

# DFT Biofizika

## 2. Fény és anyag kölcsönhatásai Lumineszcencia, lézer

Hőmérsékleti sugárzás és lumineszcencia. Fluoreszcencia és foszforeszcencia: Jablonski-diagram, Kasha-szabály, Stokes-eltolódás. A fényerősítés elve: populáció-inverzió, spontán és indukált emisszió, optikai rezonátor. A lumineszcencia és a lézerek alkalmazása a fogorvostudományban.

Dr. Liliom Károly

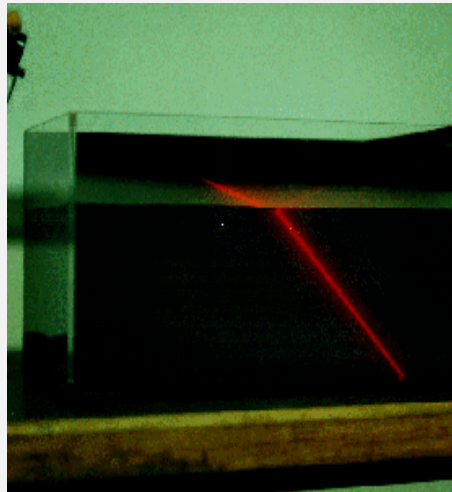
karoly.liliom.mta@gmail.com

2023. 09. 19.

# Fény és anyag kölcsönhatásai

beeső fénysugár

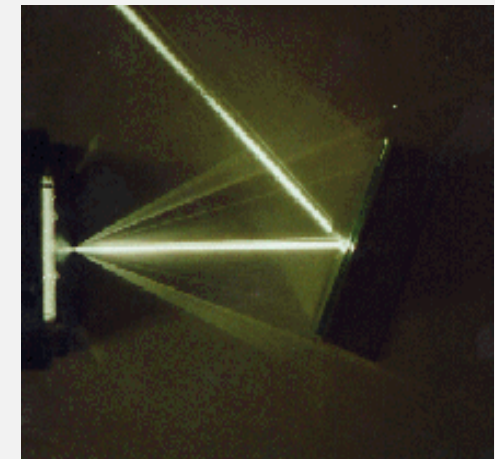
visszaverődés



fénytörés

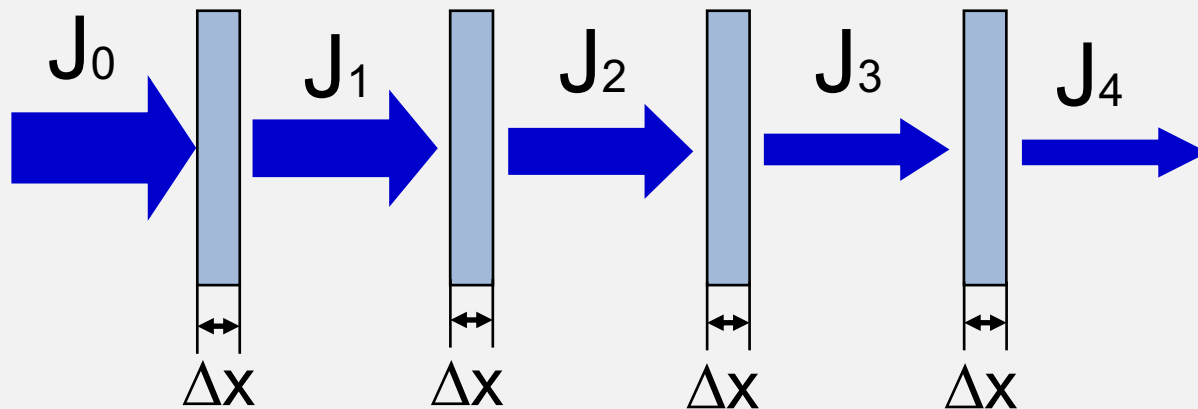
szóródás

elnyelődés



# Az intenzitás gyengülésének törvénye

$$\Delta J = J_0 - J_1 = J_1 - J_2 = \dots$$



$$\frac{\Delta J}{\Delta x} = -\mu \times J$$

**Differenciális alak**

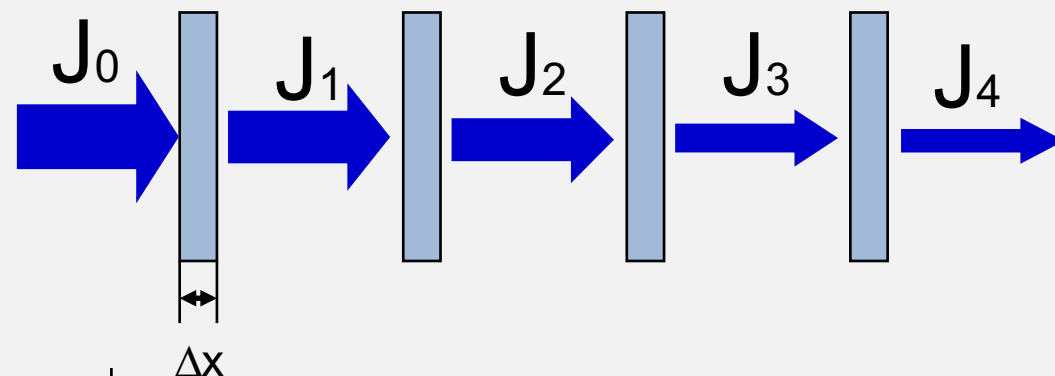
$J_i$ : az  $i$ -edik közegbe belépő sugárzás intenzitása [ $\text{W}/\text{m}^2$ ]

$\Delta J$ : az intenzitás megváltozása  $\Delta x$  rétegen való áthaladáskor

$\mu$ : gyengítési állandó [ $1/\text{m}$ ]

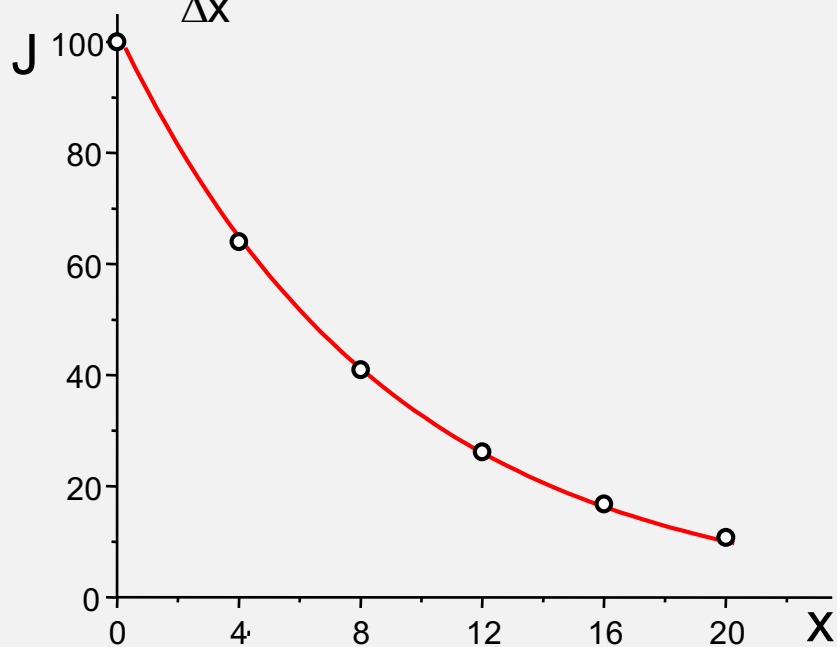
**A közegen áthaladó sugárzás intenzitásának megváltozása arányos a közegbe belépő intenzitással**

# Az intenzitás gyengülésének törvénye



$$\frac{\Delta J}{\Delta x} = -\mu \times J$$

az egyenlet  
megoldása



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

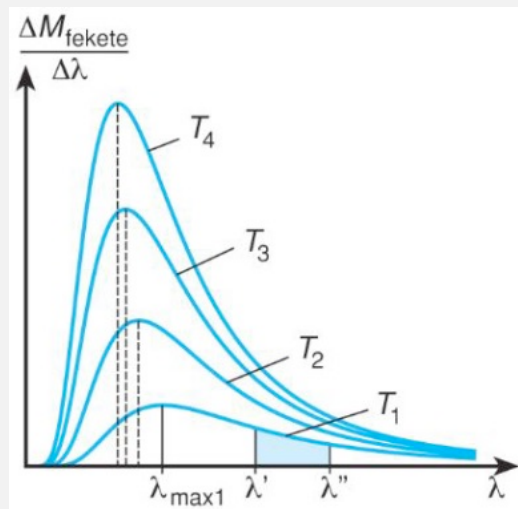
**Integrális alak**

$e$  = Euler szám = 2,71828...



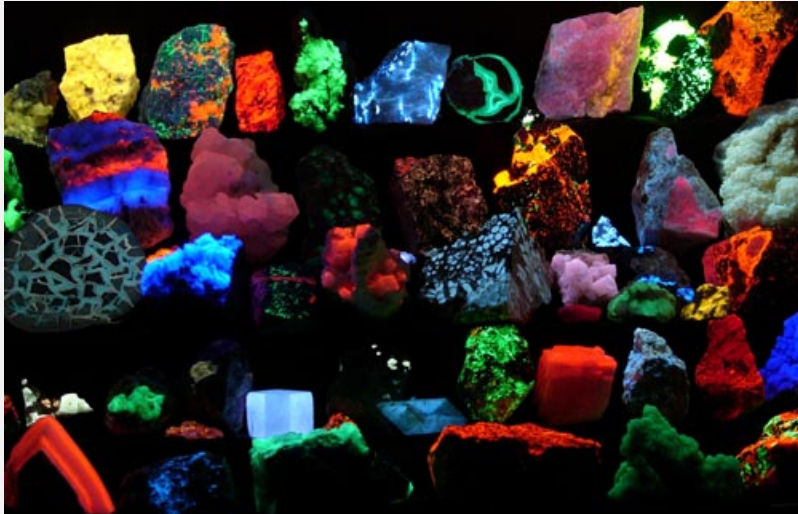
# A fényemisszió formái

- Hőmérsékleti (feketetest) sugárzás
- Lumineszcencia
- Lézer



**Lumineszcencia: a testek által a hőmérsékleti sugárzáson felül kibocsájtott többlet-sugárzás (hideg fény).**

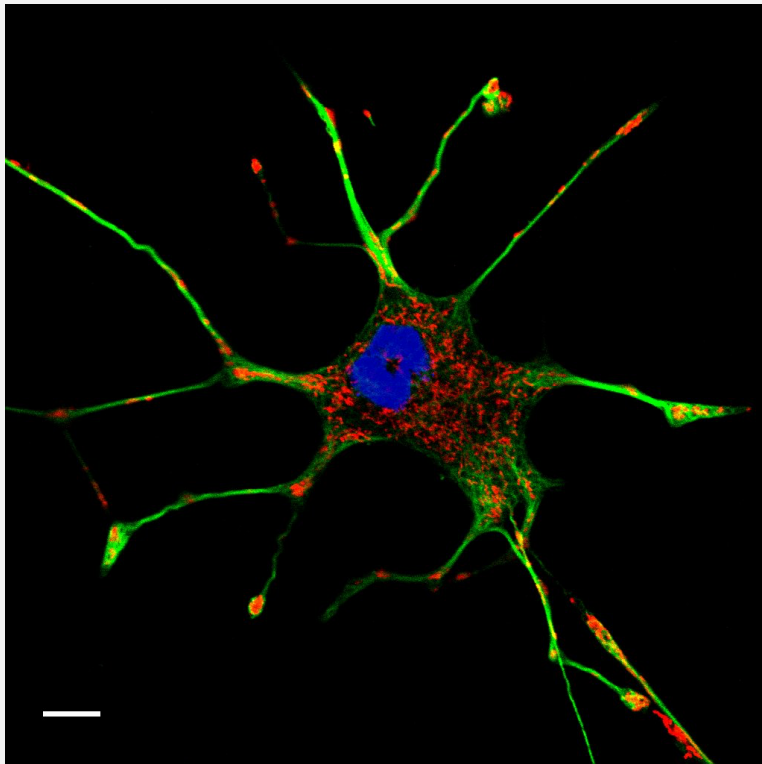
# Lumineszcencia a természetben



ásványok, medúzák, plankton, algák, növények...



