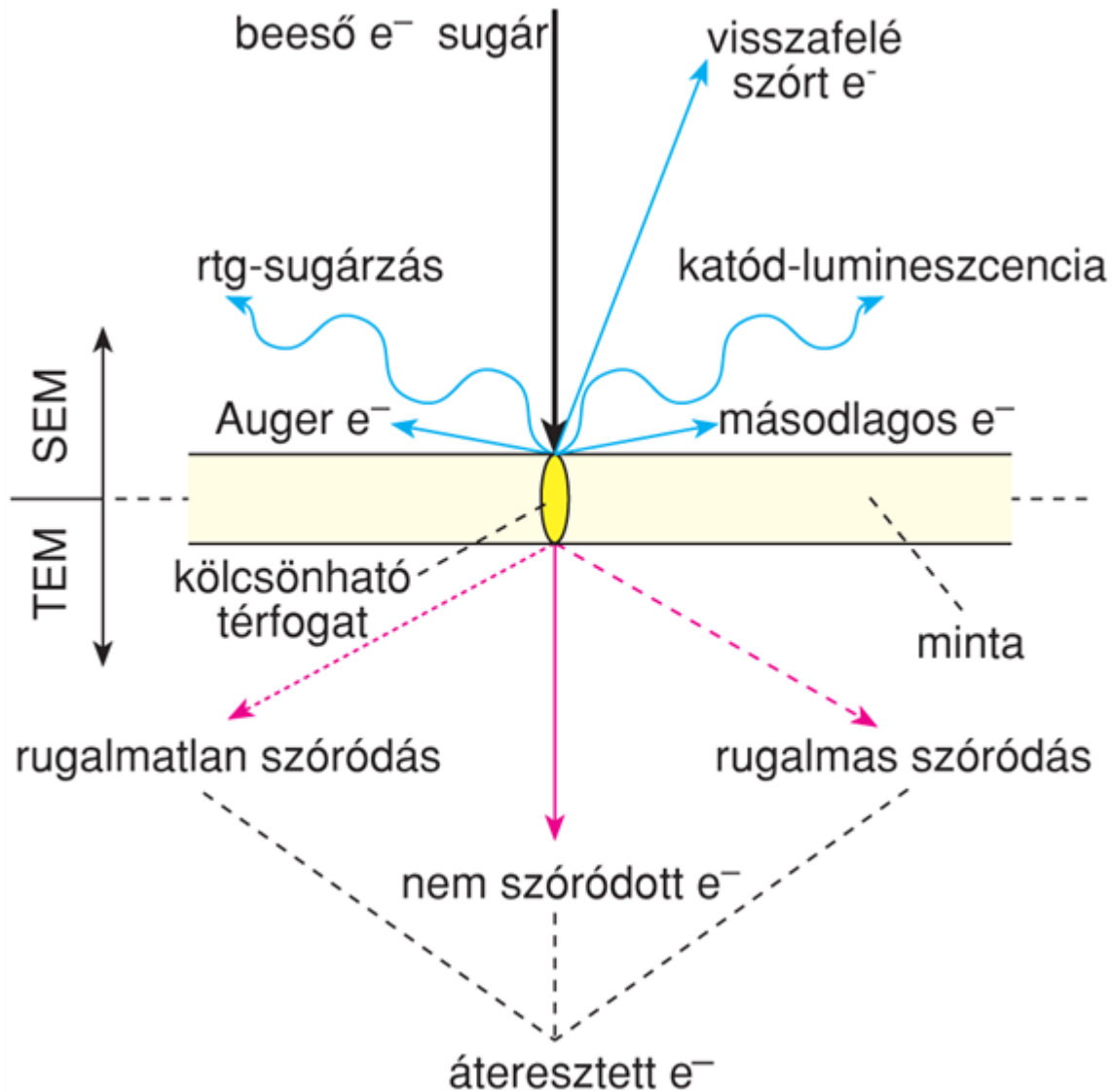
Az elektronmikroszkóp felépítését az optikai mikroszkóppal teljesen analóg módon tervezték meg, ahogy ez a X.41. ábrán látható. Az elektronnyaláb létrehozásához vákuumcsőben kellett a rendszert kialakítani, azonban az optikai lencsákat elektromos és mágneses tereket kialakító „lencsékkel” helyettesítve a nyalábbal a leképezést a fénysugarakhoz hasonló módon lehet elvégezni, és a kép létrejötte is a tárgyon elhajlott résznyalábok interferenciája révén történik, mint a fény esetében. A vákuum- környezet azonban sok nehézséget jelent a minta előkészítésében, a vizsgálat rendszerint olyan preparálási eljárásokat és vizsgálati körülményeket követel meg, amelyek igen távol állnak a természetes körülményektől (például vízmentes minta vákuumban). Ezek a hátrányok halmozottan jelentkeznek biológiai, például sejtes rendszerek vizsgálatában, ezért az elektronmikroszkópos képek értelmezése elővigyázatosságot követel. Az elektronmikroszkópos vizsgálatok mégis sok újat hoztak a biológia és az orvostudomány számára is. Érdekes, hogy az így nyert eredmények előbb kaptak tudományos elismerést (1974-es orvosi Nobel-díj), mint a módszer feltalálói (Ruska, Nobel-díj, 1986).



X.41. ábra. Az elektronmikroszkóp felépítése. A felső ábra a SEM, az alsó ábra a TEM sémáját ábrázolja

5.3. X/5.3. Az elektronnyaláb kölcsönhatása a mintával, mérési lehetőségek

Az elektronnyalábnak a mintával való kölcsönhatásait a X.42. ábrán tüntettük fel. Látható, hogy igen sokféle kimenetele lehet ennek az eseménynek. A mérés technika alapvetően különbözik, ha a mintának az elektronforrás felé eső felületén létrejövő jelenségekre vagy a mintán való áthaladás után, a minta túloldalán mérhető effektusokra építünk.



X.42. ábra. Az elektronnyaláb kölcsönhatásai a mintával

5.3.1. X/5.3.1. Transzmissziós elektronmikroszkópia: TEM

Az elektronmikroszkóp transzmissziós üzemmódban a fénymikroszkóppal analóg módon működik. A 10–100 nm vékony tárgyra párhuzamos sugarakból álló nyaláb esik. A tárgy atomcsoportjainak elektronfelhőin a fellépő elektronok elhajlást szenvednek (szóródnak) és kilépnek a tárgy túlsó oldalán. Az objektív lencse segítségével ezek létrehozzák a tárgy valódi (közbülső) képét, amelyet itt nem megnézünk az okulárlencse segítségével, hanem egy másik lencsével kivetítünk egy lumineszkáló ernyőre. Erre a leképezésre érvényes az Abbe-elvből kiinduló fenti gondolatsor, ami a technika felbontását megadja.

