

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

2025. 09. 16.

Fény és anyag kölcsönhatásai

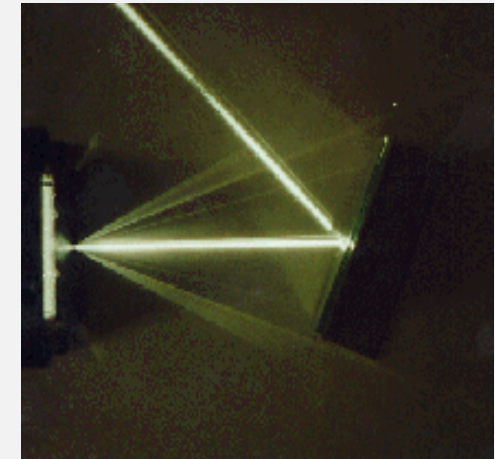
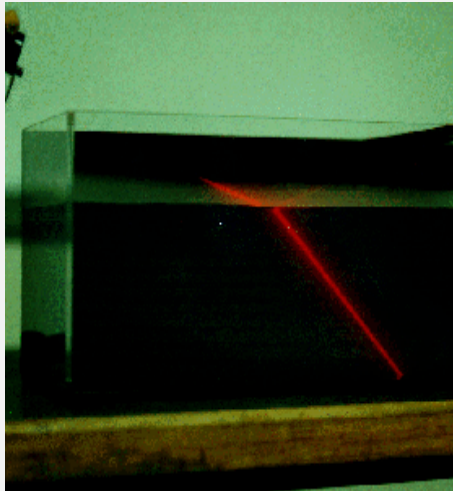
beeső fénysugár

visszaverődés

fénnytörés

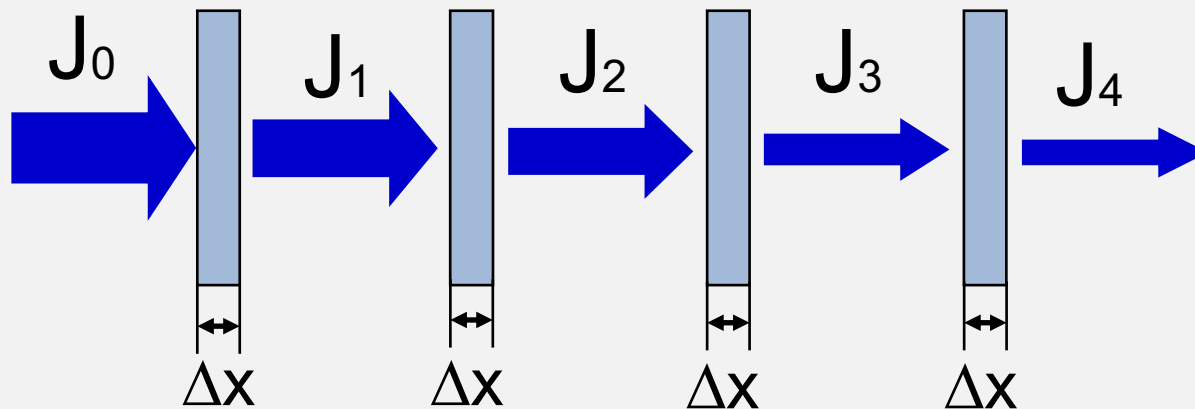
szóródás

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

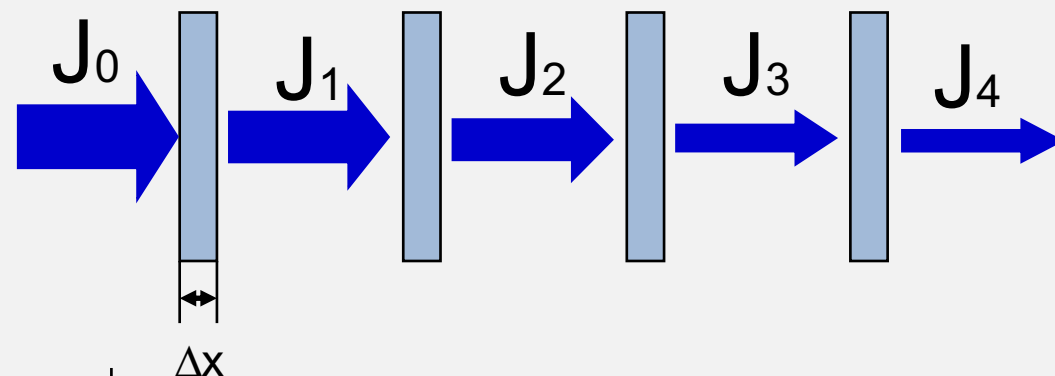
J_i : az i -edik közegbe belépő sugárzás intenzitása [W/m^2]

ΔJ : az intenzitás megváltozása Δx rétegen való áthaladáskor

μ : gyengítési állandó [$1/\text{m}$]

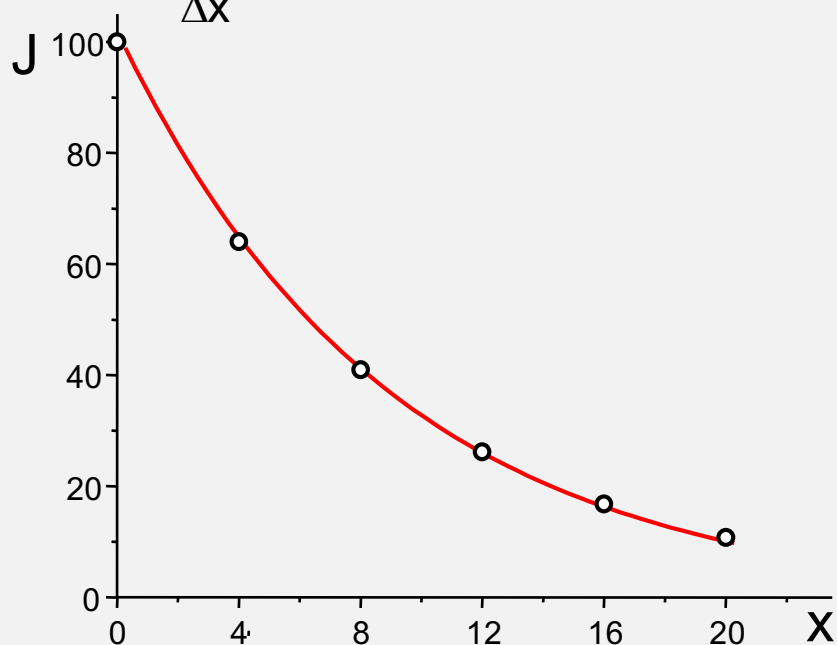
**A közegen áthaladó sugárzás intenzitásának megváltozása
arányos a közegbe belépő intenzitással**

Az intenzitás gyengülésének törvénye



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

az egyenlet
megoldása



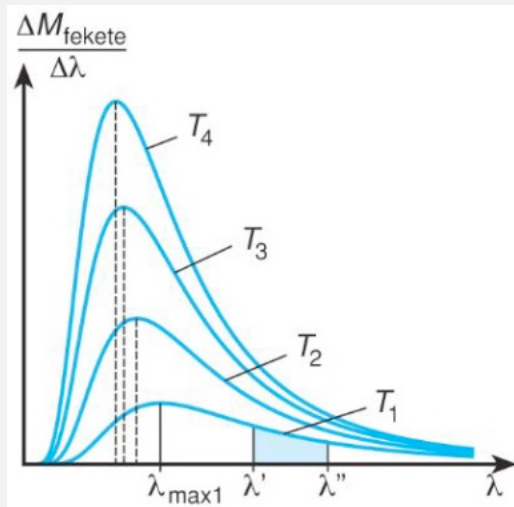
$$J = J_0 e^{-\mu x}$$

Integrális alak

e = Euler szám = 2,71828...