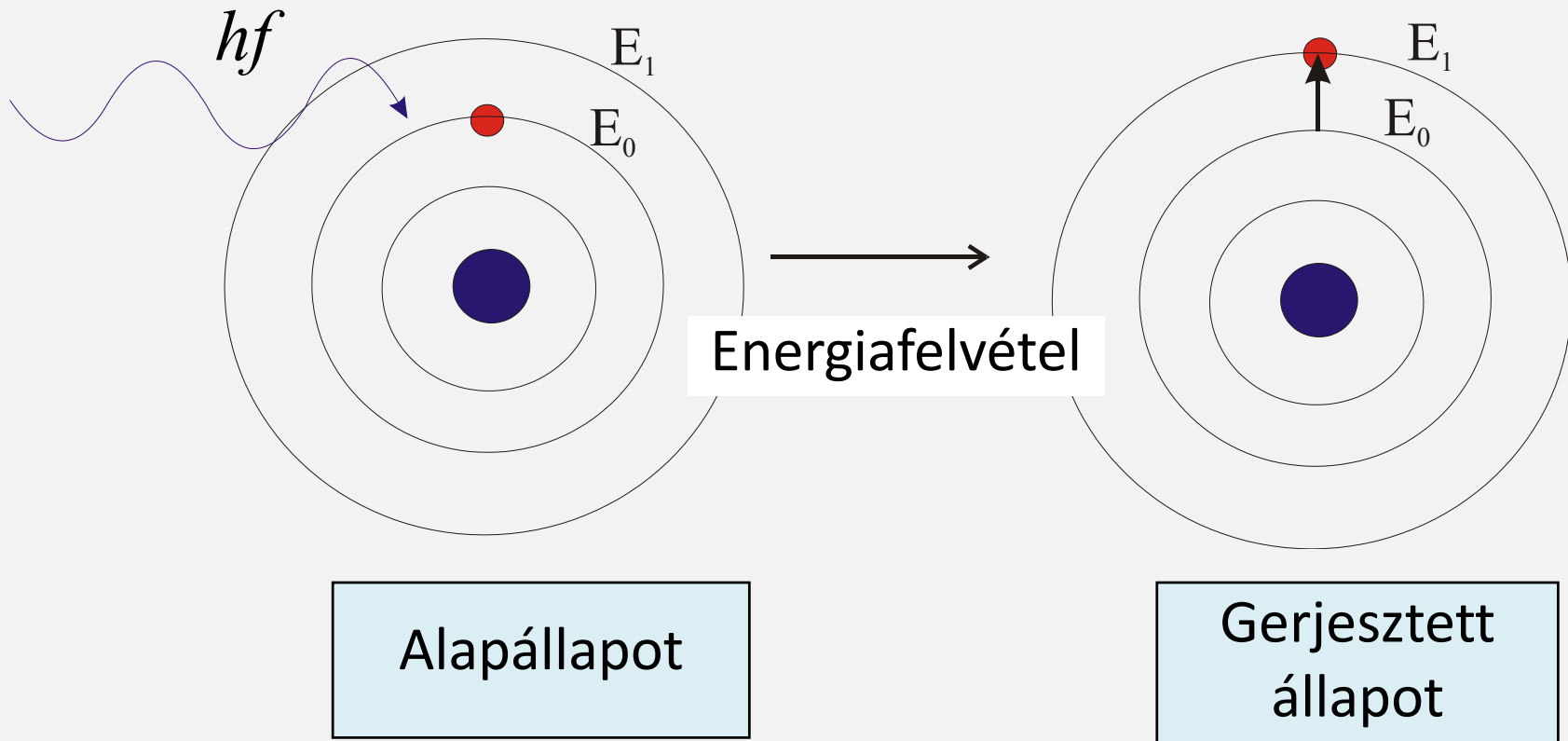
# Lumineszcencia alkalmazásai



# Tekintsünk egy atomot

Gerjesztési  
energia

$$hf = \Delta E = E_{n+1} - E_n$$



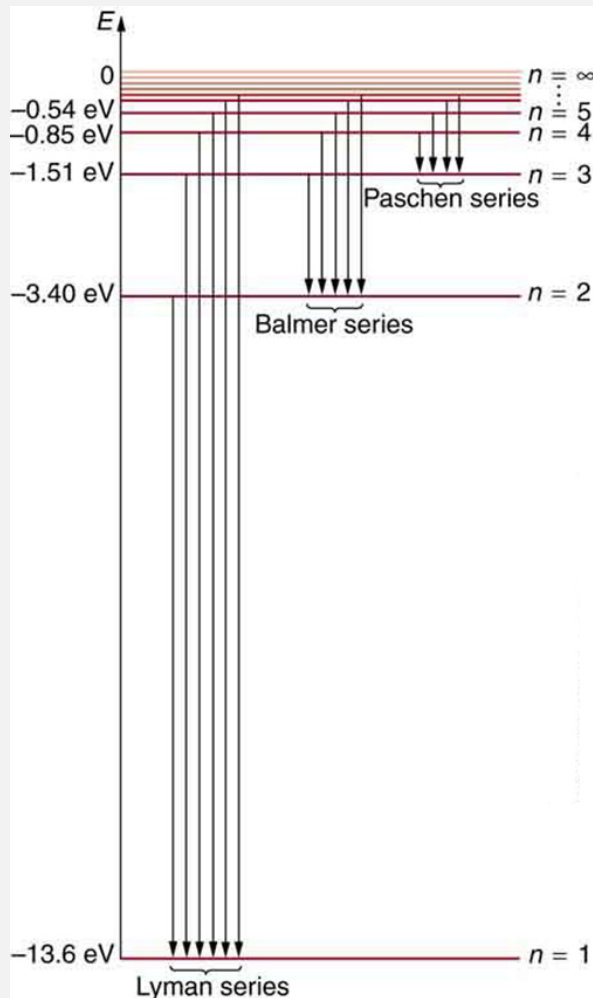
Alapállapot

Gerjesztett  
állapot



# Atomi energiaszintek

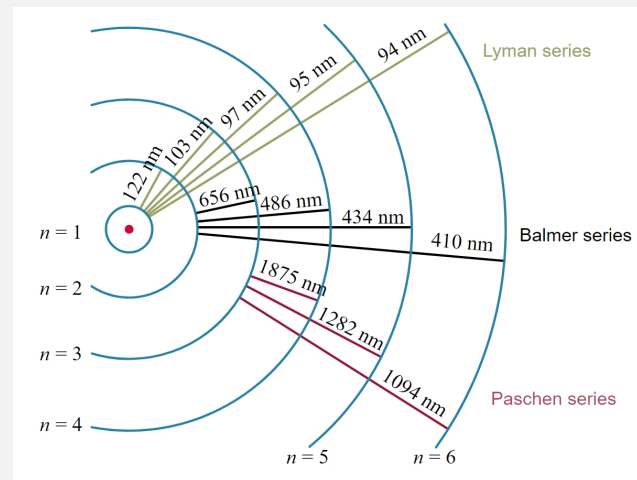
Jablonski-diagram



A hidrogén elnyelési színeképe:

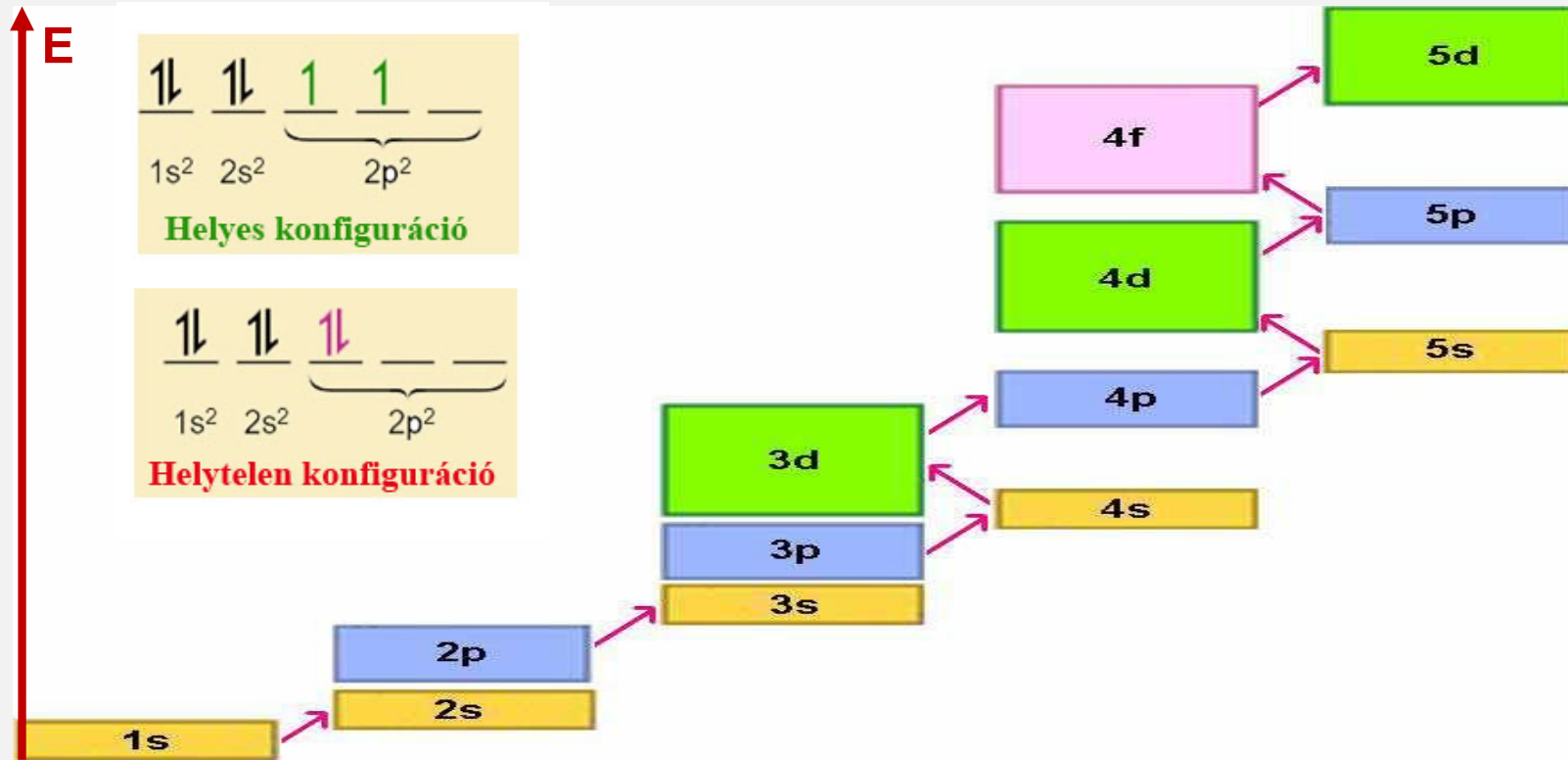


A hidrogén kibocsátási színeképe:



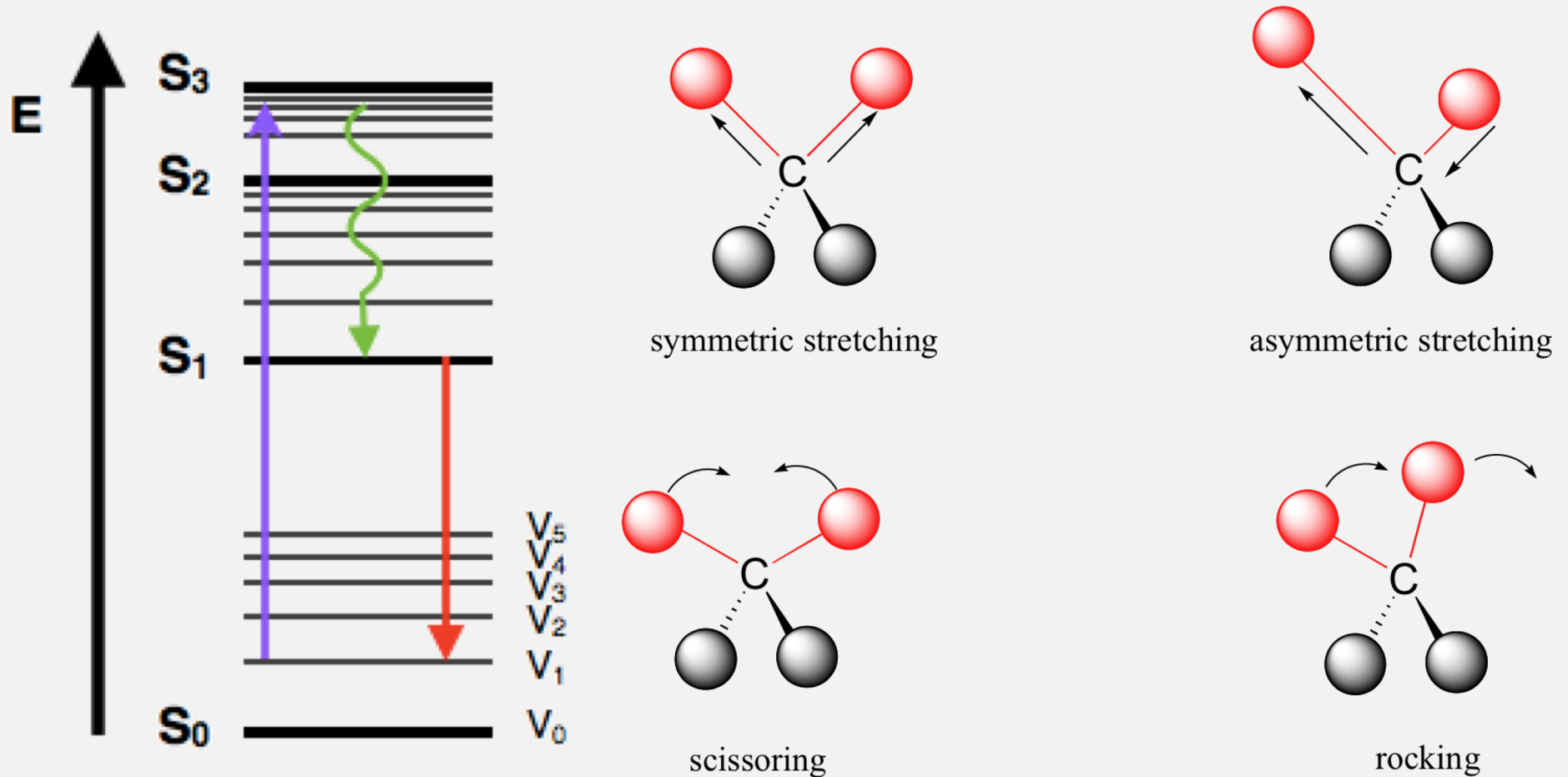
Niels Bohr (1913): Az atomban az elektronok stacionárius pályákon helyezkednek el, nem sugároznak. A stacionárius pályák közötti átmenetek során az elektron a pályák energiakülönbségét kell felvegye, illetve relaxáció során azt sugározza ki.

# Atomi energiaszintek



- Az atomban az elektronok energiaállapotai kvantáltak
- A lehetséges legalacsonyabb energiájú állapotot töltik be
- Pauli-féle kizárási elv: egy atomon belül nem létezhet két olyan elektron, amelyeknek mind a négy kvantumszáma megegyezik
- Hund-szabály: adott elektron-konfiguráció mellett a legnagyobb eredő spin-értékű állapotnak van a legalacsonyabb energiája.

# Molekulák energiaszintjei

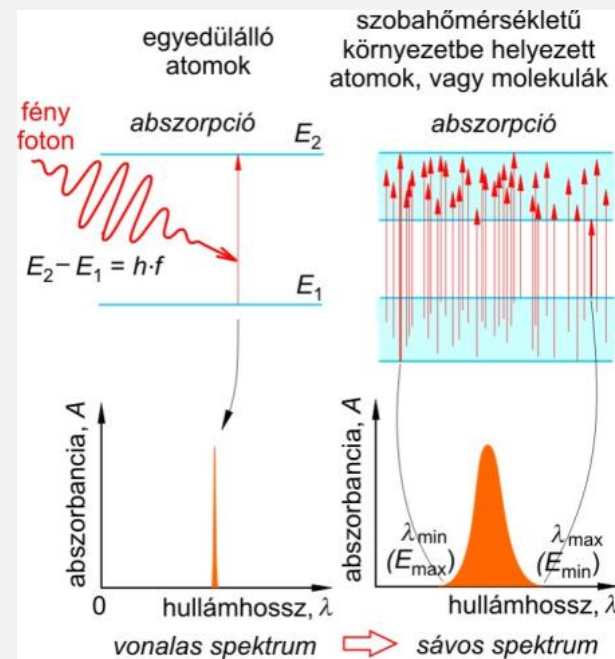
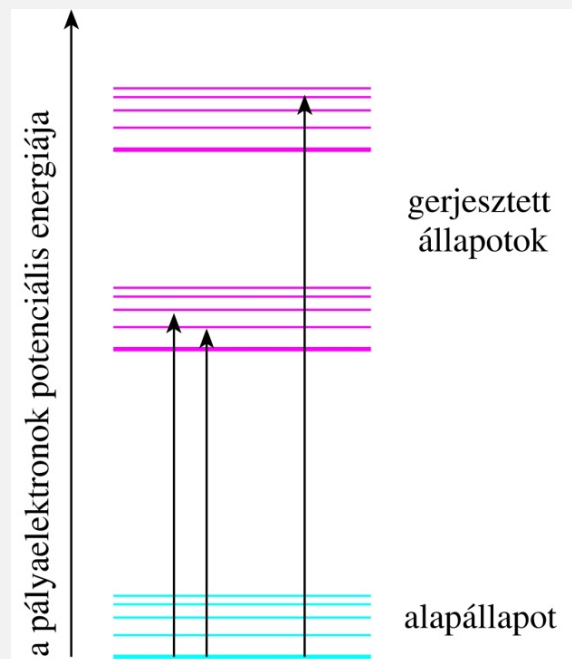


A rezgési (vibrációs) és forgási (rotációs) energiaszintek is kvantáltak!

# Molekula energiaállapotai rezgési szintekkel:

$\sim$  tized eV  $\updownarrow$

$\sim$  eV



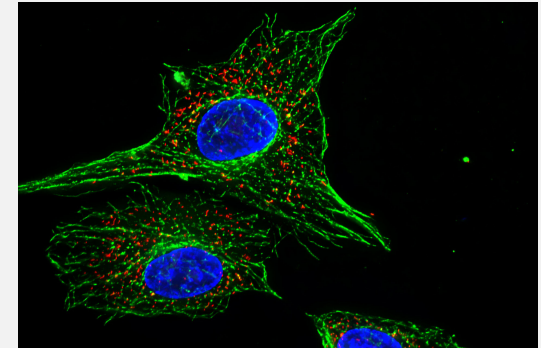
Adott molekula különböző, egymáshoz „közelebbi” energiával rendelkező fotonokat is képes elnyelni

→ sávós elnyelési spektrum



# Gerjesztés sokféleképpen lehetséges

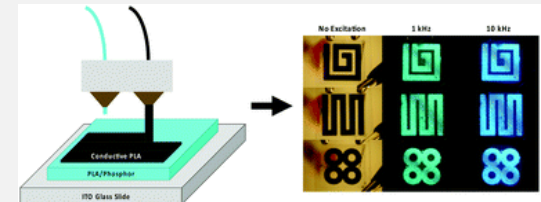
-(fény) foton elnyelése: *fotolumineszcencia*



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

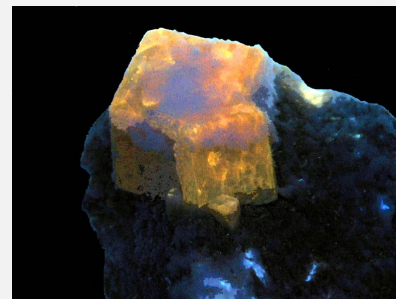


-elektromos tér vagy áram: *elektrolumineszcencia*



-mechanikai deformáció: *tribolumineszcencia*

mentacukor

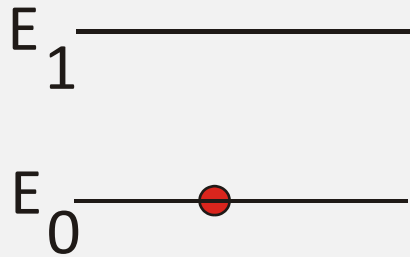


Wulfenit

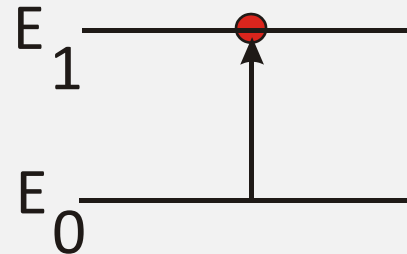
-hőközlés: *termolumineszcencia*



# Relaxáció mechanizmusa



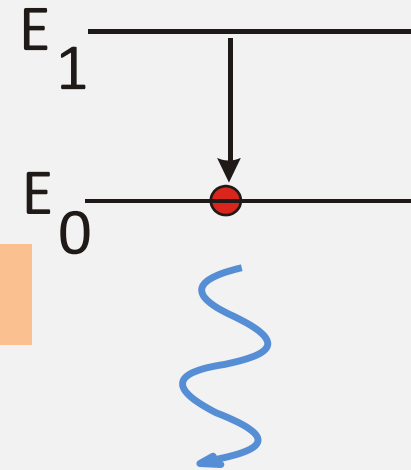
külső héjon lévő  
elektron gerjesztése



elektron visszatérése  
alapállapotba



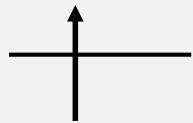
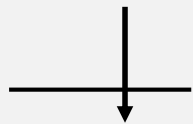
Spontán, külső hatás nélkül!