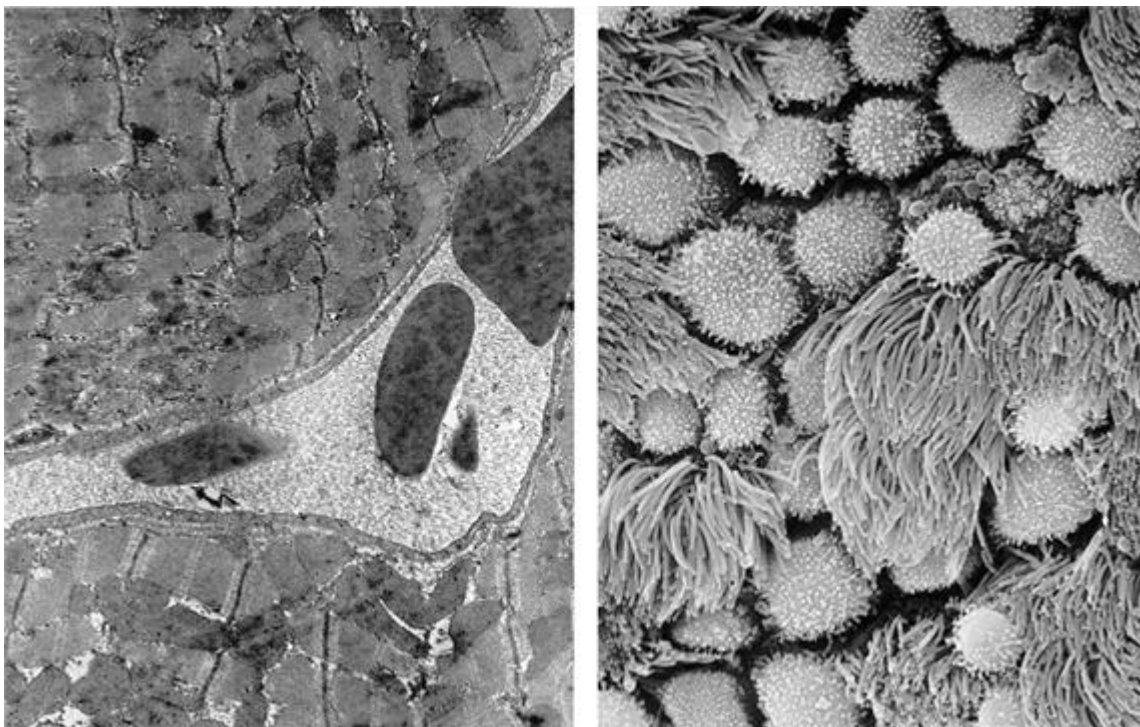
X.1. megjegyzés. *Elektron diffrakció.* A transzmissziós oldalon lehetőség van az interferenciamaximumokból álló diffrakciós kép feldolgozására is. Ennek periodikus részletekből álló tárgy esetén van jelentősége (l. X/6. rtg. diffr.). Az elektrondiffrakciós lehetőség felbontása gyengébb, mint a röntgendiffrakcióé, azonban pl. nagy alegységekből álló makromolekuláris komplexek szerkezetének meghatározásában akkor is segít, ha azokból egykristályokat nem sikerül előállítani a röntgendiffrakciós méréshez, mert akkor az elektrondiffrakciós felvétel alapján legalább az alegységek elrendeződése megállapítható és a szekunder szerkezeti egységek elkülöníthetők.

5.3.2. X/5.3.2. Pásztázó (scanning) elektronmikroszkópia: SEM

A SEM-módszernek semmi köze nincs a fénymikroszkópiához, a felbontás Abbe-elvéhez. A technika alapelve azonos a többi, a tárgy felületét pásztázó módszerével. Pontonként adatot gyűjt valamilyen fizikai paraméterre

vonatkozólag a tárgy felületéről, és ezeknek pixeleket megfelelően az adatokat képszerűen megjeleníti. A X.42. ábrán szemléltetjük, hogy többféle ilyen paraméter is lehetséges, és ennek megfelelően a felvétel információtartalma is különbözik. Az elektron-visszaszórás alapján rendszámbeli különbségek jeleníthetők meg, pl. nehézatomok csoportjai. A szekunder elektronokat gyorsító tér segítségével összegyűjthetjük. Ezek eloszlása a felület topográfiáját jellemzi. A biológiai alkalmazásokban különösen ennek a technikának van jelentősége, ugyanis a jelenség természetéből adódóan a szórás kép igen érzékeny a felület részleteire kb. 10 nm vastagságban. és plasztikus, térszerű reprezentációt jelent a tárgy (pl. sejt, vírus) felületéről szemben a transzmissziós módszerrel kapott metszeti, szigorúan kétdimenziós (szummációs) képpel. A X.43. ábrán egy TEM- és egy SEM-felvételt mutatunk be. Az Auger-elektronok (lásd II/3.1.4.) energiájának meghatározása alapján a felület kémiai összetételét lehet megállapítani. Ugyancsak erre alkalmas a karakterisztikus röntgensugárzás spektrumának mérése pontonként. (Az elektronok által keltett lumineszcenciát nem használják fel elterjedten.)

A pásztázó módszerek felbontása a fizikai paraméter mérésének érzékenységétől függ, hiszen ez szabja meg, hogy mekkora felületelemlről kaphatunk egy adott pozícióban értékelhető erősségű jelet. Általában elmondható, hogy a felbontás legalább egy nagyságrenddel jobb, mint a fénymikroszkópoké.



X.43. ábra. Szívizomról készült TEM-felvétel (baloldalt) és trachea epitheliumról készített SEM-felvétel (jobbaldalt)