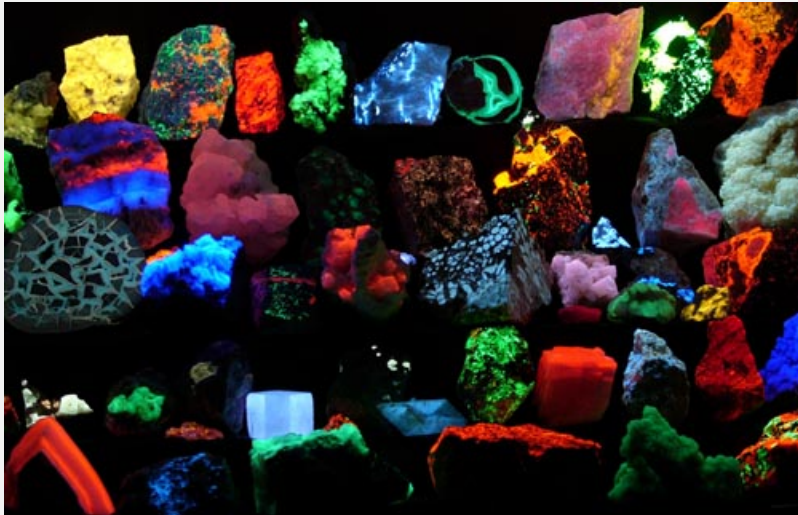
A fényemisszió formái

- Hőmérsékleti (feketetest) sugárzás
- Lumineszcencia
- Lézer



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

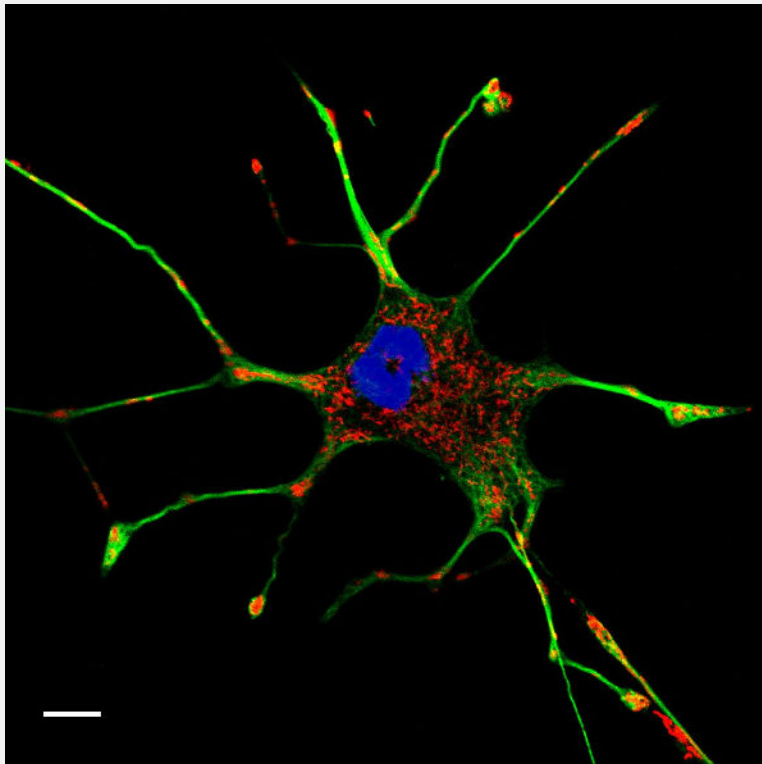
Lumineszcencia a természetben



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



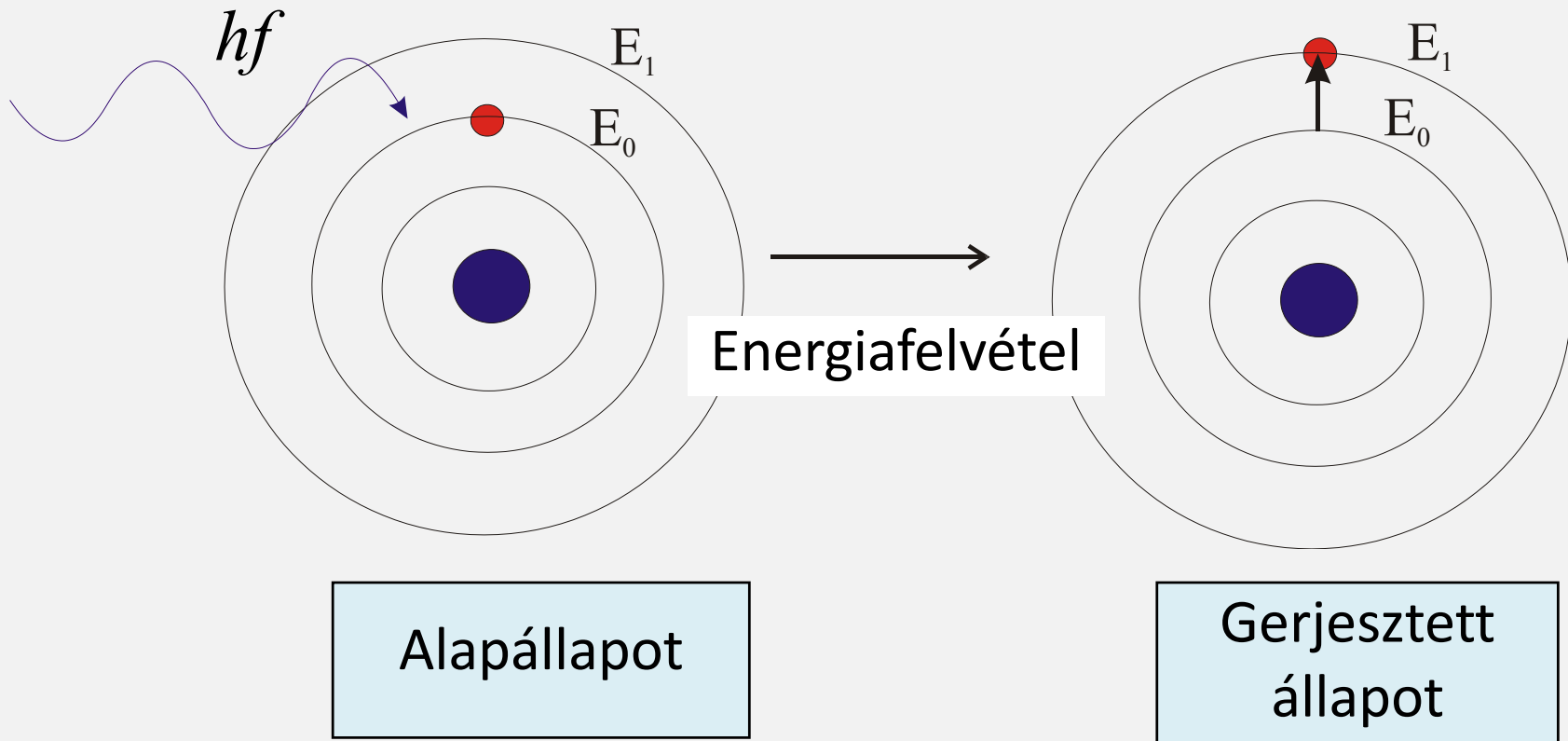