fényemisszió

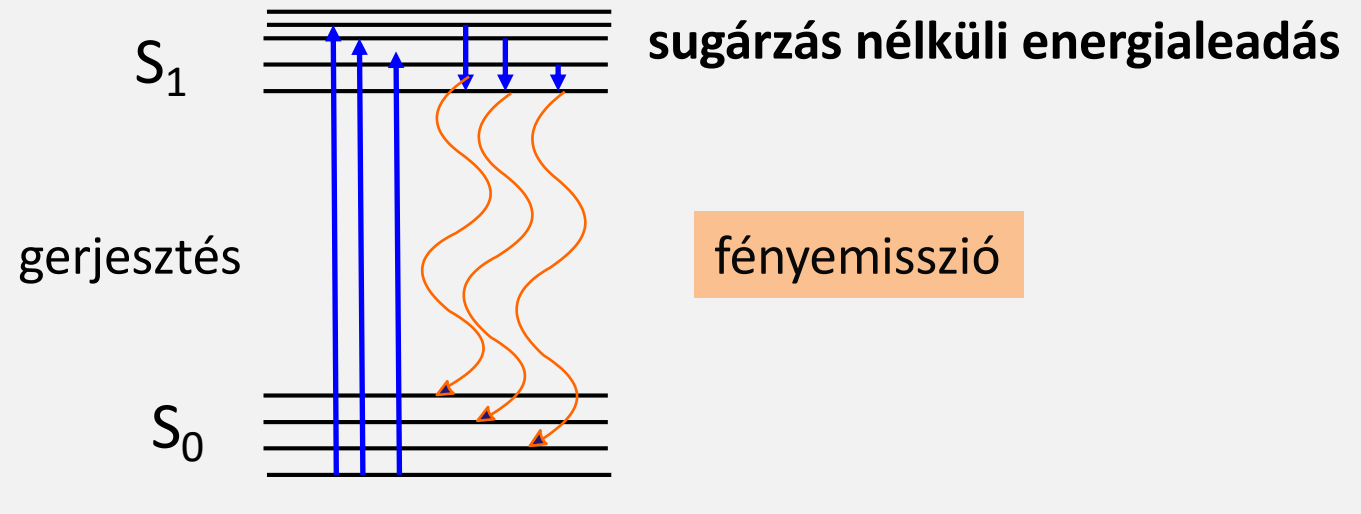
$$hf = E_1 - E_0$$

# Fluoreszcencia mechanizmusa



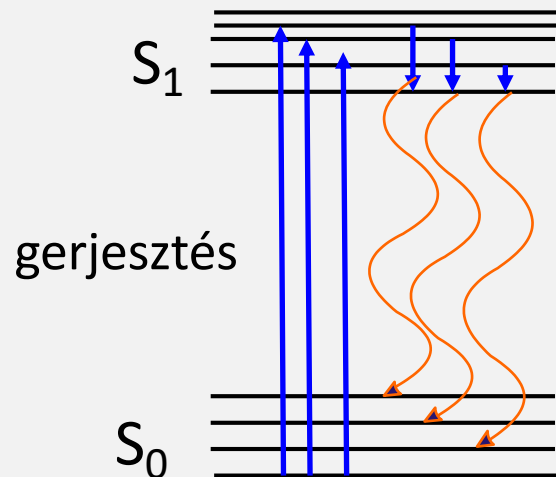
Szingulett állapot

Párosított spinű  
elektronok



Fluoreszcencia

**Fényemisszió spinváltás nélkül!**



## Kasha-szabály:

a fényemisszió a legalsó gerjesztett elektronállapot legalsó rezgési nívójáról történik



$$E_{\text{gerjesztés}} \geq E_{\text{fluoreszcencia}}$$

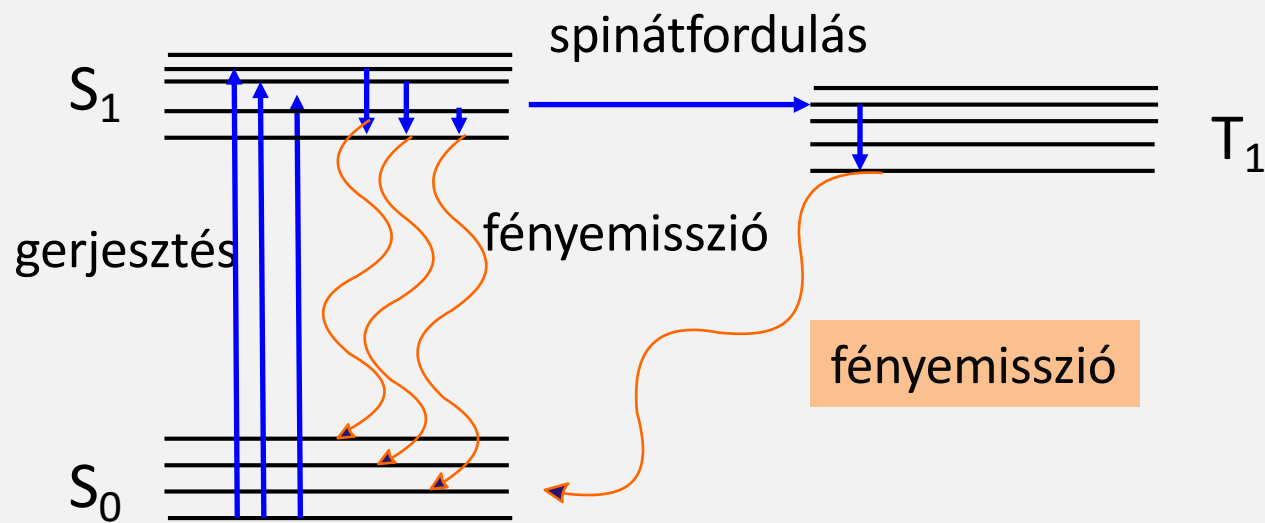
$$\lambda_{\text{gerjesztés}} \leq \lambda_{\text{fluoreszcencia}}$$

## Stokes-eltolódás

$$E = h \cdot c / \lambda$$

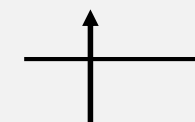


# Foszforeszcencia mechanizmusa



Foszforeszcencia

Fényemisszió spinváltozást követően

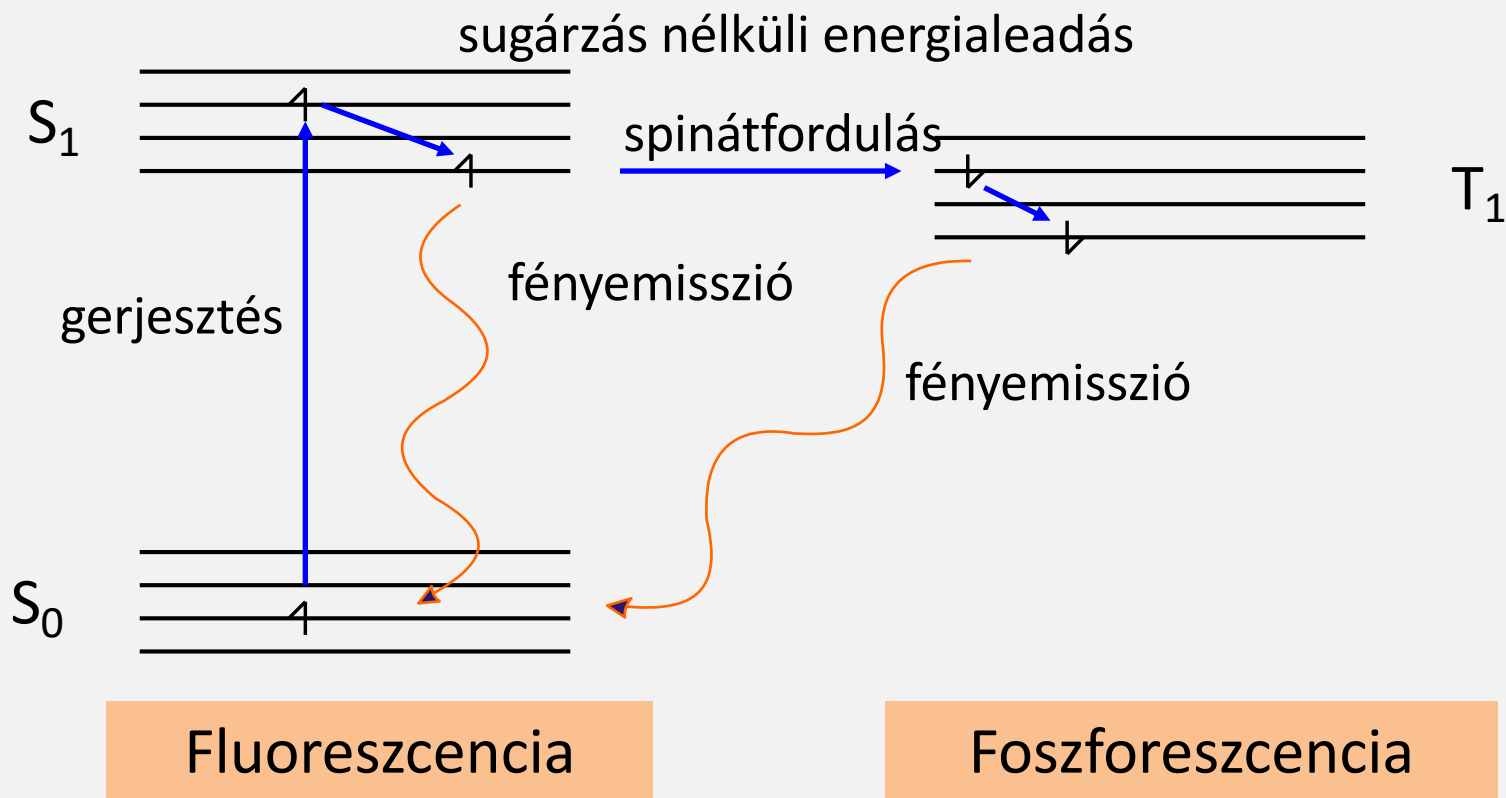


Triplett állapot

Párosítatlan spinű elektronok

**Metastabil állapot**

# Emittált foton energiájának jellemzése



**Stokes-  
eltolódás**

$$E_{\text{gerjesztés}} \geq E_{\text{fluoreszcencia}} > E_{\text{foszforeszcencia}}$$

$$\lambda_{\text{gerjesztés}} \leq \lambda_{\text{fluoreszcencia}} < \lambda_{\text{foszforeszcencia}}$$