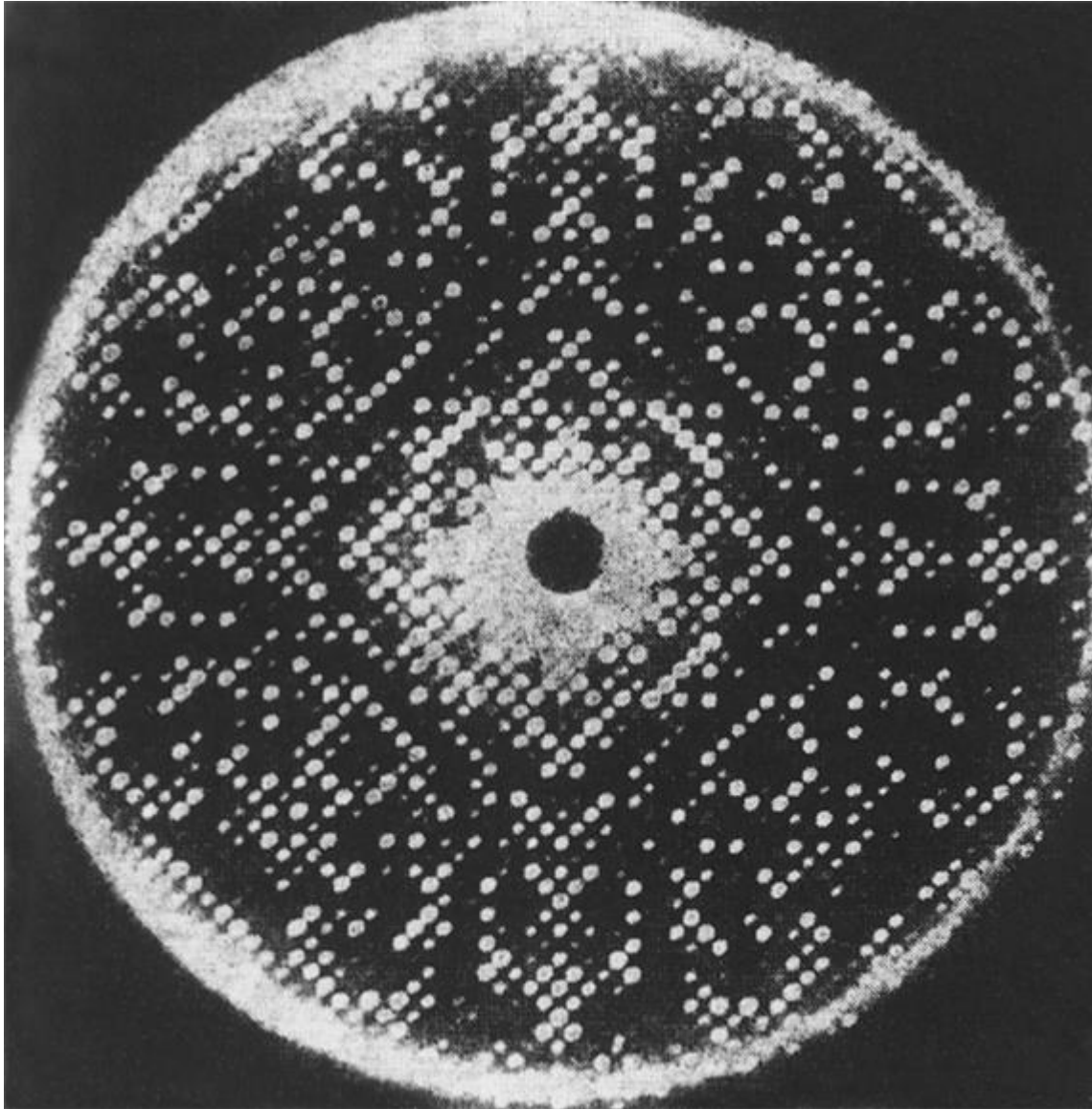
6. X/6. Röntgen-diffrakció

A kisméretű tárgyak általi fényszórás közismert jelenség. Amennyiben a fény hullámhosszával összemérhető rácsállandójú diffrakciós rácsot helyezünk a fény útjába, a róla szóródó fény interferenciát szenved. A látható fényben használható diffrakciós rácsok általában üvegből készülnek, és gyémánttal ejtett párhuzamos karcolatokat tartalmaznak kb. 200–1000 vonal/mm sűrűséggel.

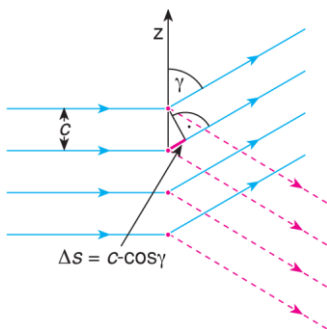
A természetben számos, a diffrakciós rácsokhoz hasonló, szabályos elrendezés található, azzal a különbséggel, hogy az egyes rácsponthoz atomok, illetve ionok alkotják, és azok távolsága sokkal kisebb, mint azt az optikai rács esetében tapasztaltuk. Példaként megemlíthetők a kristályrácsban elhelyezkedő atomok vagy az élő sejtek plazmamembránjában helyet foglaló lipidmolekulák. Ha az ilyen elrendezésekre röntgensugarat bocsátunk, a ráccsal való kölcsönhatás révén a röntgensugarak diffrakciója áll elő. A jelenség összetettebb az optikai rácsnál tapasztaltnál képest, mivel a szóró centrumok szabályos háromdimenziós struktúrákat alkotnak a rács egydimenziós mintázatával szemben.

A ZnS-kristályon végzett első röntgendiffrakciós kísérletről Laue számolt be 1912-ben. A Laue által kapott diffrakciós kép fényes foltokat tartalmazott körkörös elrendezésben a beeső röntg-sugár körül. A lizozimenzim röntgendiffrakciós képét a X.44. ábra mutatja.

A háromdimenziós kristályszerkezet diffrakciós képének megértéséhez először egyszerűbb elrendezések viselkedéséből indulunk ki. A X.45. ábrán az egydimenziós kristály diffrakciós képének kialakulását tanulmányozhatjuk.



X.44. ábra. A kristályosított lizozim-enzim röntgendiffrakciós képe

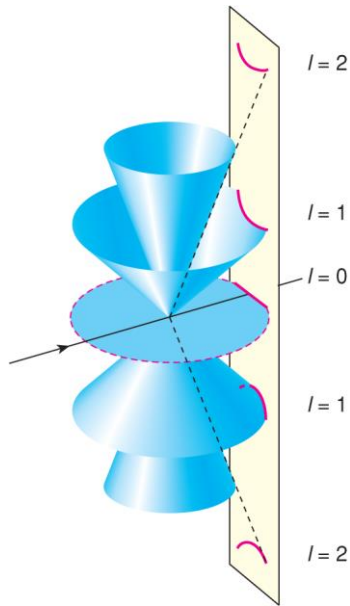


X.45. ábra. Röntgensugárzás diffrakciója egydimenziós kristályon

A párhuzamos rtg-nyaláb a z tengely mentén egyenlő c távolságban elhelyezkedő szóró atomok vonalára merőlegesen esik be, az x tengellyel párhuzamosan. A szomszédos atomokról szóródó sugarak interferálnak egymással, és ennek eredményeként erősítési irányokat tapasztalunk az alábbi egyenlet által meghatározott irányokban:

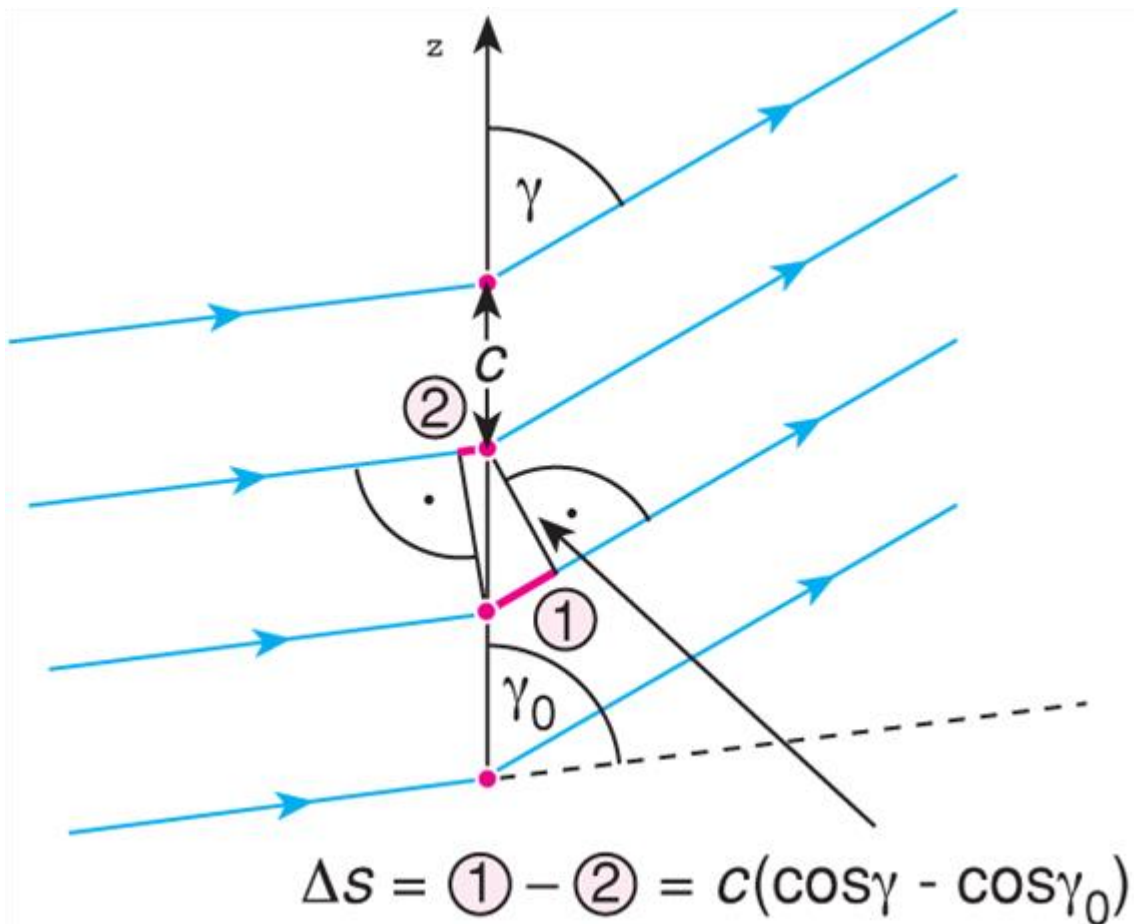
$$c \cos \gamma = l \lambda. \quad (\text{X.34})$$