Lumineszcencia alkalmazásai



Tekintsünk egy atomot

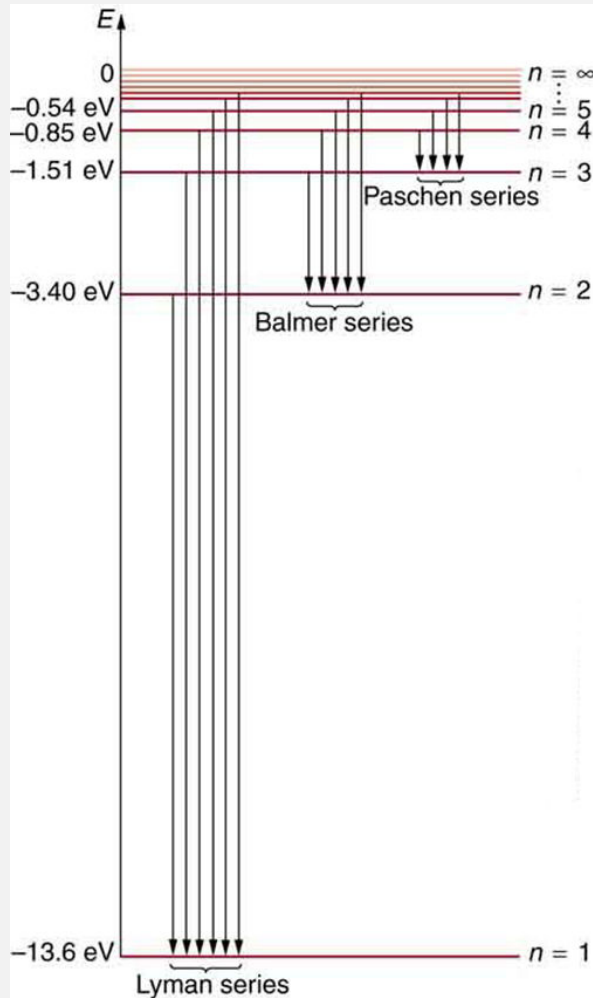
Gerjesztési
energia

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



Atomi energiaszintek

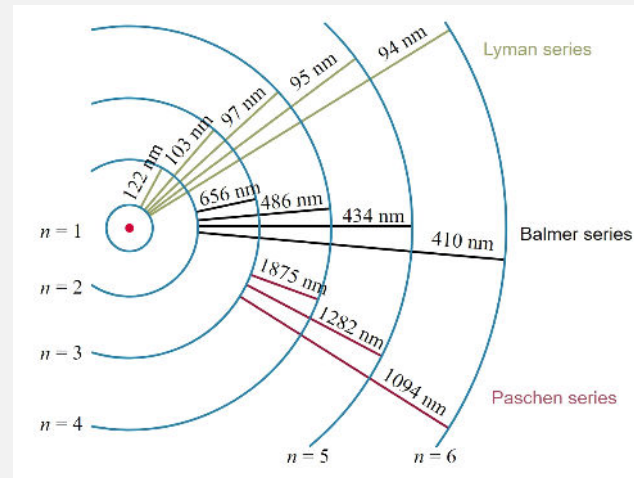
Jablonski-diagram



A hidrogén elnyelési színeképe:

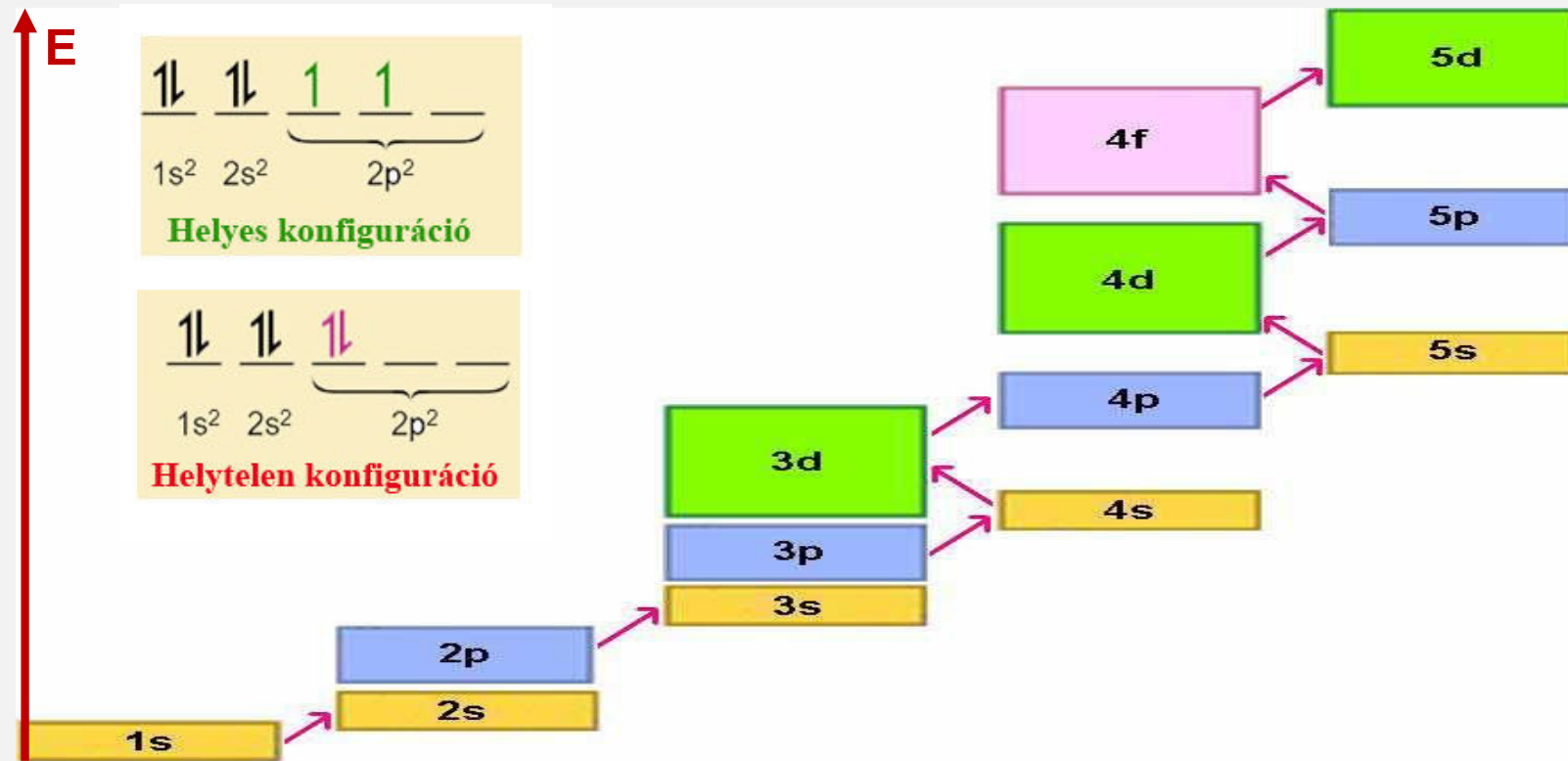


A hidrogén kibocsátási színeképe:



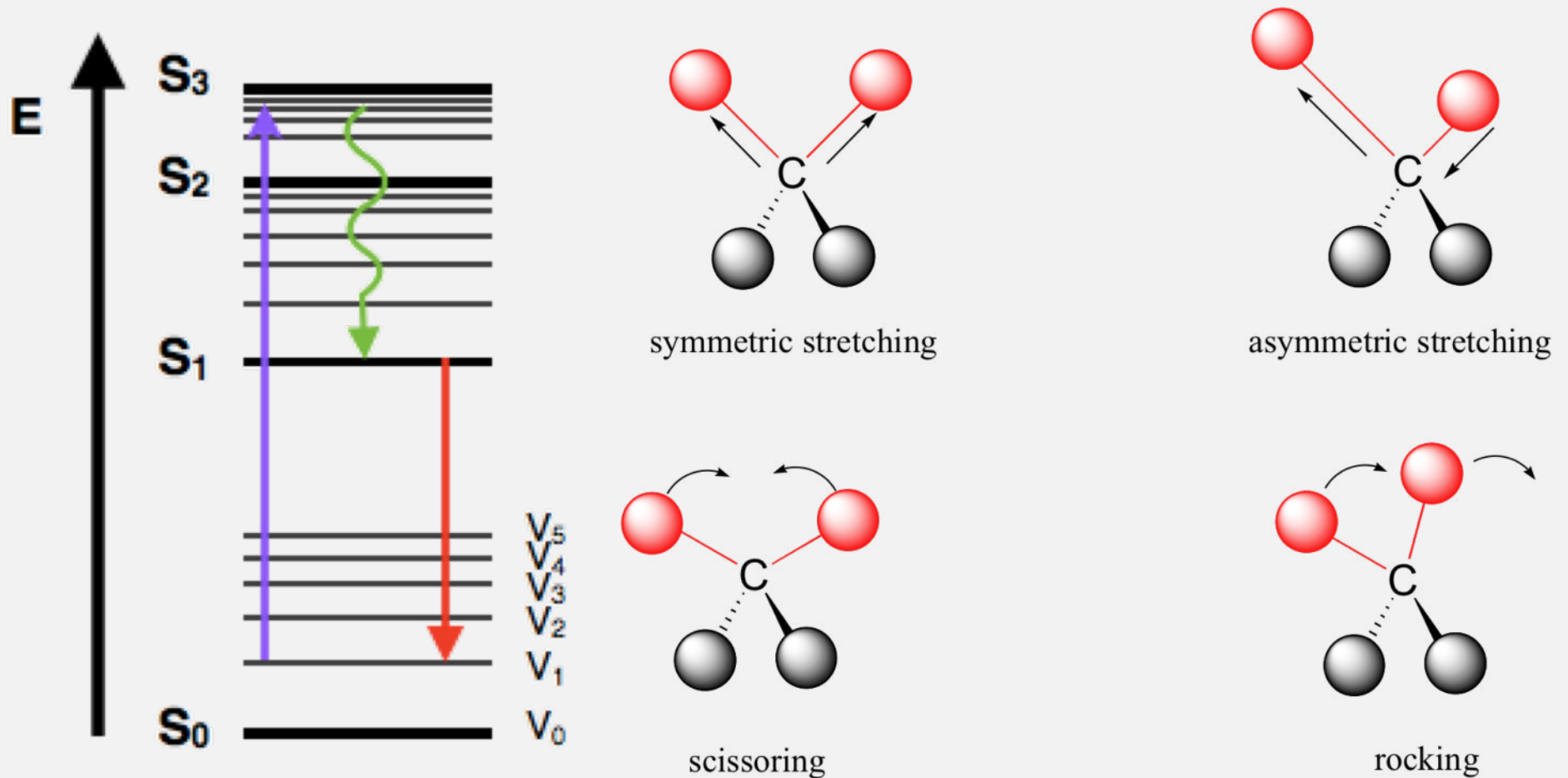
Niels Bohr (1913): Az atomban az elektronok stacionárius pályákon helyezkednek el, nem sugároznak. A stacionárius pályák közötti átmenetek során az elektron a pályák energiakülönbségét kell felvegye, illetve relaxáció során azt sugározza ki.

Atomi energiaszintek



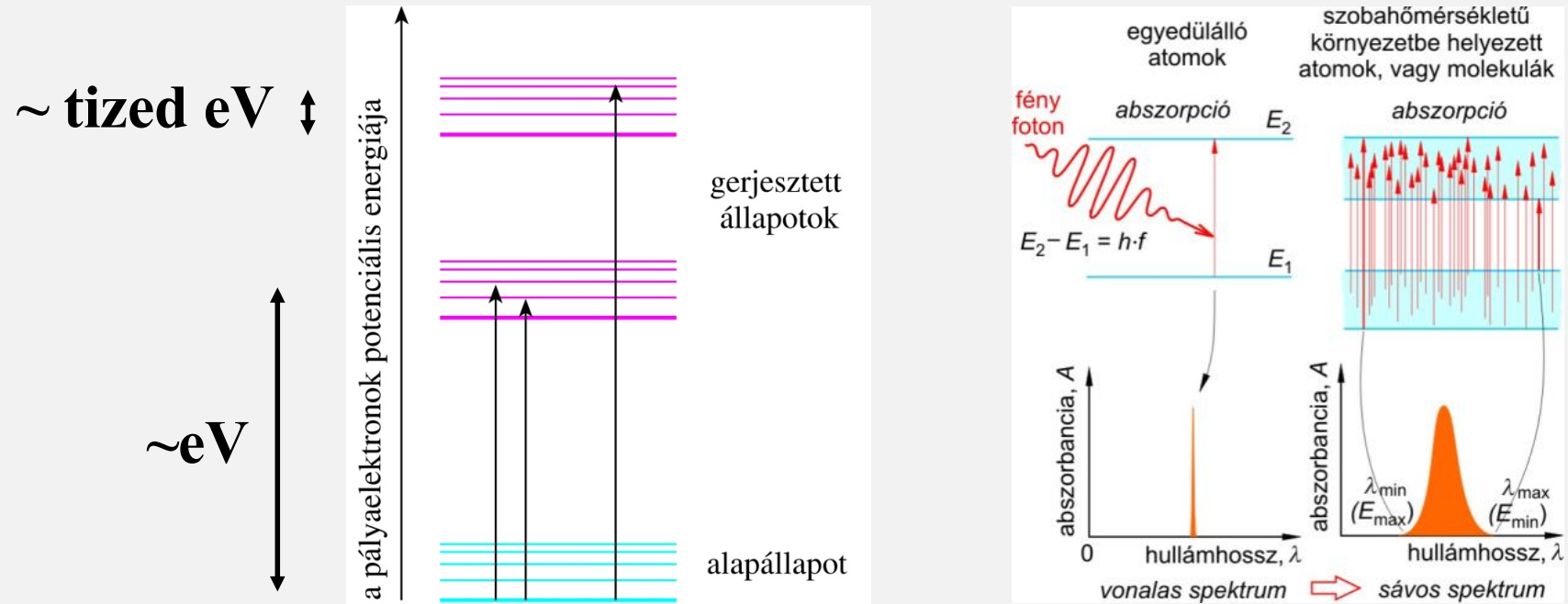
- Az atomban az elektronok energiaállapotai kvantáltak
 - A lehetséges legalacsonyabb energiájú állapotot töltik be
- Pauli-féle kizárási elv: egy atomon belül nem létezhet két olyan elektron, amelyeknek mind a négy kvantumszáma megegyezik
- Hund-szabály: adott elektron-konfiguráció mellett a legnagyobb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

Molekulák energiaszintjei



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

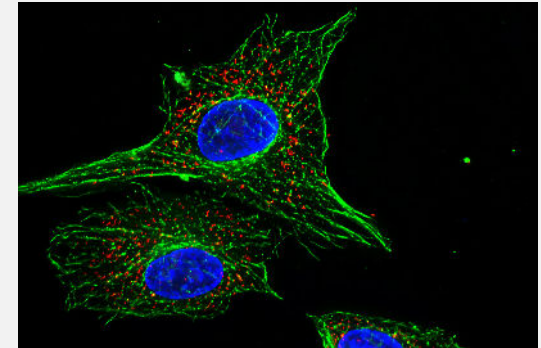
Molekula energiaállapotai rezgési szintekkel:



Adott molekula különböző, egymáshoz „közeli”
energiával rendelkező fotonokat is képes elnyelni
→ sávos elnyelési spektrum