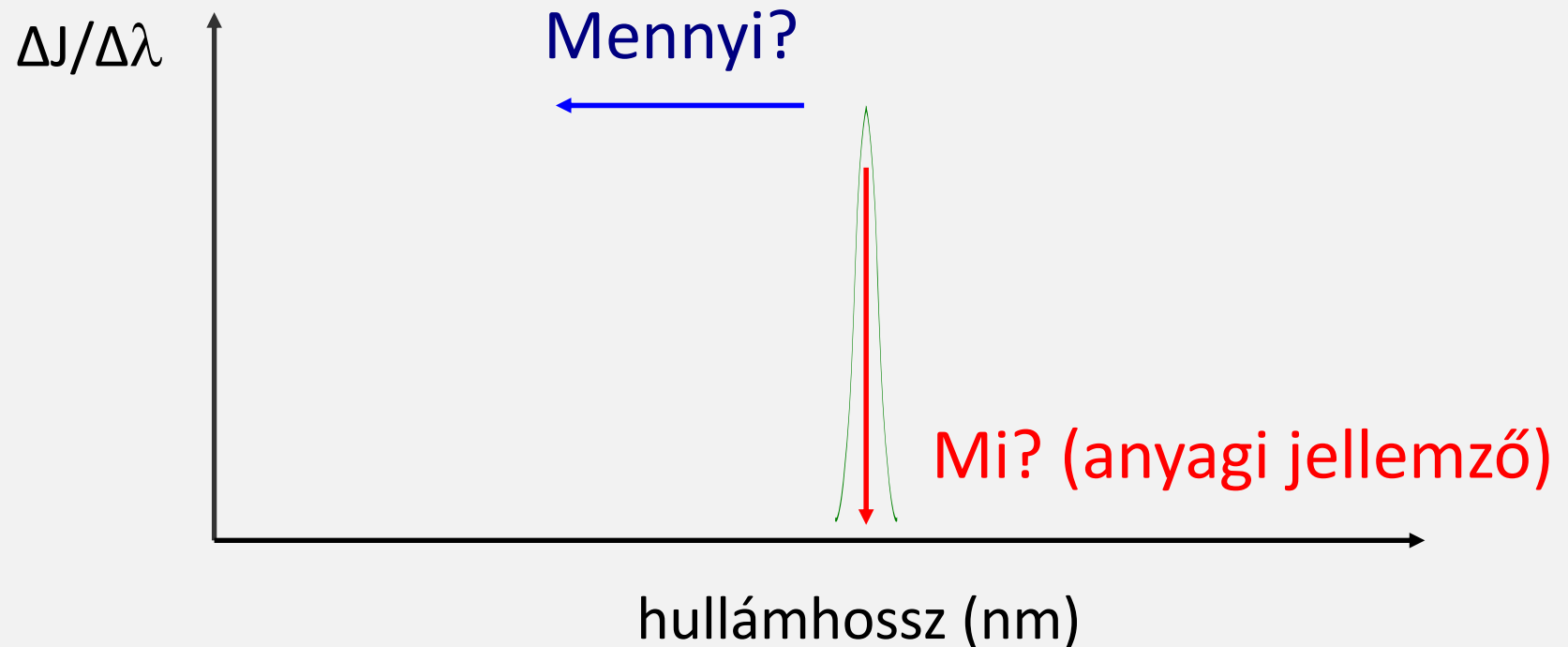
# Emisszió jellemzése

Kibocsájtott intenzitás hullámhossz szerinti eloszlása

Emissziós spektrum

Atomok esetében:

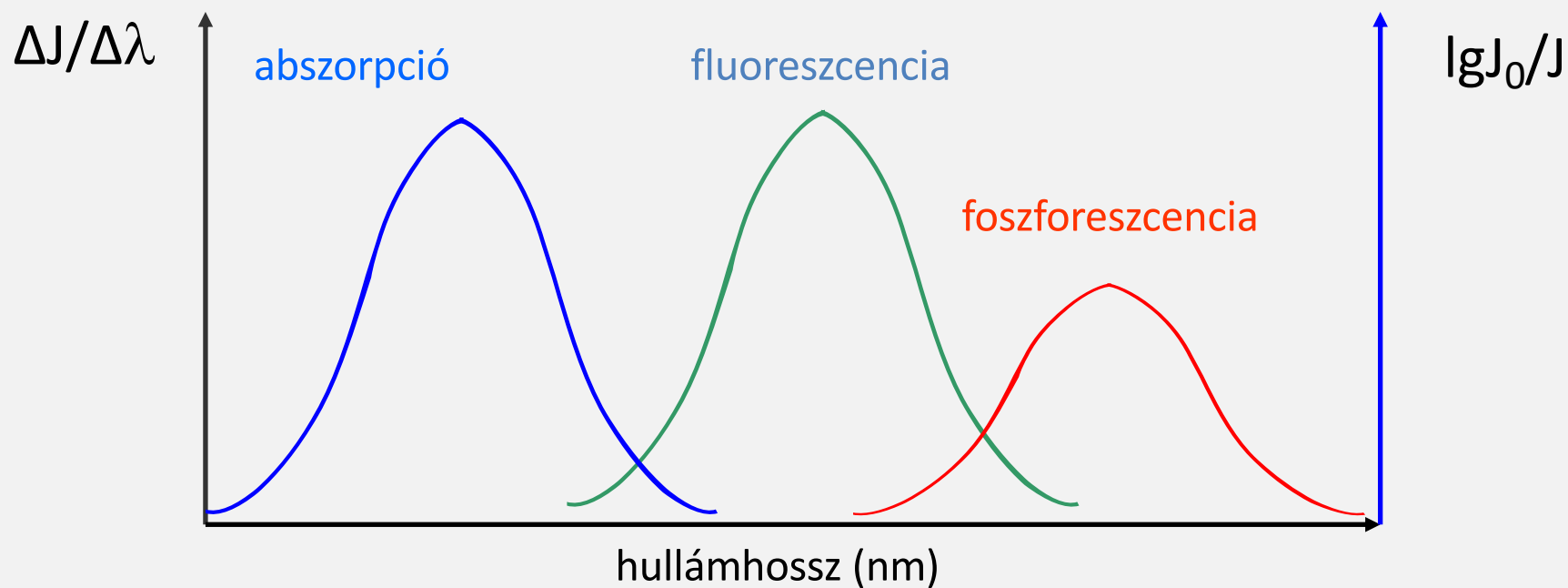
vonalas spektrum



# Emittált intenzitás hullámhossz szerinti eloszlása

## Emissziós spektrum

Molekulák esetében: sávos spektrum



$$\lambda_{\text{gerjesztés}} \leq \lambda_{\text{fluoreszcencia}} < \lambda_{\text{foszforeszcencia}}$$