Az előbbi feltételnek megfelelő sugarak γ félnyílásszögű kúpok palástjai mentén helyezkednek el a z tengely körül. Fényérzékeny lemezt helyezve a szórt rtg-sugarak útjába az erősítési irányok a kúpok és a fotolemez metszévonalaiaként jelennek meg. Alakjuk egy egyenes vonal az $l = 0$, és hiperbola az $l = 1, 2, 3, 4 \dots$ stb. erősítésekre, mint ahogyan az a X.46 ábrán látható.



X.46. ábra. Lineáris kristály röntgen-diffrakciós képe

Amennyiben a beeső rtg-sugár nem merőleges a z tengelyre, hanem γ_0 szög alatt éri el a lineáris kristályt, a szomszédos szórt nyalábok közötti úthosszkülönbség két komponensből tevődik össze, mint ahogyan az a X.47. ábrán látható.



X.47. ábra. Vázlat a Laue-egyenletekhez

Az intenzitásmaximumok irányát meghatározó egyenlet a következő módon alakul:

$$c(\cos \gamma - \cos \gamma_0) = l\lambda.$$

(X.35)

A fenti elrendezés két egymásra merőleges tengely mentén való megismétlésével egy kétdimenziós kristály modelljéhez jutunk. Ebben az esetben a (X.35) egyenlethez hasonló két független egyenlet jellemzi a problémát a következő módon:

$$b(\cos \beta - \cos \beta_0) = k\lambda$$

(X.36)

ahol β és β_0 jelentése hasonló γ és γ_0 (X.35) egyenletbeli jelentéséhez. Matematikailag a két egyenlet egyidejű teljesedése nem jelent problémát, az intenzitásmaximumok a két egymásra merőleges kúpsereg metszésvonalaiaként jelentkező, a koordináta-rendszer origójából kiinduló széttartó egyenesek.

A háromdimenziós kristályszerkezet rtg-diffrakciós viselkedésének leírására az előző esethez képest is egy további koordináta-tengelyt kell bevezetni az x irány mentén. Ez az egyidejűleg fennálló egyenletek számát azonban nem háromra, hanem négyre emeli, mivel a derékszögű koordináta-rendszer origóján áthaladó egyenes irányát jellemző α , β , γ szögekre mindig fennáll egy trigonometrikus összefüggés.

Így a teljes egyenletrendszer a háromdimenziós esetre:

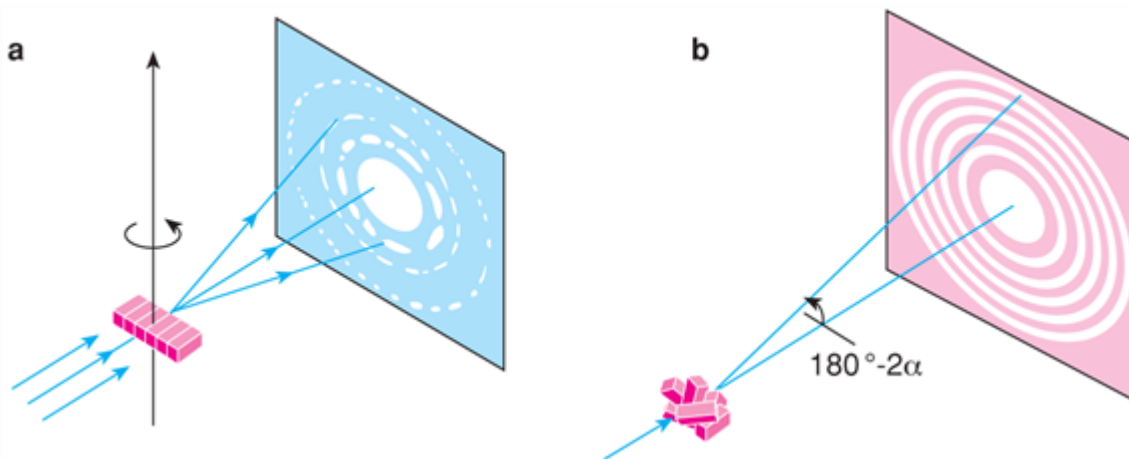
$$\begin{aligned} a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) &= h\lambda \\ b(\cos\beta - \cos\beta_0) &= k\lambda \\ c(\cos\gamma - \cos\gamma_0) &= l\lambda \\ \cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma &= 1 \end{aligned}$$

(X.37)

Az első három egyenlet „Laue-egyenletek” néven vált közzismertté. A négy egyenlet a fenti formában (3 változóval) túlhatározott, és csak α , β és γ bizonyos értékeinél szolgáltat megoldást.

A gyakorlatban ezt a problémát két módon tudták áthidalni. Az egyik az ún. forgó kristály módszer. Egykristály-mintát forgatunk a párhuzamosított röntgennyaláb előtt különböző tengelyei körül, és a forgatás során a kristály a Laue-egyenletek megoldását előmozdító α_0 , β_0 , γ_0 pozícióba kerül.

A másik módszert porított kristály módszernek nevezik. A cél ennél a módszernél is ugyanaz, mint a forgó kristály módszernél, de a gyakorlati megoldás különböző. Ha a minta nagyszámú, véletlenszerűen elrendezett kristályszemcsét tartalmaz, a beeső rtg-nyaláb különböző szögek alatt éri azokat. Így a sok kristályszemcse között lesznek olyanok is, amelyekre a beesési szögek úgy alakulnak, hogy a Laue-egyenletek megoldhatók. A módszerek elvét a X.48. ábrán mutatjuk be.