Gerjesztés sokféleképpen lehetséges

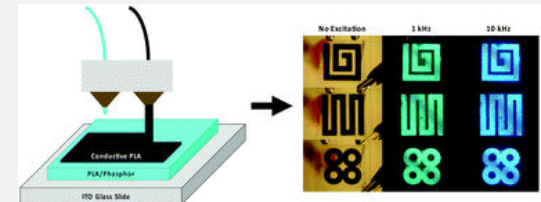
-(fény) foton elnyelése: *fotolumineszcencia*



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

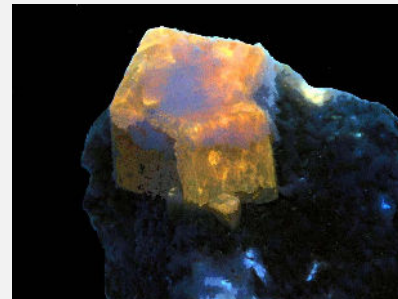


-elektromos tér vagy áram: *elektrolumineszcencia*



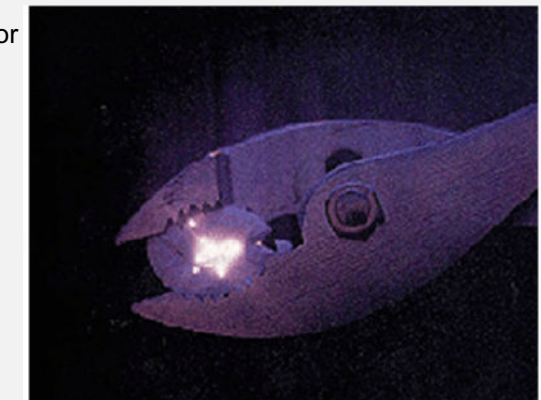
-mechanikai deformáció: *tribolumineszcencia*

mentacukor

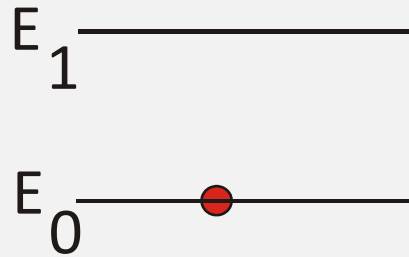


-hőközlés: *termolumineszcencia*

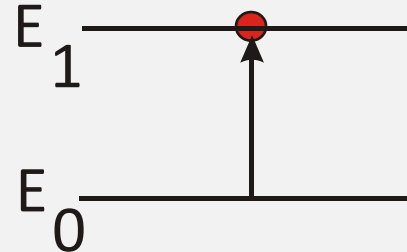
Wulfenit



Relaxáció mechanizmusa

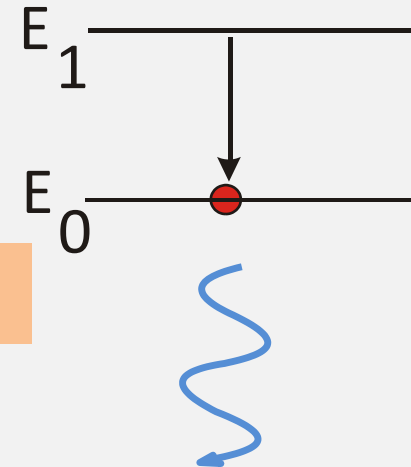


külső héjon lévő
elektron gerjesztése



elektron visszatérése
alapállapotba

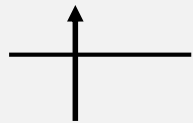
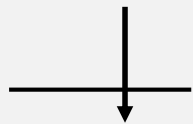
Spontán, külső hatás nélkül!



fényemisszió

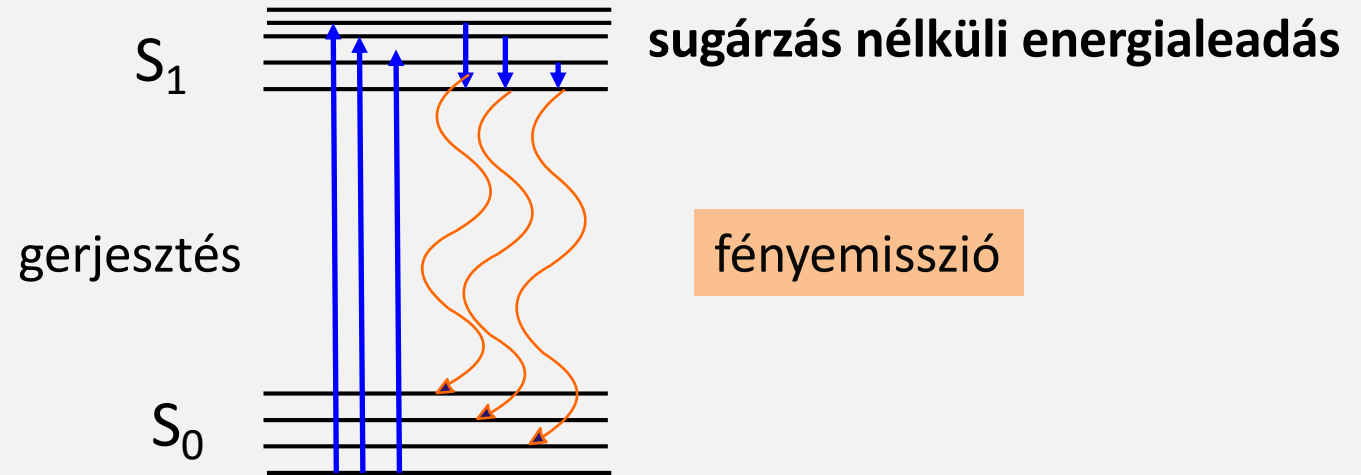
$$hf = E_1 - E_0$$

Fluoreszcencia mechanizmusa



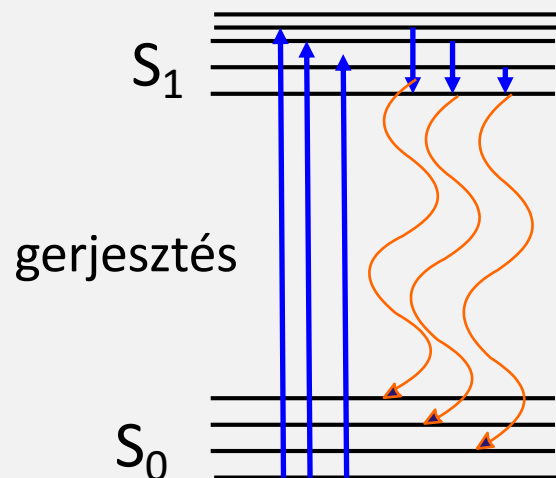
Szingulett állapot

Párosított spinű
elektronok



Fluoreszcencia

Fényemisszió spinváltás nélkül!