**Stokes-eltolódás**

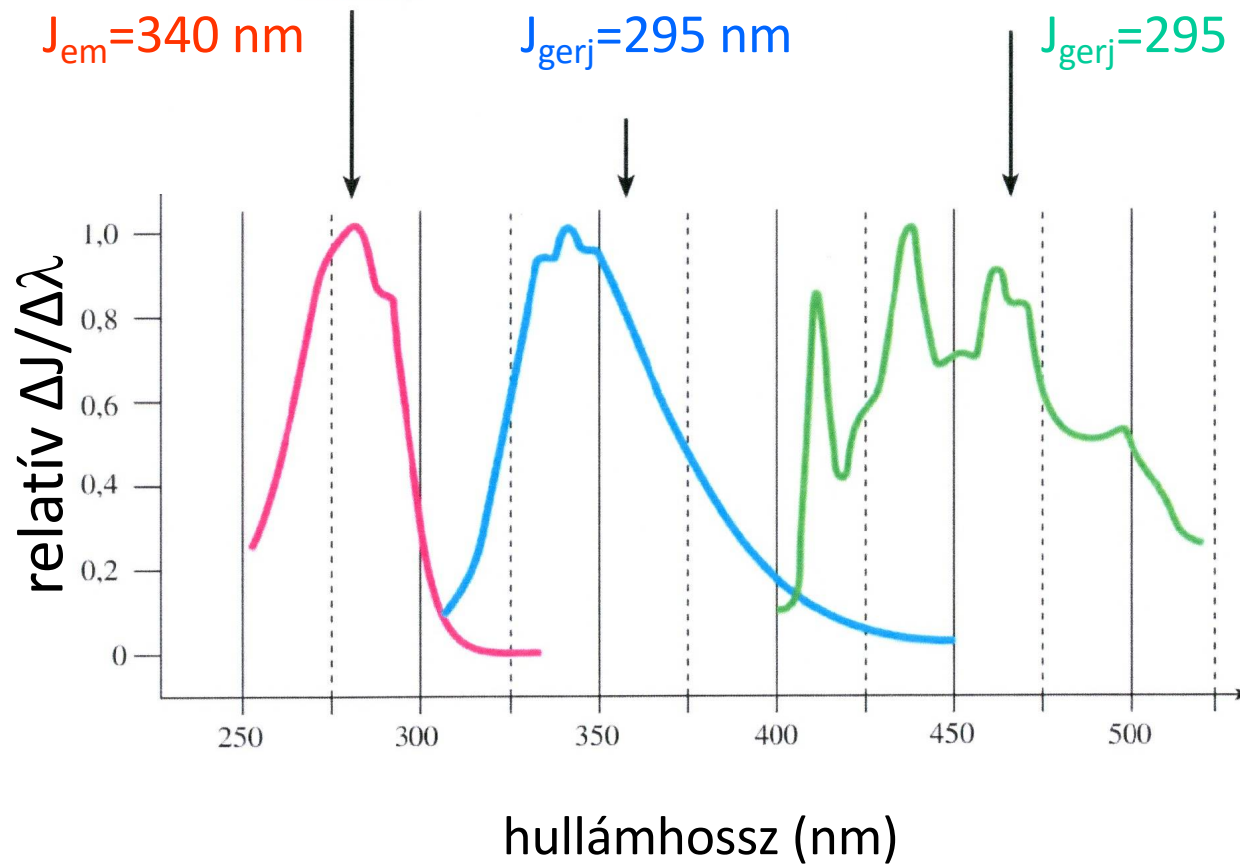


# Pl.: a triptofán aminosav spektrumai

Fluoreszcencia  
gerjesztési spektrum

Fluoreszcencia  
emissziós spektrum

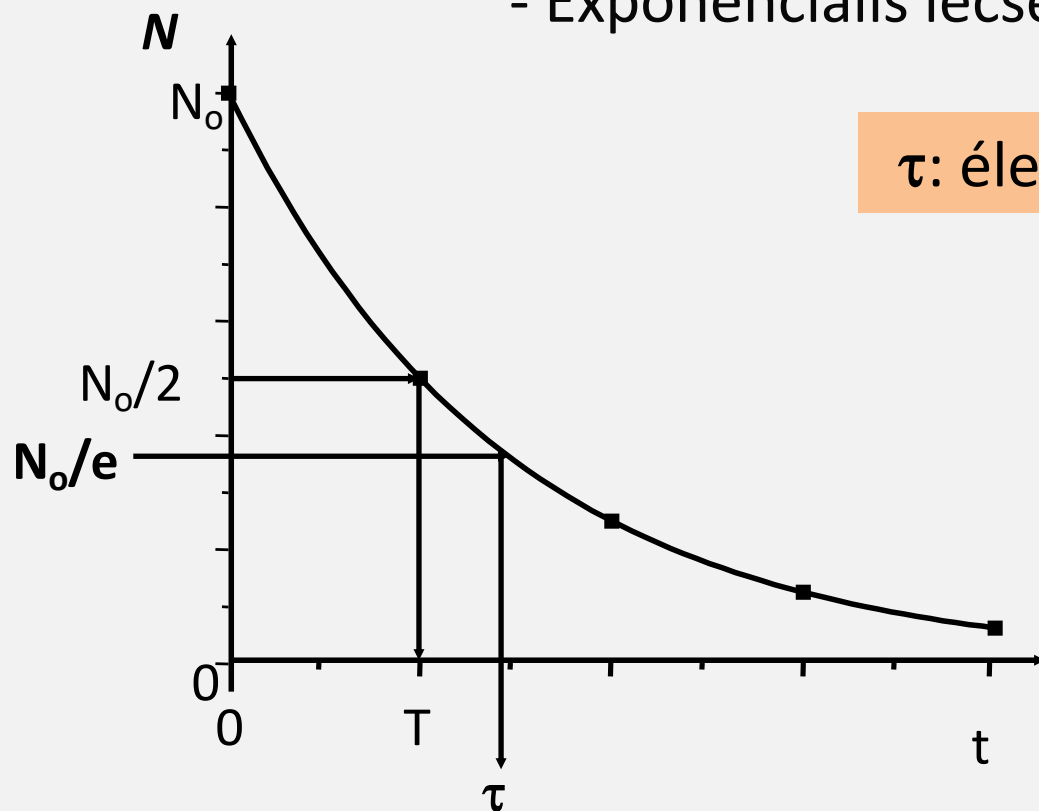
Foszforeszcencia  
emissziós spektrum



Gerjesztett elektronok  
száma

$$\longrightarrow N = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

- Exponenciális lecsengés



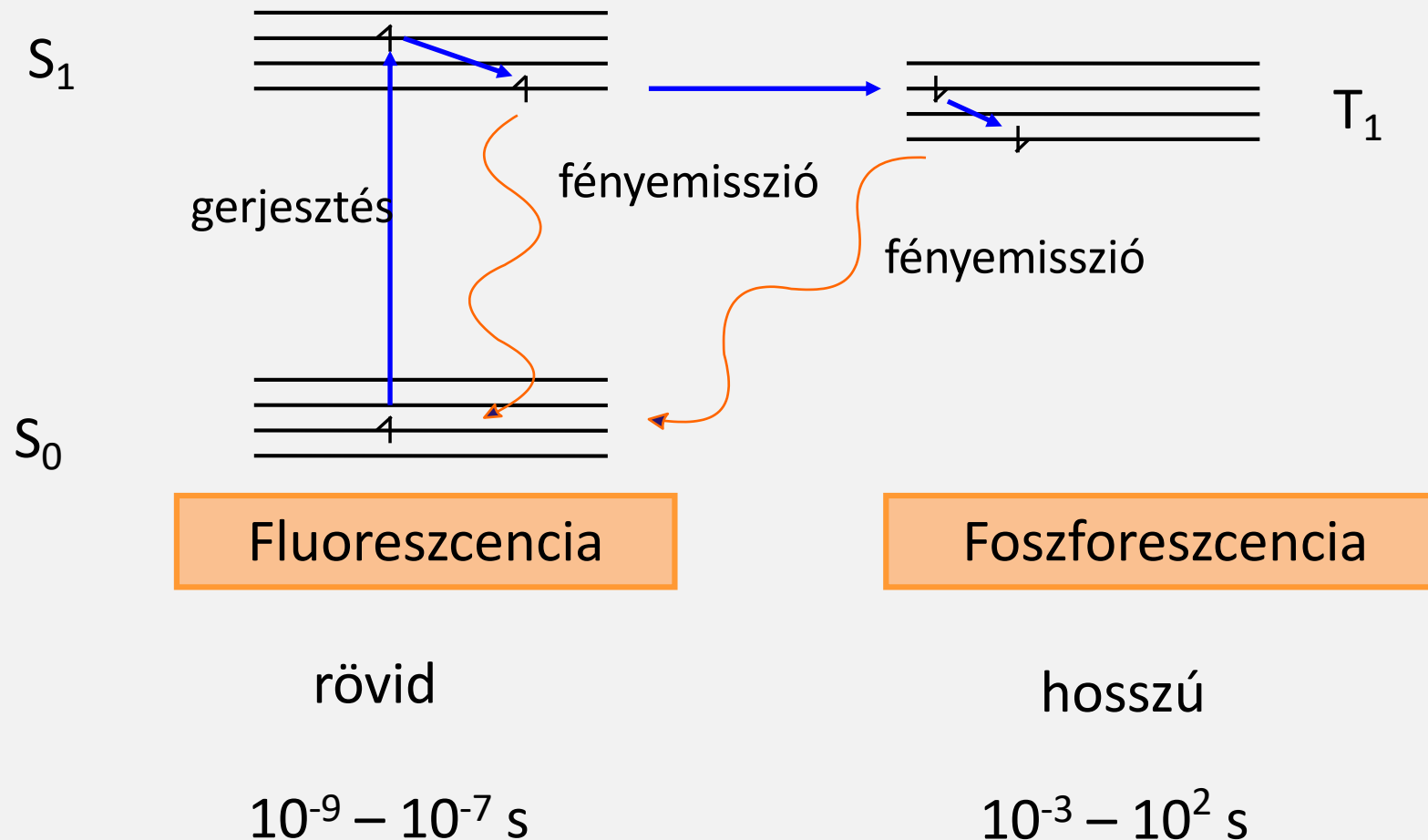
$\tau$ : élettartam     $T$ : fél-életidő

$\tau$ : az az idő, ami alatt a gerjesztett elektronok száma a gerjesztés megszűnése után  $e$ -ed részére csökken

# Gerjesztett állapot élettartamának jellemzése

Élettartam

az az idő, ami alatt a gerjesztett elektronok száma a gerjesztés megszűnése után  $e$ -ed részére csökken



# Minden gerjesztést fényemisszió követ?

- Környezetükkel kölcsönhatásban levő molekulák (oldatban, sejtekben, szövetekben) elektronjai ritkán adják le *fotonemisszióval* a gerjesztéskor felvett energiájukat.
- Sokkal valószínűbb, hogy az energialeadás sugárzás nélkül, vagyis hő keltésével vagy kémiai reakciók útján történik.

Fluoreszcencia kvantumhatásfoka ( $Q_F$ )

$Q_F$  = kisugárzott fotonok száma / elnyelt fotonok száma

$$Q_F \leq 1$$

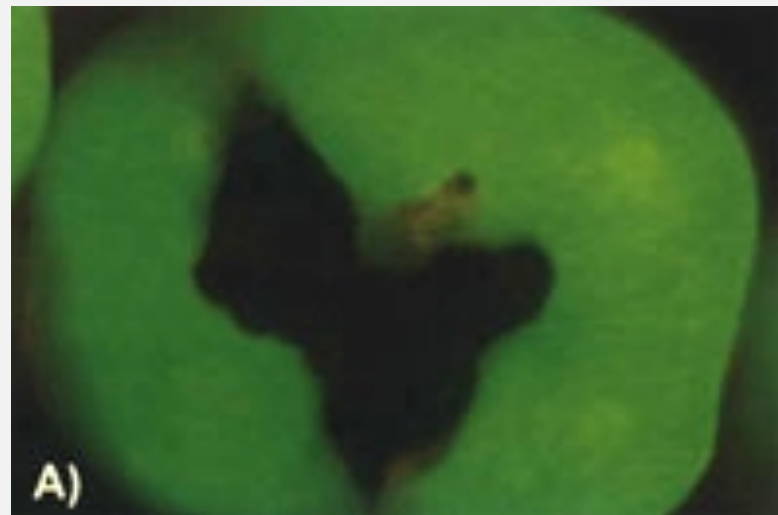
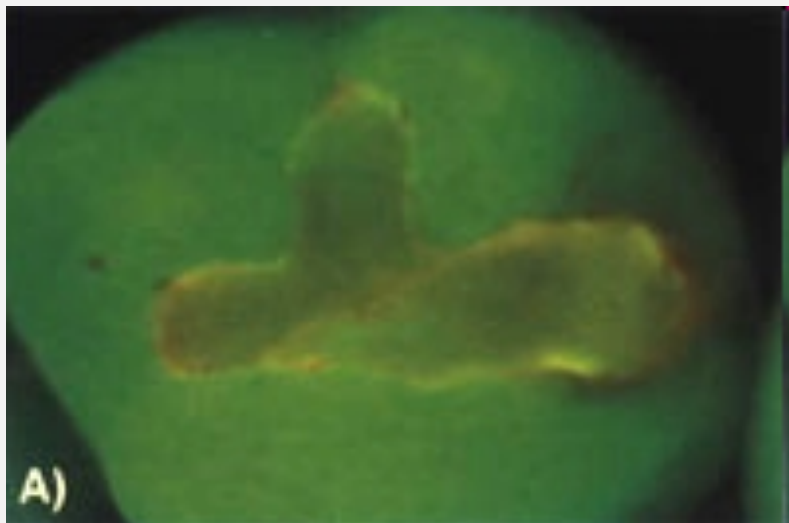
# A lumineszcencia alkalmazási területei

- fényforrások (világítás, sterilizálás, szolárium, terápiás alkalmazások, stb.)
- koncentráció meghatározása (pl. lángfotométer)
- lumineszcencia spektroszkópia
- lumineszcencia (fluoreszcencia) mikroszkópia
- diagnosztika
- dózismérés
- régészeti kormeghatározás
- belső építészet
- biztonságtechnika ...

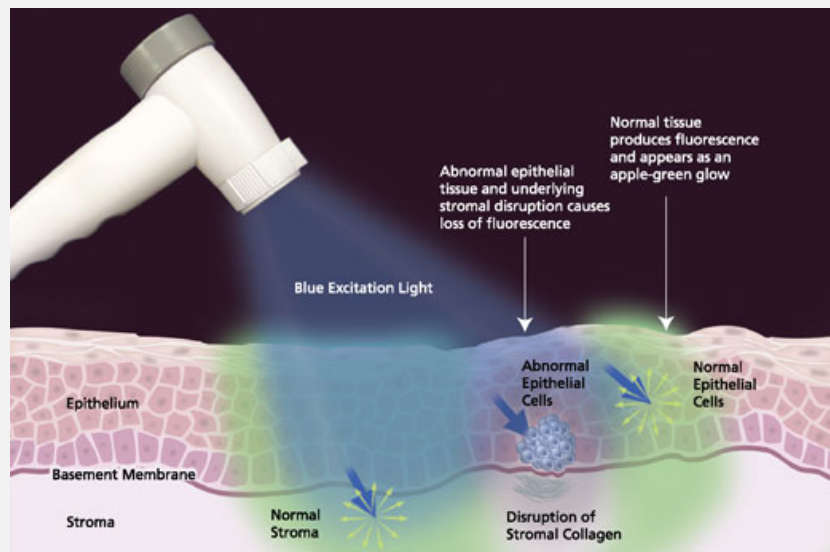


# Példák a fogorvosi alkalmazásra

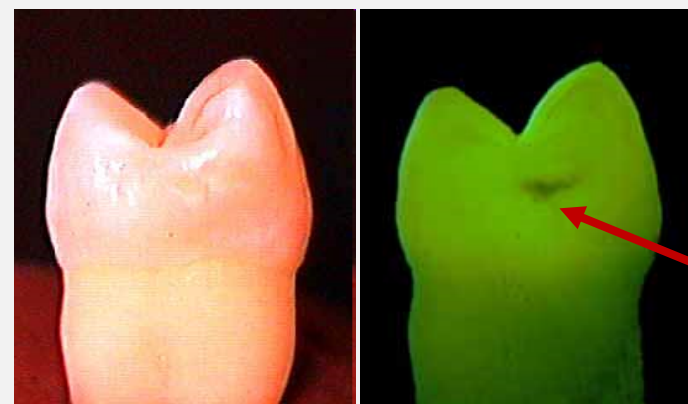
Piros fluoreszcencia a tömés peremén jelzi a tökéletlen illeszkedést és a megtelepedő baktériumokat