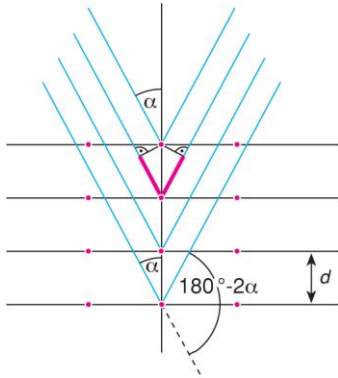


X.48. ábra. A forgó kristály és a porított kristály módszer elve

A rtg-diffrakciós eljárás eredményei a leírtakon túl úgy is interpretálhatók, hogy a rtg-sugarak nemcsak szóródhatnak, hanem vissza is verődhetnek a kristály atomjairól. A X.49. ábra szerint a reflektált sugarak is erősíthetik egymást, amely feltételt a Bragg-egyenlet írja le egy dimenzióra:

$$2d \cos \alpha = n \lambda \quad (\text{X.38})$$

ahol d az atomi rétegek távolsága, α a beesés szöge és n pozitív egész szám.

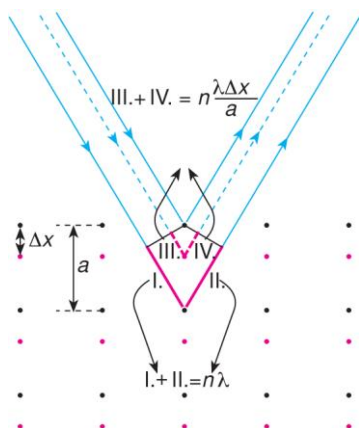


X.49. ábra. Röntgensugarak reflexiója kristályrácson

A rgt-diffrakciós módszer biológiai alkalmazásai főként bonyolult atomi szerkezetű biológiai makromolekulák, mint például fehérjék, nukleinsavak stb. szerkezetének meghatározását jelentik, ezért röviden ki kell térnünk az ezzel kapcsolatos lényeges problémákra. Amennyiben például egy molekulában egynél több fajta atom ismétlődik a kristályrácban, a molekulán belüli szomszédos atomokról szórt sugarak is kölcsönhatnak. A X.50. ábrán láthatunk egy egyszerű példát erre, amikor a molekula csak két atomot tartalmaz egy kétdimenziós kristályszerkezetbe ágyazva. Az ábra annak a helyzetnek felel meg, amikor a „fekete” atomokról eredő sugarak erősítik egymást $n\lambda$ fáziskülönbséggel. Amennyiben a molekulák közötti távolság a , és a „sötét” és a „világos” atomok közötti távolság Δx , $n\lambda \Delta x/a$ fáziskülönbséget fogunk észlelni a molekula két különböző atomjáról szórt nyalábok között (lásd X.49. ábra, a hasonló háromszögek tétele alapján). A molekulán belüli távolságok tehát a fáziskülönbségekben jelennek meg, amelyek a szórt sugarak maximumának irányában észlelhető intenzitás eloszlásokat befolyásolják.

A kristály által szórt sugarak intenzitása egyenlő $N^2 F^2$ -tel, ahol N a besugárzott térfogatban található egységcellák száma, és F a szórt hullám amplitúdója a kiválasztott irányban, amely természetesen függvénye az egységcellán belüli elektronsűrűségnek. Egységcelláról beszélünk a továbbiakban, mivel egyes anyagoknál több mint egy molekula is belefér a kristály ismétlődő legkisebb egységébe.

A nagyobb molekulák, mint például a fehérjék röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározása igen sok időt és rengeteg számítást igényel. Először is a fehérjéből egykristályt kell készíteni, amely esetleg évekig is eltarthat. Az egységcellán belüli rengeteg atom helyzetének viszonyítására általában egy nehéz atomot szokás a kristályba beépíteni referenciaként. Erről az atomról a reflektált nyaláb a többihez képest igen erős, így könnyen felismerhető. Ezt hívják izomorf helyettesítésnek. Példaképpen: egy fehérje SH-csoportja hidrogénatomja helyébe higanyatomot helyeznek. Következő lépésként a molekula szerkezetére durva előzetes becslést tesznek, amelynek alapján annak elektroneloszlását kiszámítják. A mért röntgendiffrakciós képből az anyag elektroneloszlása ún. Fourier-analízissel meghatározható. A mért és a számított eloszlást összehasonlítva az észlelt eltérések alapján a kezdeti molekulamodellen javítanak, majd az egész számítási és összehasonlítási eljárást addig ismétlik, amíg az eltérések minimálisra csökkennek és egy végleges molekulamodellben meg nem állapodnak.



X.50. ábra. Röntgensugarak reflexiója kétatomos molekulák kristályrácsán

7. X/7. Tömegspektrometria

A tömegspektrométer olyan műszer, amely gáz fázisú ionok tömegének nagy pontosságú mérésére alkalmas. Segítségével akár 300 kDa nagyságú makromolekulák is vizsgálhatók pikomólos érzékenységgel, a 0,5 kDa-nál kisebb molekulák pedig már attomól mennyiségben analizálhatók, ezért mind az alap kutatásban, mind a diagnosztikában egyre nagyobb szerepet kap. Különböző betegségek vagy metabolikus zavarok következtében megváltozik az ember vérének és vizeletének összetétele. A modern tömegspektrométerek alkalmasak ezek gyors molekuláris ujjlenyomatának elkészítésére, amit elterjedten használnak genetikai betegségek azonosítására és szennyező, mérge-, vagy doppinganyagok kimutatására. A 2002 és 2003 években elért áttörés ma már lehetővé teszi a prosztatata- és a petefészekrák korai diagnosztizálását is.

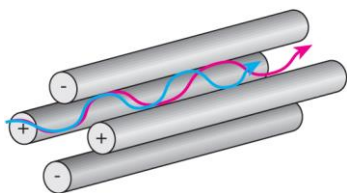
Minden tömegspektrométer a következő három részből áll: ionforrás (a vizsgálni kívánt minta molekuláit gáz fázisba viszi és ionizálja), analizátor (az ionokat gyorsítja majd elektromos vagy mágneses tér segítségével szétválasztja a tömeg/töltés (m/z) hányadosuk szerint), detektor (az ionokat érzékeli).

Biológiai makromolekulák esetén a gáz fázisú ionok előállítására két hatékony módszer is létezik: az elektropray-ionizáció (Electro Spray Ionization, ESI), és a mátrixközvetített lézeres deszorpció/ionizáció (Matrix Assisted Laser Desorption/Ionization, MALDI). Az alkalmazott ionizációs módszer meghatározza a használható analizálási technikát is. Ennek megfelelően a biológiai makromolekulák analizálására a legelterjedtebben a kvadrupól és a repülési idő (time of flight, TOF) módszert használják.

A tömegspektrométerekben vákuumot kell létrehozni, hogy a vizsgált ionok a forrástól a detektor felé haladva ne ütközzenek gázatomokkal. Az elektropray- (ESI) módszer során ebbe a vákuumba apró töltött cseppekké porlasztva fecskendezik be a mintát. Az oldószer a vákuumban gyorsan párolog, és ahogy a cseppek egyre kisebbek lesznek, nő bennük a töltéssűrűség. A nagy elektromos taszítóerő végül kisebb cseppekre szakítja szét a cseppet. Ez a folyamat mindaddig ismétlődik, amíg az oldószer teljesen elpárolog, és csak a töltött makromolekulák maradnak. Mivel a minta befecskendezése folyamatos, az ESI állandó ionárammal látja el az analizátort.