Kasha-szabály:

a fényemisszió a legalsó gerjesztett elektronállapot legalsó rezgési nívójáról történik



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

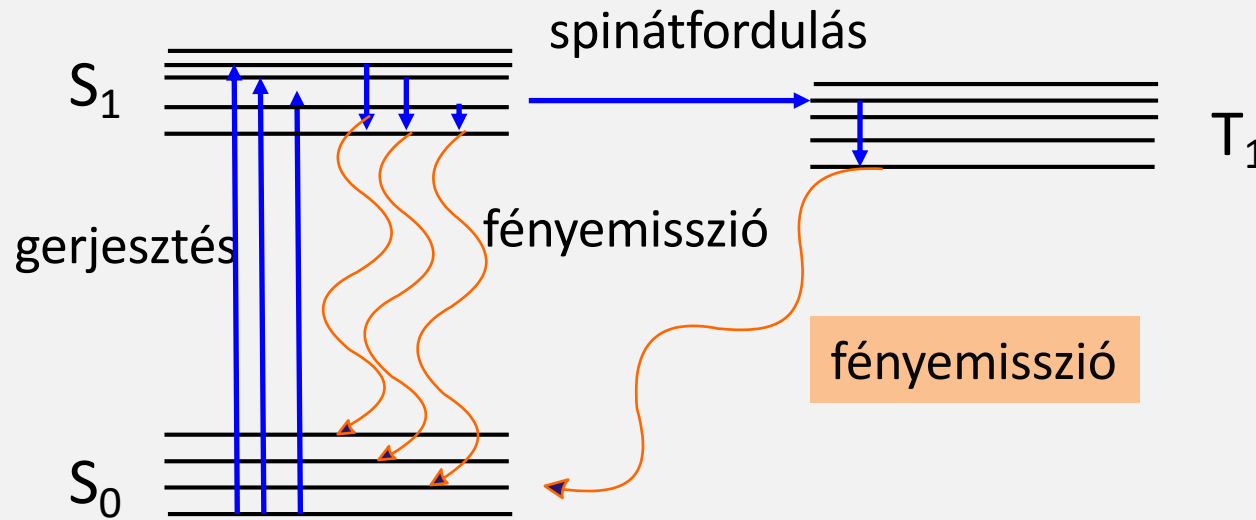
$$\lambda_{\text{gerjesztés}} \leq \lambda_{\text{fluoreszcencia}}$$

Stokes-eltolódás

$$E = h^*c/\lambda$$

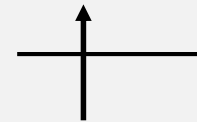
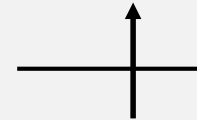