Amalgám tömés elégtelen illeszkedése



Egészséges és malignus szövetek eltérő fluoreszcens tulajdonságai

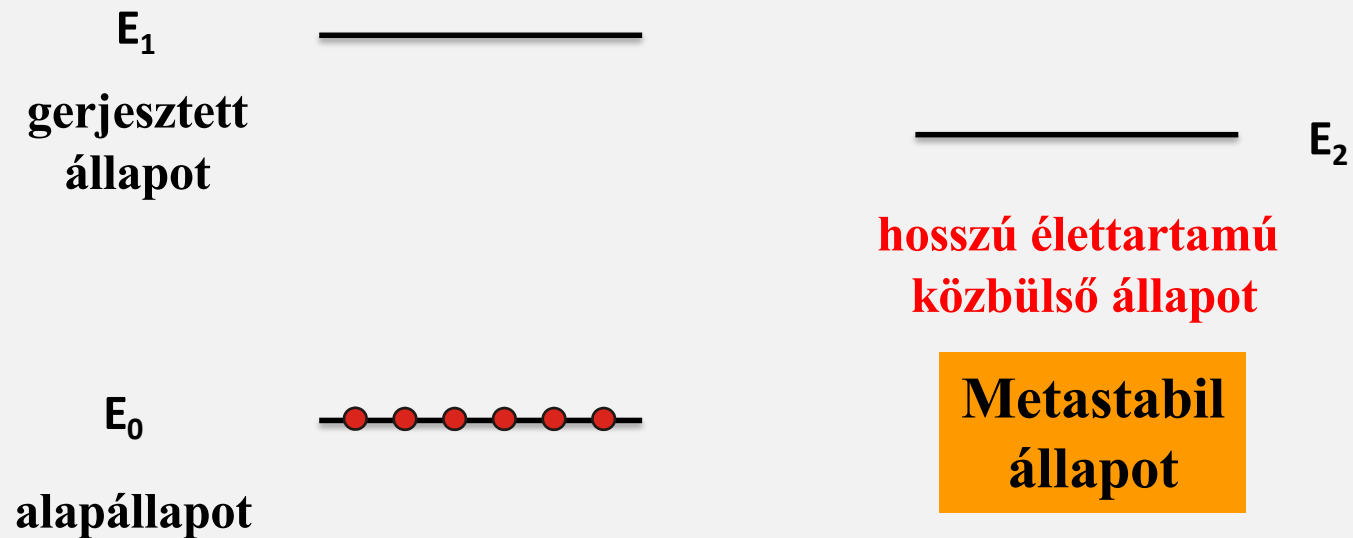


Fog felszíne natív állapotban és fluoreszcens festés után

*Kezdődő caries*

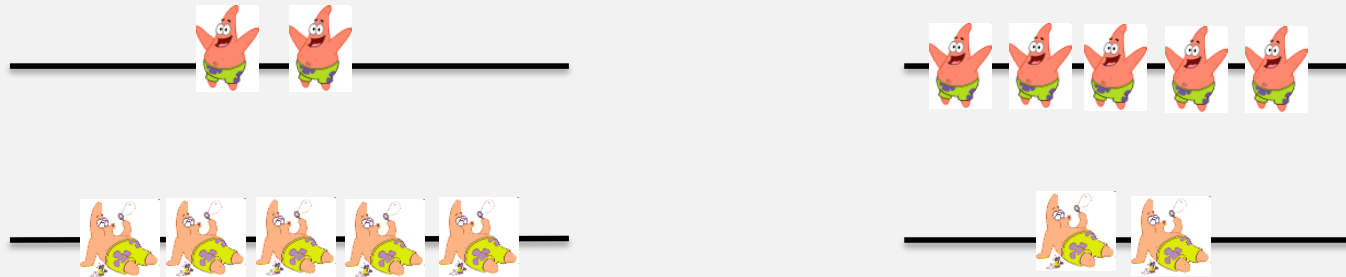
# A lézerfény előállításának feltételei és lépései

Speciális elektron energia állapotok:  
legalább három energianívós rendszer



Lézeranyag: szennyezett kristály, két vagy több gáz keveréke, festékmolekulák oldata

# Elektronállapotok betöltöttsége: Populáció inverzió



## *Termikus egyensúly*

Boltzmann eloszlás szerint:

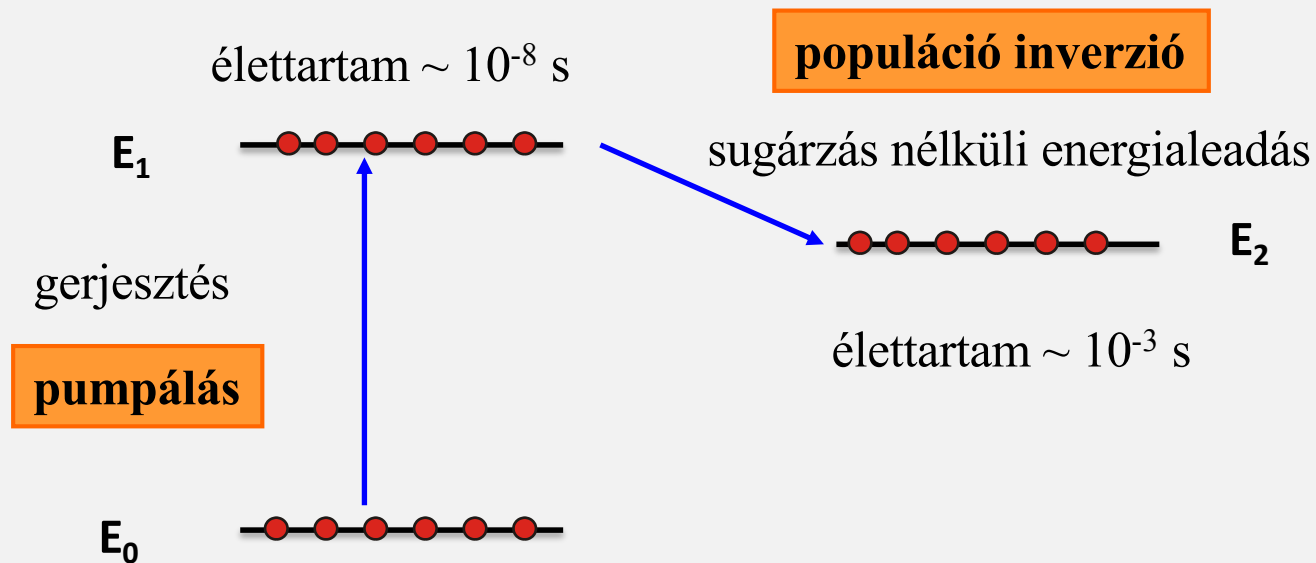
$$n = n_0 e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}$$

## *Populáció inverzió*

“fordított” betöltöttség



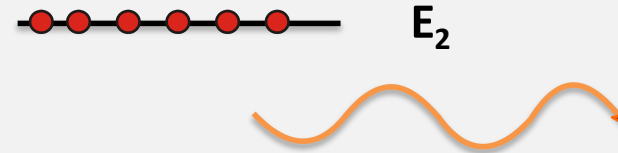
# Gerjesztés: Optikai pumpálás



Pumpálás = külső forrásból történő energia bevitel (elektromos, optikai, kémiai energia)