A mátrixközvetített lézeres deszorpció/ionizáció (MALDI) egy rövid lézerpulzust használ a minta gáz fázisba vitelére. A vizsgálni kívánt minta egy olyan kis molekulatömegű adalékanyagba (mátrix) van belekeverve amely jól elnyeli a használt lézer fényét, és apró kationokat is tartalmaz. A lézerpulzus hatására a minta molekulái és a kationok a mátrixszal együtt szakadnak le a felszínről. A makromolekula ionjai a mátrix elpárolgása után maradnak vissza. A módszer a minta ionjait rövid impulzusok formájában állítja elő.

A négy párhuzamos vezető rúdból álló kvadrupólanalizátor (X.51. ábra) csak elektromos teret használ az eltérő m/z arányú ionok szétválasztására. Az ionoknak a rudak között kell elhaladni. A rudakra olyan időben változó feszültséget kapcsolnak, hogy csak adott m/z arányú ionok tudnak áthaladni közöttük, az ettől eltérő m/z értékkel rendelkezők a rudaknak ütköznek. A módszer állandó ionáramot igényel, ezért ESI ionizációval kombinálva szokták használni.

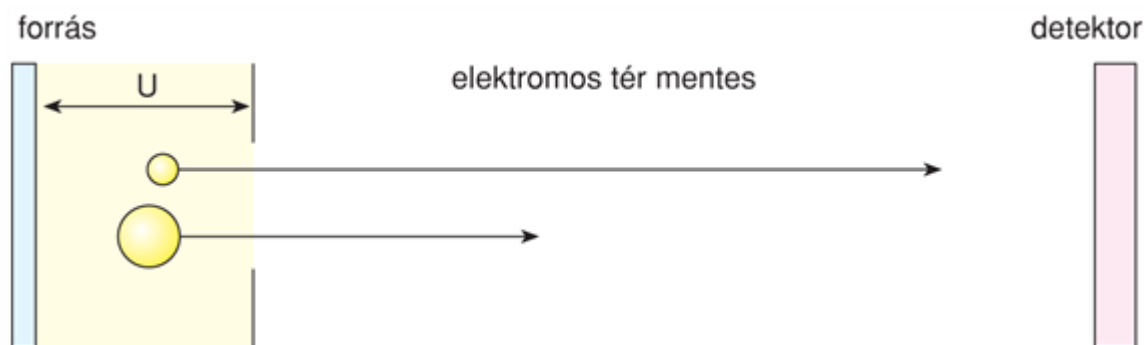


X.51. ábra. A kvadrupol tömeganalizáló vázlata, és benne egy, a kiválasztottnak megfelelő (piros) és egy attól eltérő (kék) m/z arányú ion útvonala

A repülési idő (TOF) módszernek rövid ionimpulzusokra van szüksége, ezért MALDI ionforrással használják. A TOF-módszer alapja, hogy azonos feszültséggel gyorsítva, a nagyobb m/z arányú ionoknak kisebb lesz a sebessége. Az ionok sebességét egy elektromos tértől mentes egyenes szakasz befutásához szükséges időből határozzák meg (X.52. ábra). A sebesség ismeretében m/z kiszámolható.

A detektorok felépítésének jelentősége elhanyagolható az ionforráshoz és az analizátoréhoz képest. A becsapódó ionokat elektronsokszorozóval vagy szcintillációs számlálóval detektálják.

Annak eldöntésénél, hogy melyik tömegspektrometriai módszert alkalmazzuk, figyelembe kell venni, hogy az ionizációs és az analizálási technika nem választható meg egymástól függetlenül. A vizsgálni kívánt molekula tömege, sók esetleges jelenléte, a szükséges pontosság és érzékenység ismeretében mérlegelni kell az egyes módszerek előnyeit illetve hátrányait. Ebben nyújt egy hozzávetőleges eligazítást a X.1. táblázat.



X.52. ábra. A repülési idő (TOF) tömeganalizáló működésének vázlata. A különböző tömegű ionokat eltérő nagyságú körök jelzik. A nyilak a sebességeket jelölik, amivel az ionok térmentes részen áthaladnak

10.1. táblázat - X.1. táblázat Az ESI- és MALDI-módszert használó tömegspektrométerek lehetőségeinek összehasonlítása

	ESI	MALDI
felső tömeghatár	100 kDa	300 kDa
tömegmérés pontossága*	0,005%–0,05%	0,05%–0,1%
sók jelenléte	nem megengedett	kis mennyiség
érzékenység*	0,5 pmól	0,1 pmól

* 20-30 kDa nagyságú fehérje esetén

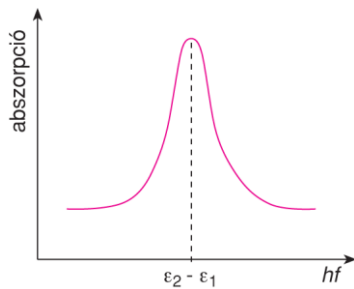
Mössbauer-spektroszkópia

Természetesnek tűnik, hogy egy adott atomi rendszer radioaktív γ -sugárzását (például a ^{208}Pb -magok $4,2 \cdot 10^{-13}$ J energiájú gamma-sugarait) ugyanazon atomi rendszerek (^{208}Pb -magok) nagy valószínűséggel abszorbeálják, hiszen az abszorpció és az emisszió azonos szintek között megy végbe, tehát azonosak az energiák. Ennek az úgynevezett rezonanciaabszorpciónak a valószínűségére számítások végezhetők. Meglepő volt azonban, hogy

atommagok esetén az első ilyen irányú kísérletek negatív eredményre vezettek. A γ -sugárzás ún. „visszalökődés-mentes rezonanciaabszorpcióját” Rudolf Mössbauer az ötvenes évek végén fedezte fel. Az általa kidolgozott módszer biológiai jelentőségét az adta, hogy a vasatomokat tartalmazó molekulák (enzimek, hemoglobin) konformációs változásai jól követhetők e spektroszkópiás módszerrel.

Az atomi rendszerek általában alapállapotukban vannak, amely a legalacsonyabb energiájú állapotot jelenti. A Bohr-elmélet szerint, ha egy atomi rendszer egy E_1 alapállapotból egy E_2 gerjesztett állapotba kerül, onnan bizonyos λ_{21} valószínűséggel $hf_{21} = E_2 - E_1 = E_\gamma$ energiájú kvantum kibocsátása mellett visszakerül az alapállapotba. A gerjesztett állapot tehát általában nem stabil állapot, és az ilyen állapotban lévő rendszerek egy átlagos $\tau = 1/\lambda$ idő elteltével gerjesztett állapotukat elveszítik.

Az atomi rendszerek gerjesztése során az alapállapotban lévő rendszerek magasabb energiájú gerjesztett állapotba kerülnek. Ilyen átmenetek játszódhatnak le meghatározott energiájú elektromágneses sugárzás abszorpciója során. A 1. ábra azt mutatja be, hogy egy tetszőleges minta a fotonenergia függvényében hogyan abszorbeálja az elektromágneses sugárzást. Jól látható, hogy csak meghatározott fotonenergiáknál van jelentős elnyelés. Az $E_2 - E_1 = E_\gamma$ energiájú fotonok elnyelését rezonanciaabszorpciónak nevezzük.



1. ábra. Foton rezonancia-abszorpciója

Látható, hogy az elnyelés nemcsak egyetlen fotonenergia mellett jön létre, hanem egy meglehetősen széles frekvencia- (s így fotonenergia-) tartományban. Ez azt jelenti, hogy a gerjesztett állapotoknak van egy energiabizonytalansága, ami az abszorpció görbe kiszélesedésében nyilvánul meg.

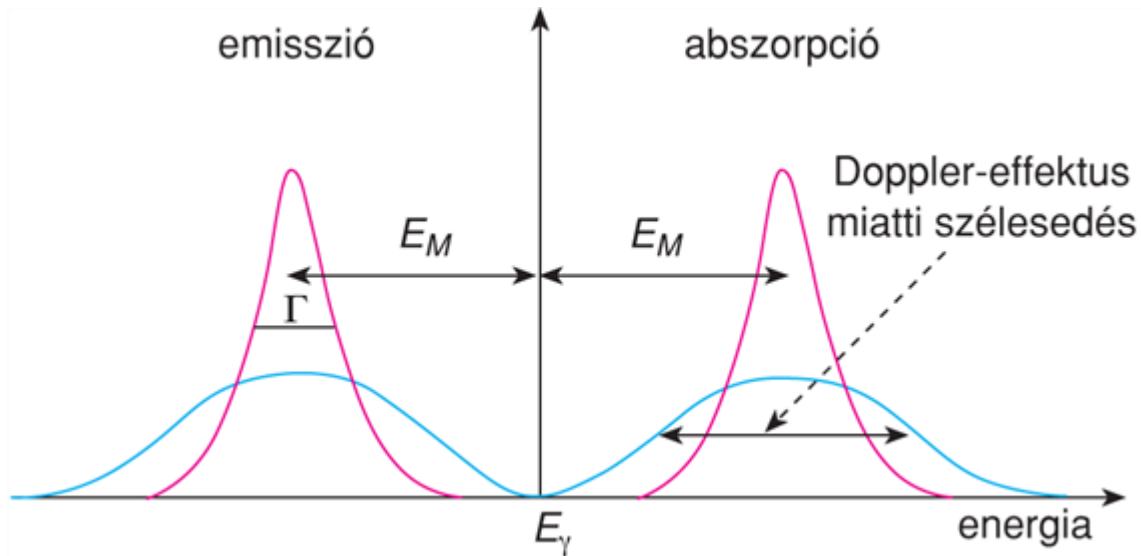
A Heisenberg-féle határozatlansági relációnál említettük, hogy a mikrovilágban nem egyedülálló az impulzus és a megfelelő helykoordináta bizonytalanságai között fennálló $\Delta x \Delta p_x \approx h$ összefüggés. Hasonló kapcsolat van a gerjesztett állapotok energia- és az ebben az állapotban eltöltött időbizonytalansága között. Az utóbbit a gerjesztett állapot közepes élettartamával jellemezzük, és τ -val jelöljük. A fentiek szerint a gerjesztett állapot nem egy jól meghatározott energiával jellemezhető szint, hanem van egy úgynevezett természetes szélessége, elmosódottsága, határozatlansága, amely

$$\Gamma = \frac{h}{\tau}$$

nagyságrendű. Minél hosszabb tehát a gerjesztett állapot élettartama, annál kisebb mértékű a természetes kiszélesedés. Az említett törvényszerűségek egyaránt érvényesek az elektronhéjban vagy az atommagban lejátszódó folyamatokra.

Mivel a gerjesztett állapotok energiabizonytalansága a kibocsátott sugárzás frekvenciaeloszlását szükségszerűen befolyásolja, kézenfekvő, hogy a radioaktív magok sugárzása nem monokromatikus, hanem egy véges szélességű spektrummal rendelkezik.

Ez a spektrum a valóságban az egyes atomi, emittáló rendszerek hõmozgása miatt általában a Γ természetes szélességénél szélesebb. Ez a szóban forgó atomi rendszerek sebessége a rendszertelen hõmozgás miatt az esetek egy részében az emisszió irányával megegyezik, ekkor a Doppler-effektus miatt az emittált sugárzás energiája (frekvenciája) nõ, máskor a sebesség ezzel ellentétes irányú, így az emittált fotonenergiánál kisebb energiák is előfordulnak (2. ábra). Hasonló okok miatt az abszorbens abszorpció spektruma is kiszélesedik, ahogy az az ábrán látható.



2. ábra. Atommag γ -foton-abszorpciós és -emissziós spektruma

Az említett kölcsönhatások a rezonanciaabszorpció valószínűségét csökkentik, mert különböző okok miatt az emissziós és az abszorpciós spektrum kiszélesedik, de azért a két spektrum mégis átfedi egymást. A γ -sugárzás rezonancia abszorpciójára kapott negatív eredmény így arra utal, hogy nem vettek figyelembe minden jelentős tényezőt.

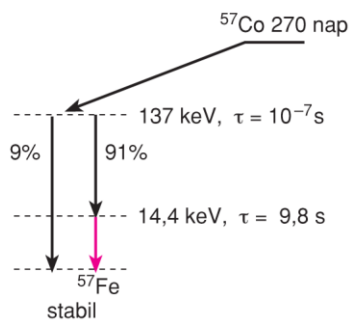
Ismeretes, hogy a magból távozó hf energiájú foton $p_\gamma = hf/c$ impulzust visz magával. Ez az impulzusmegmaradás törvénye szerint azt eredményezi, hogy a visszar maradó M tömegű atommag ugyanilyen impulzussal „visszalökődik”. A visszalökődő atommag E_M kinetikus (visszalökődési) energiája csak az átmenet E_γ energiájából fedezhető, ezért az emittált foton energiája csökken.

Az abszorpcióhoz, hasonló okok miatt, a gerjeszteni kívánt átmenet energiájánál nagyobb energiájú foton szükséges, hogy fedezni tudja a magnak az impulzusmegmaradás megkövetelte mozgási energiáját is.

Így az emissziós és az abszorpciós spektrumok nemcsak kiszélesednek, hanem egymáshoz képest $2E_M$ energiával el is tolnak, ami a rezonanciaabszorpció valószínűségét a kísérleti kimutathatóság határa alá csökkentheti (lásd 2. ábra).

$$E_M = \frac{1}{2} Mv^2 = \frac{(Mv)^2}{2M} = \frac{p_\gamma^2}{2M} = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2}.$$

Az ^{57}Fe a leggyakrabban használt Mössbauer-izotóp. Az anyamag a ^{57}Co izotóp, amely K -befogással alakul át a gerjesztett állapotú ^{57}Fe izotóppá. A gerjesztett magok kb. 10%-a egyetlen átmenettel megy át alapállapotba, 90%-a pedig két lépésben éri el az alapállapotot (3. ábra). Az első lépésben 10^{-7} s felezési idővel 123 keV energiájú γ -fotonokat emittálnak, és egy 14,4 keV energiájú, közbülső állapotba kerülnek. Ebből az állapotból az alapállapotba vezető átmenet a Mössbauer-átmenet. Az átmenet természetes kiszélesedése (Γ) $4 \cdot 10^{-8}$ eV. A visszalökődő mag kinetikus energiája $2 \cdot 10^{-3}$ eV, ami több nagyságrenddel meghaladja a természetes kiszélesedés értékét, így a rezonanciaabszorpció valószínűsége szinte nulla.