## Spontán emisszió

$E_1$  \_\_\_\_\_

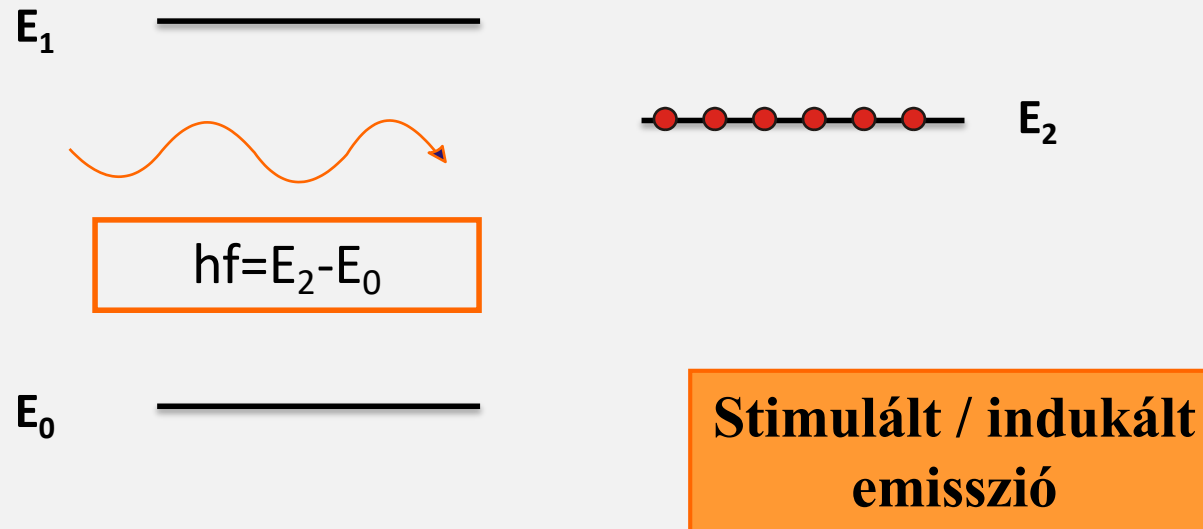


$E_0$  \_\_\_\_\_ ●

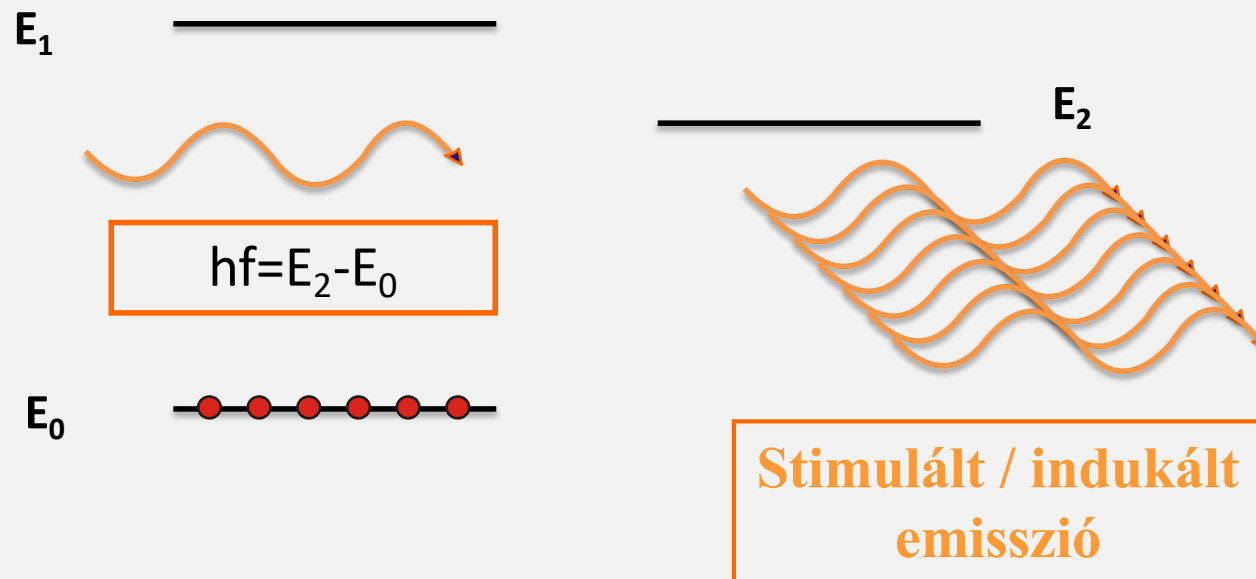
spontán  
fényemisszió

*kis valószínűséggel*

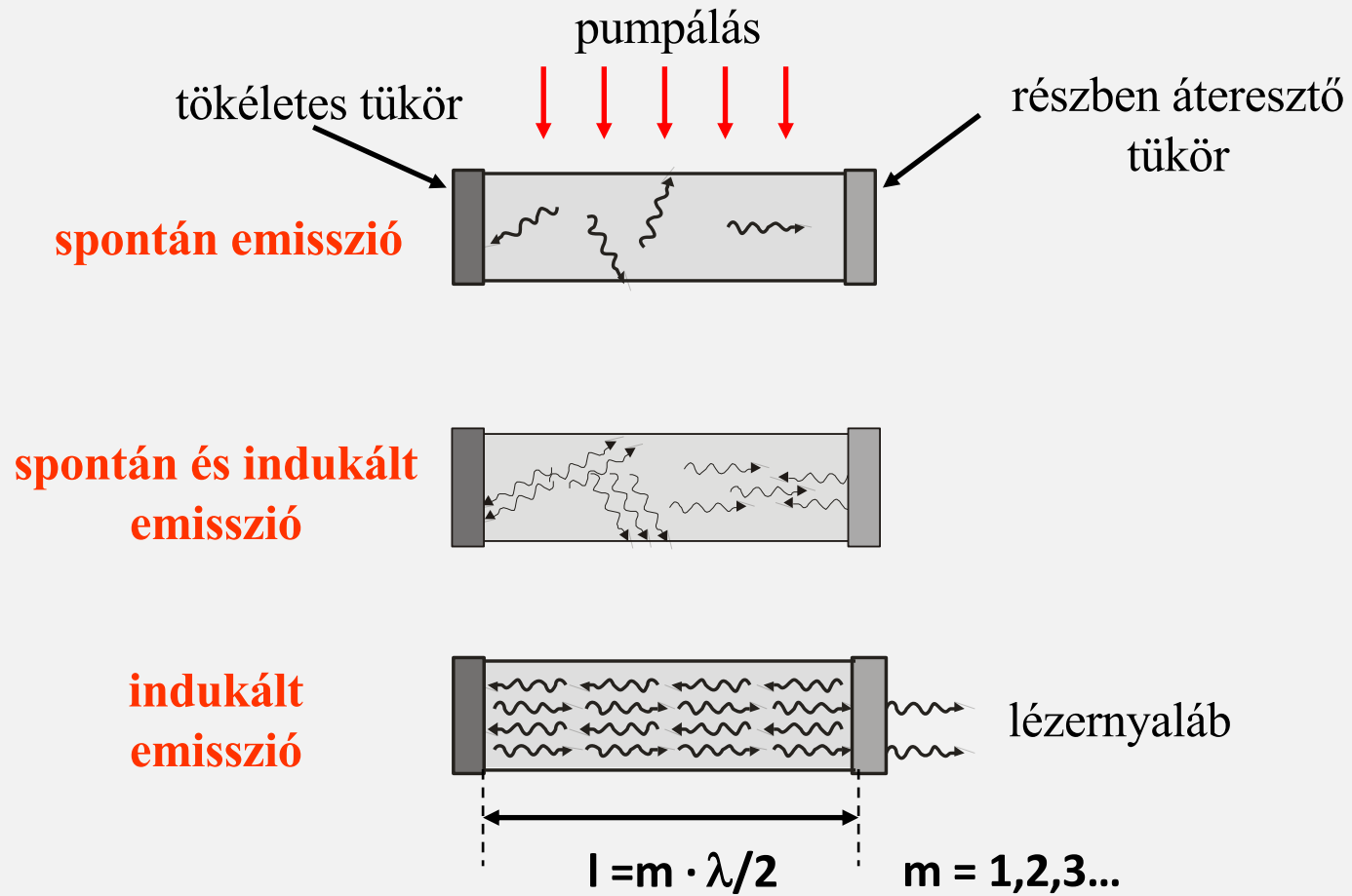
A metastabil nívón lévő elektronok relaxációjának  
stimulálása



# A metastabil nívón lévő elektronok relaxációjának stimulálása



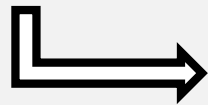
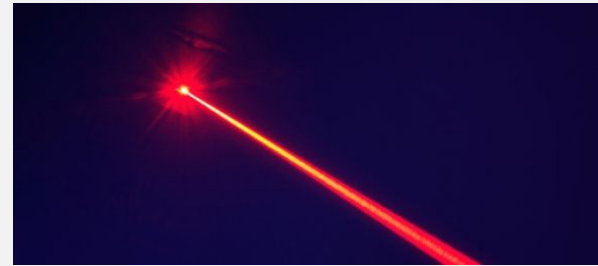
# Lézercső – optikai rezonátor



# Lézerfény általános tulajdonságai

Az indukált emisszió révén keletkezett fotonoknak **azonos** az:

- energiája
- fázisa
- rezgési síkja
- terjedési iránya.

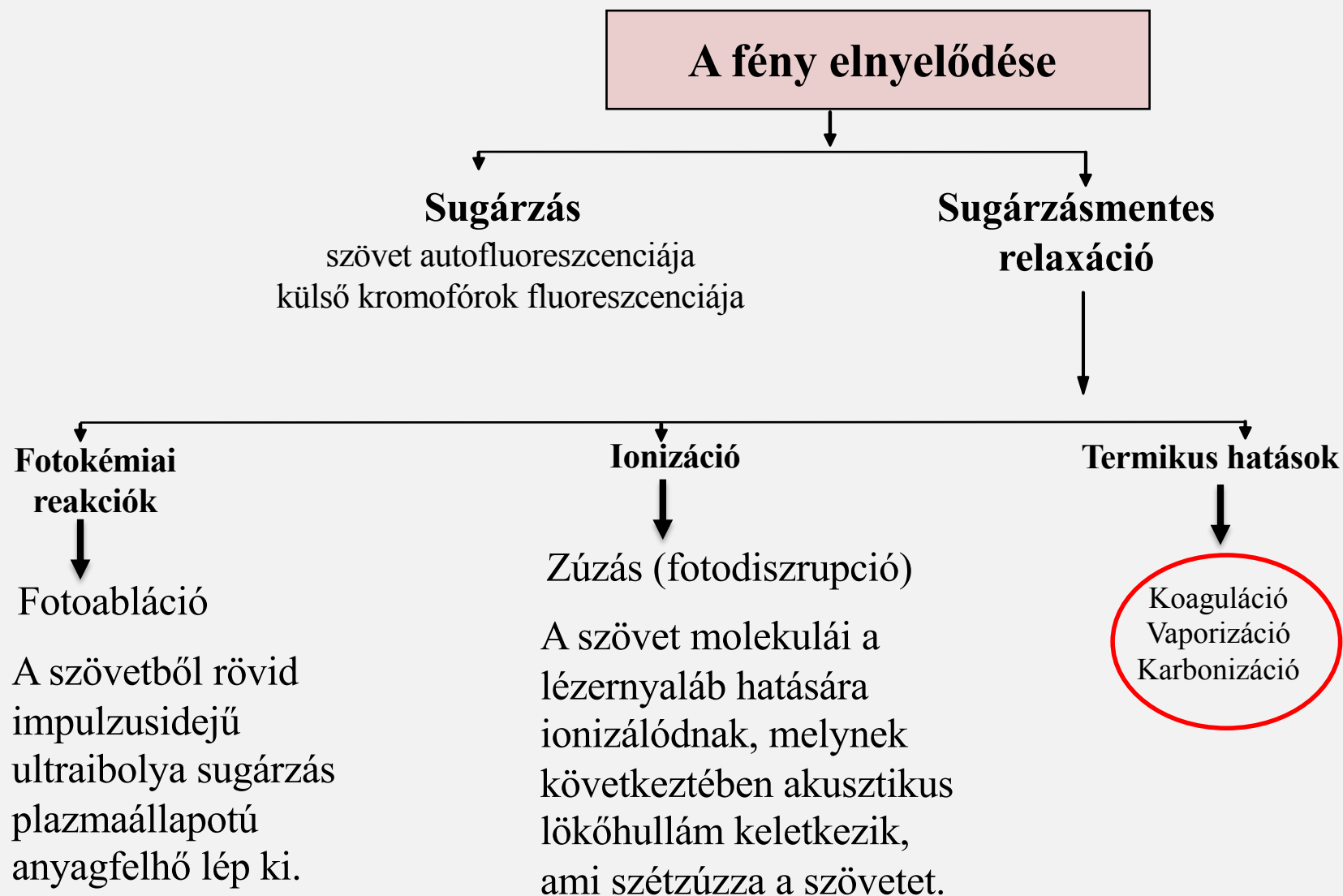


**Ezért az indukált emisszióval keletkezett fény:**



- Monokromatikus
- koherens
- poláros
- jól fókuszálható

# Lézerek orvosi alkalmazási lehetőségei



# Termikus hatások



Ortopédiai alkalmazás



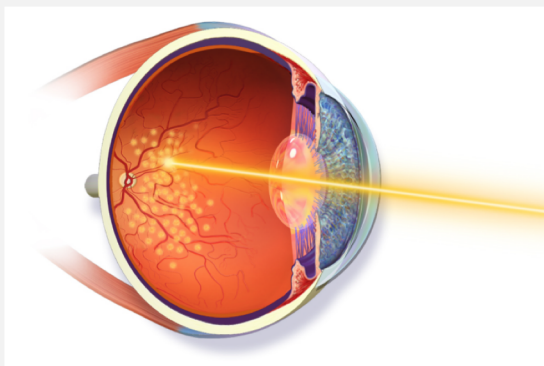
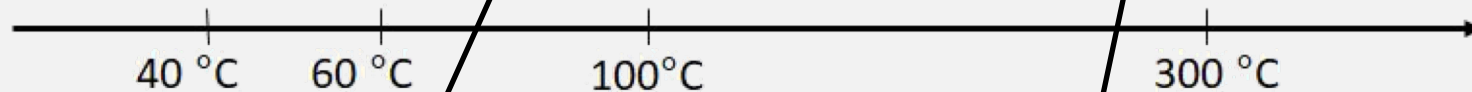
Szájüregi herpesz

lézertermia,  
biostimuláció

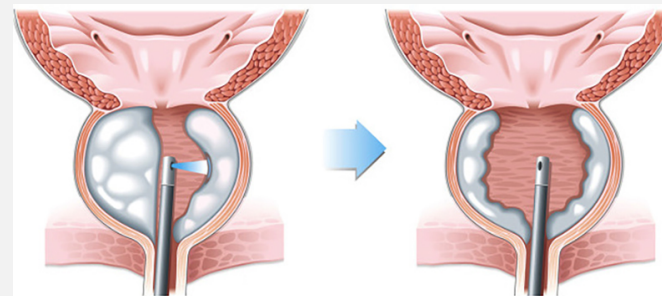
koaguláció

karbonizáció

vaporizáció



Retina kezelése



Prosztata  
magnagyobbodás  
lézeres kezelése



# Lézerek orvosi alkalmazási lehetőségei – FOGÁSZAT

## Softlézer terápia (SLT)

- Biostimuláció
- Alacsony teljesítmény: 100-150 mW
- Két hullámhossz tartomány:  
650-660 nm – 3 cm hatásmélység,  
780-980 nm – 8-10 cm mélység
- Gyorsabb sebgyógyulás
- Antimikrobiális hatás
- csontpótlás, az implantátumok beültetését követő folyamatok
- állkapocs-ízületi kórképek



# Caries lézeres eltávolítása

- Vaporizáció és mechanikai hullám
- ErYAG
- 2940 nm
- apatitkristályok kitörése a környező víz elpárolgásával, de elszenesedés nélkül játszódik le



# Lézeres fogfehérítés

- Argon lézer
- 488 nm



<https://www.youtube.com/watch?v=NW6XI5JvGsE>