3. ábra. Mössbauer-izotóp bomlási sémája

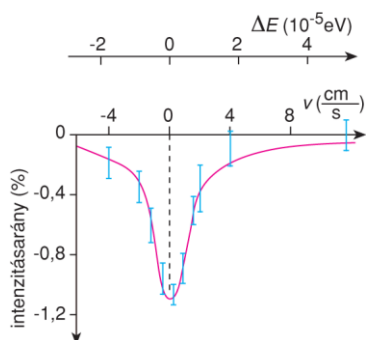
Az egyenletnek megfelelően a visszalökődő mag energiája fordítottan arányos a mag M tömegével. Az M növelésével tehát EM csökkenthető. Ezt úgy lehet elérni, hogy az ^{57}Fe izotópot makroszkopikus nagyságú kristályba építjük be, s így a nevezőbe az egész kristály tömege kerül, ami sok nagyságrenddel meghaladja az egyedüli atom tömegét. A Doppler-hatás miatti kiszélesedés a hõmozgás eredménye, ezért a minta hûtésével csökkenthető. A felsorolt tényezõk figyelembevételével (kristályba beépített ^{57}Co sugárforrás és ^{57}Fe abszorbens atommagok, alacsony hõmérséklet) tervezett kísérletekben a 14 keV-os γ -sugárzás rezonanciaabszorpcióját meggyõzõ módon sikerült kimutatni (4 ábra).

Megjegyezzük, hogy gáz vagy folyadék fázisban lévõ atommagok által kibocsátott γ -sugárzás rezonanciaabszorpcióját ugyanilyen fázisban lévõ abszorbenssel a nagy energiaeltolódás ($2EM$) miatt nem lehet kimutatni.

Amennyiben a forrás és az abszorbens alap- és gerjesztett állapota közötti energiakülönbség nem pontosan egyezik meg, rezonanciaabszorpció csak úgy érhető el, hogy a forrást és az abszorbenst v sebességgel közelítjük, illetve távolítjuk, kihasználva ezzel a Doppler-effektust ($E' = E[1+v/c]$). Ekkor a 4. ábra sebességtengelyén nem a zérus relatív sebességnél lesz az abszorpció maximuma. A rezonanciaabszorpció maximumához tartozó v mérése igen pontos energiaeltolódások meghatározására ad lehetőséget. Ha mágneses térbe helyezük a sugárforrást vagy az abszorbenst, akkor a mag energiaszintjeiben bekövetkező enyhe eltolódások miatt megszűnik a rezonanciaabszorpció. Ha ekkor a két kristályt igen lassan (néhány cm/s) egymáshoz képest mozgatjuk, a rezonanciaabszorpció visszaállítható.

Hasonló szintű változást okozhat az atommag energiaszintjeiben a megváltozott kémiai környezet is. Ha például hemoglobinba ^{57}Fe izotópot építenek be, Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálható, hogy különböző folyamatok (oxidáció, redukció) milyen mértékű szerkezeti változással járnak. Kedvező lehetőségeket kínál a módszer egyéb biológiailag fontos molekulák kötésviszonyainak tanulmányozására is.

A Mössbauer-spektroszkópia segítségével atomi rendszerek alap- és gerjesztett állapotainak energiakülönbségében bekövetkező, igen kicsi változásokat ki lehet mutatni, és emiatt vált érzékeny szerkezetvizsgáló módszerré.



4. ábra. γ -sugárzás rezonancia-abszorpciója ^{57}Fe -atommagokban. Az abszorbens mögé helyezett γ -számlálóban a rezonancia-abszorpció következtében a beütésszám csökken

11. fejezet - A legfontosabb, könyv alakban megjelent irodalmi források

Természettudományi Lexikon, Főszerkesztő: Erdey-Grúz Tibor, Akadémiai Kiadó, 1964

Charles Kittel: **Bevezetés a szilárdtest fizikába**, Műszaki Könyvkiadó, 1966

Ernst Jenő: **Bevezetés a biofizikába**. Akadémiai Kiadó, 1967

Modern fizikai kisenciklopédia, Szerkesztette: Fényes Imre, Gondolat Kiadó, 1971

K. Tradowsky: **A laser ABC-je**, Műszaki Könyvkiadó, 1971

Biológiai Lexikon, Főszerkesztő: Straub F. Brúnó, Akadémiai Kiadó, 1975

Károlyházi Frigyes: **Igaz varázslat**, Gondolat Kiadó, 1976

Simonyi Károly: **A fizika kultúrtörténete**, Gondolat Kiadó, 1978

Marx György: **Éltrevaló atomok**, Akadémiai Kiadó, 1978

Prékopa András: **Valószínűségelmélet**, Műszaki Könyvkiadó, 1980

Fizikai kézikönyv műszakiaknak, Főszerkesztő: Antal János, Műszaki Könyvkiadó, 1980

Bernolák Kálmán: **A fény**, Műszaki Könyvkiadó, 1981

A. Nussbaum, R. A. Phillips: **Modern optika**, Műszaki Könyvkiadó, 1982

R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands: **Mai fizika**, Műszaki Könyvkiadó, 1986

Fizika, Szerkesztette: Holics László, Műszaki Könyvkiadó, 1986

P. W. Atkins: **Fizikai kémia**, Tankönyvkiadó, 1992

Maróti Péter, Laczkó Gábor: **Bevezetés a biofizikába**, JATE, 1993

Helmut Fogel: **Kompakt fizika**, Springer, 1995

Budó Ágoston, Pócza Jenő: **Kísérleti fizika**, Tankönyvkiadó, 2000

Fizika, Szerkesztette: Tomcsányi Péter, Kalibra könyvek, Műszaki Könyvkiadó, 2001

A biofizika alapjai, Szerkesztette: Rontó Györgyi, Tarján Imre, Semmelweis Kiadó, 2002

W. Edward Gettys, Frederick J. Keller, Malcolm J. Skove: **Physics: Classical and Modern**, Mc Graw-Hill Book Company, 1989

Hugh D. Young: **Physics**, 8th edition, Addison-Wesley Publishing Company, 1992

John D. Cutnell, Kenneth W. Johnson: **Physics**, 2nd edition, John Wiley & Sons, 1992

Bagshaw, C. R.: **Muscle Contraction**, 2nd edition. Chapman & Hall, London, 1993

Perry, S. V.: **Molecular Mechanisms in Striated Muscle**, Lezione Lincee, Cambridge University Press, 1996

Oxford Handbook of Nucleic Acid Structure, Edited by Stephen Neidle, Oxford University Press, 1999

Kreis, T. and Vale, R. (editors): **Guidbook to the Cytoskeletal and Motor Proteins**, 2nd edition, Oxford University Press, 1999

Carraway, K. L. and Carraway, C. A. C. (editors): **Cytoskeleton: Singalling and Cell Regulation in The Practical Approach Series** (Ed.: Hames, B. D.), Oxford University Press, 2000

Howard, J.: **Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton**, Sinauer Associates, Inc. Sunderland, MA, 2001

Alberts, B., Johnson, A., Lewis, J., Raff, M., Roberts, K. and Walter, P.: **Molecular Biology of the Cell**, 4th edition, Garland Publishing, Inc., New York and London, 2002