Foszforeszcencia mechanizmusa



Foszforeszcencia

Fényemisszió spinváltozást
követően

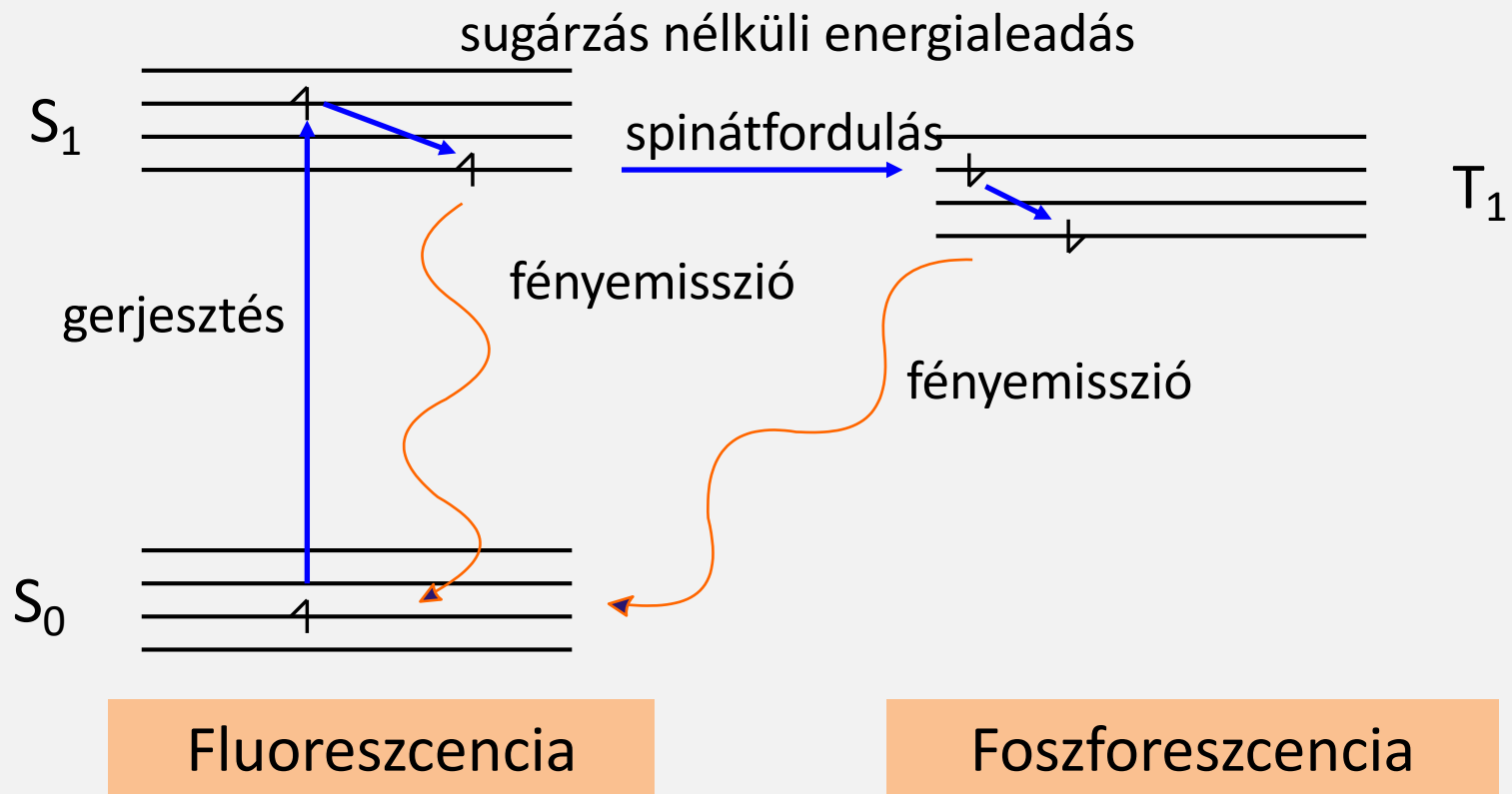


Triplett állapot

Párosítatlan
spinű elektronok

Metastabil állapot

Emittált foton energiájának jellemzése



**Stokes-
eltolódás**

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

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

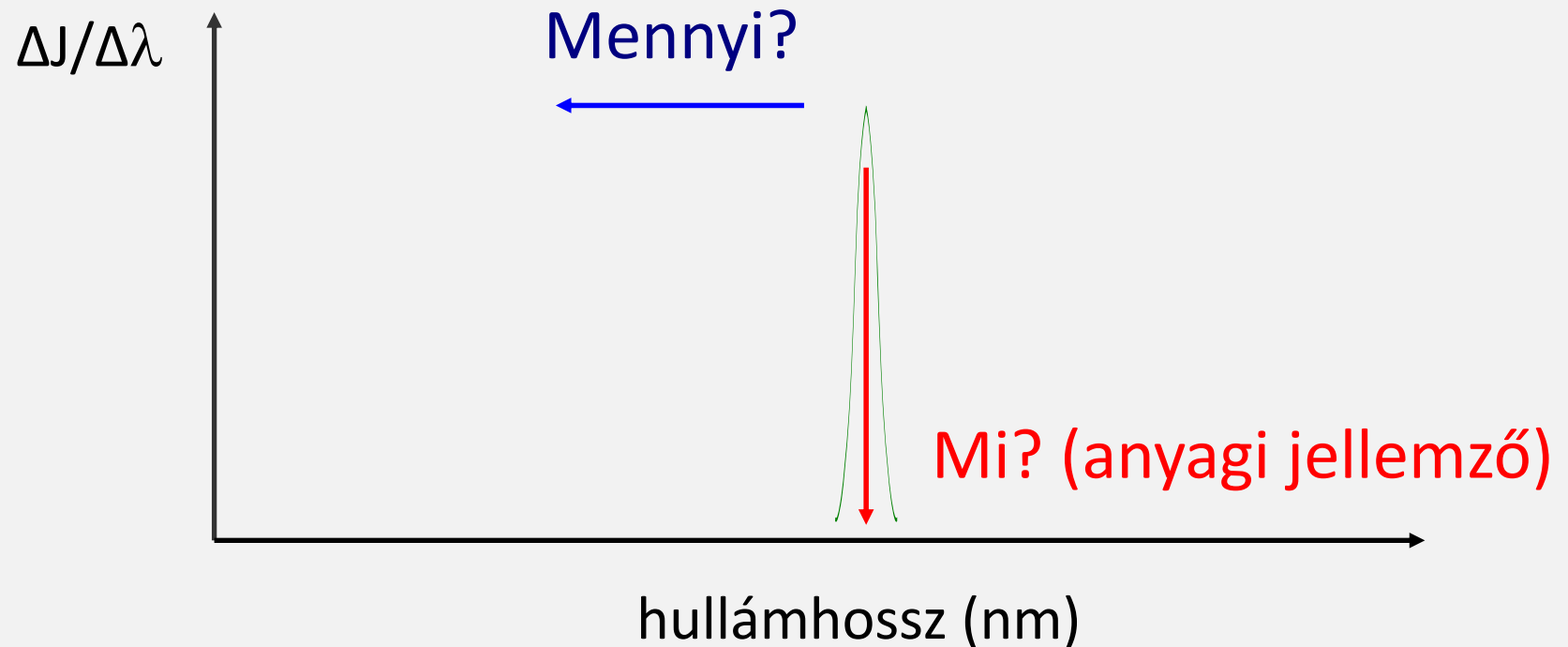
Emisszió jellemzése

Kibocsájtott intenzitás hullámhossz szerinti eloszlása

Emissziós spektrum

Atomok esetében:

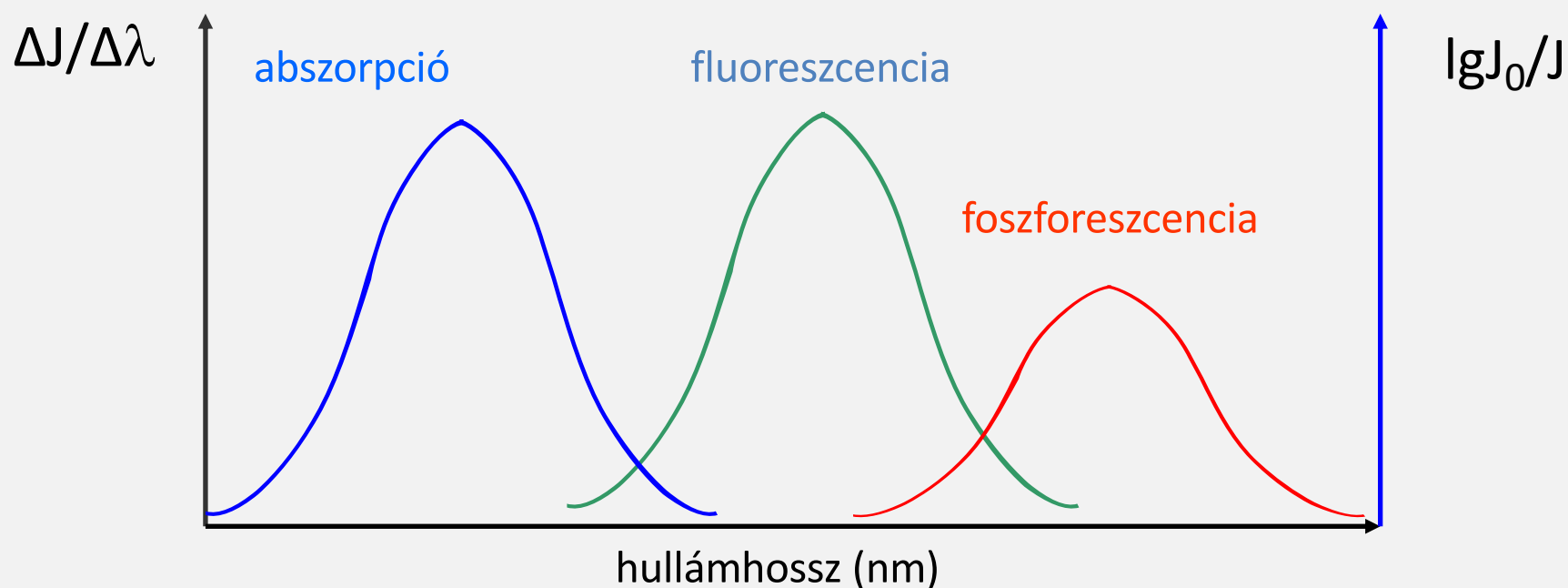
vonalas spektrum



Emittált intenzitás hullámhossz szerinti eloszlása

Emissziós spektrum

Molekulák esetében: sávos spektrum



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

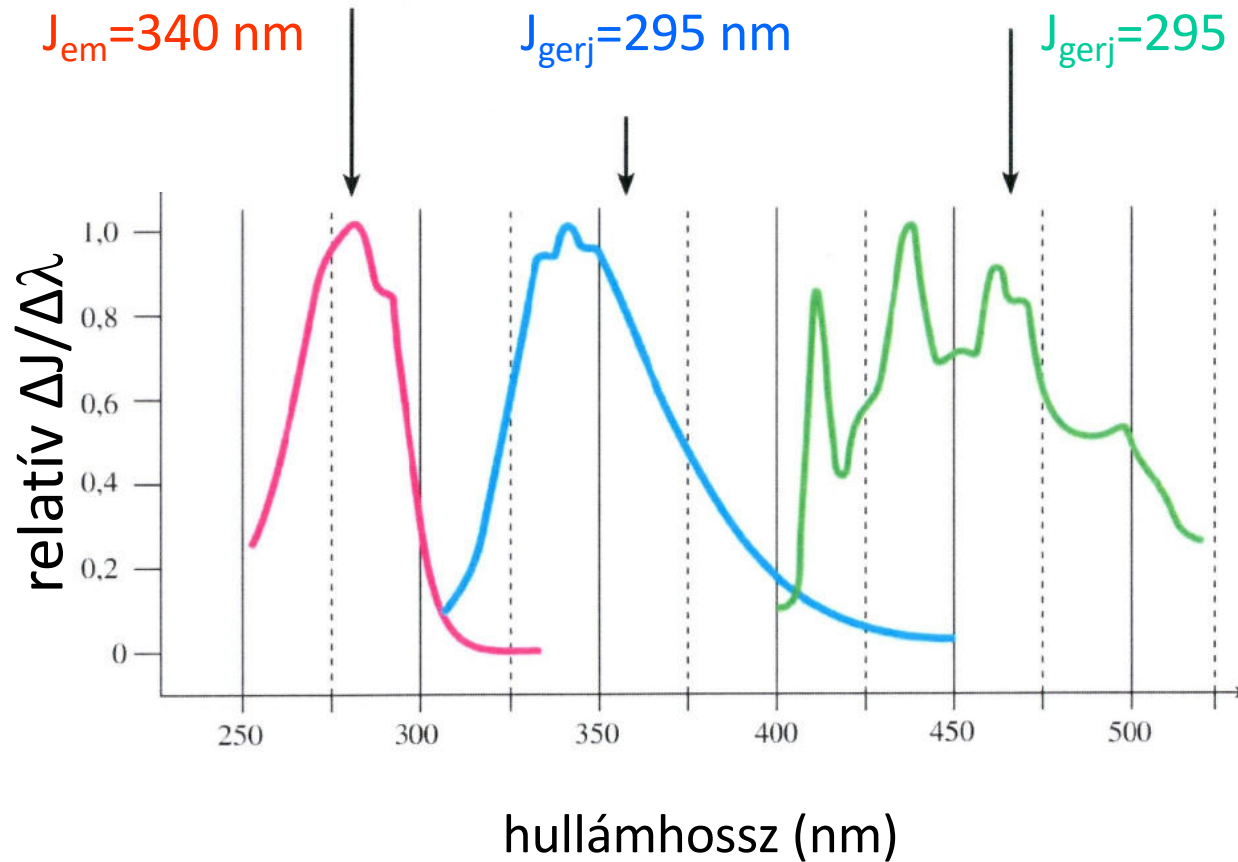
Stokes-eltolódás

Pl.: a triptofán aminosav spektrumai

Fluoreszcencia
gerjesztési spektrum

Fluoreszcencia
emissziós spektrum

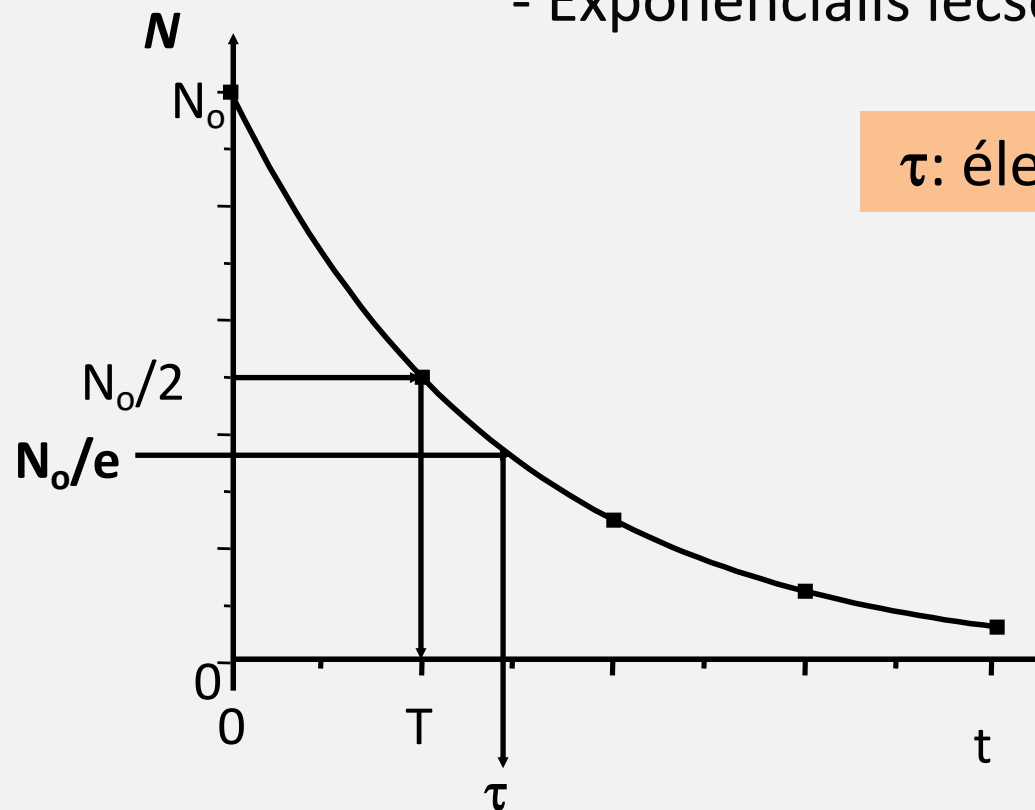
Foszforeszcencia
emissziós spektrum



Gerjesztett elektronok
száma

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

- Exponenciális lecsengés



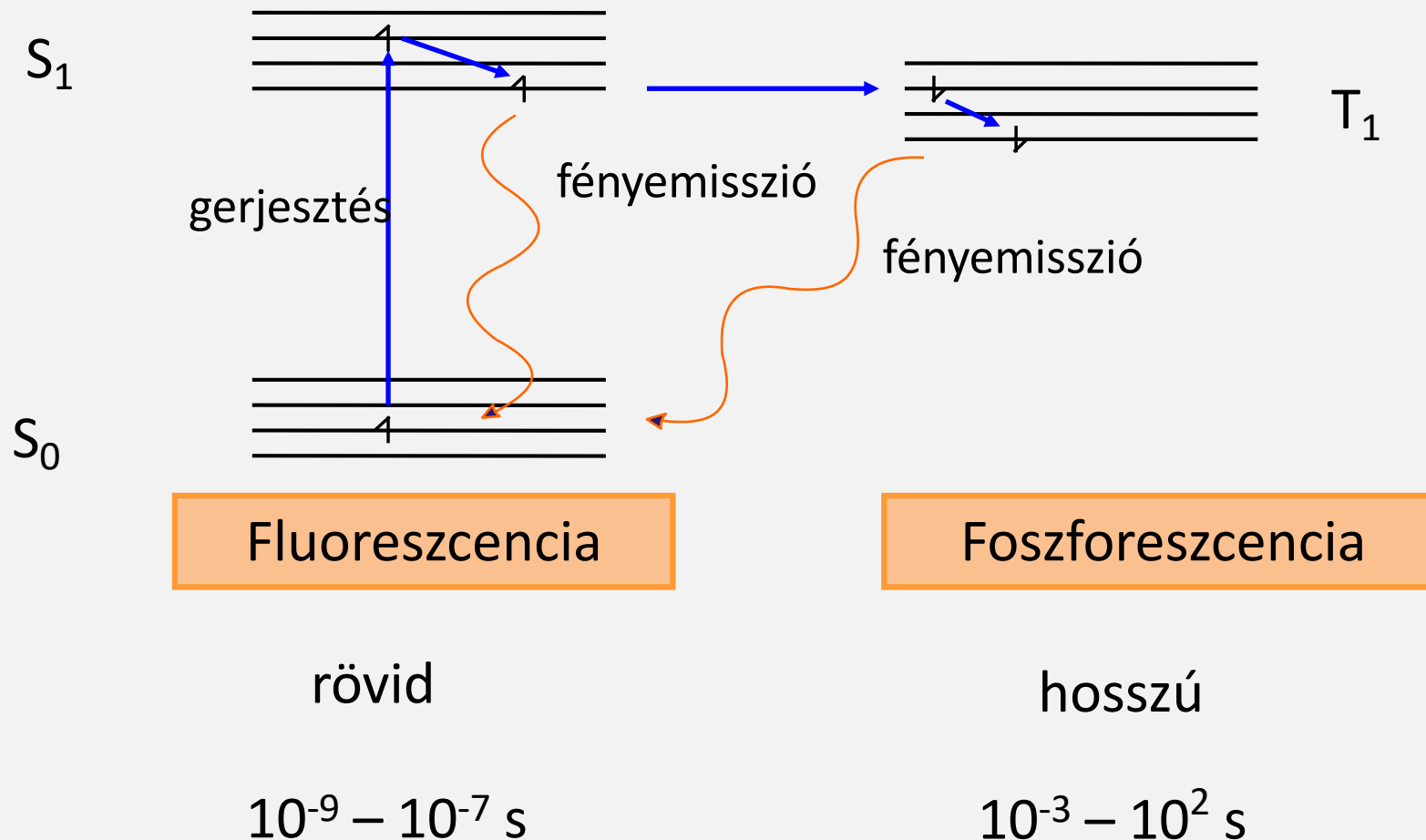
τ : élettartam T : fél-életidő

τ : 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.

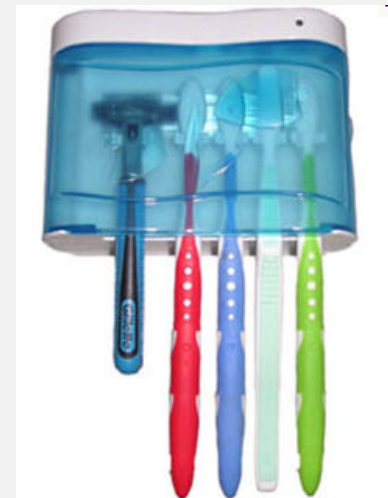
Fluoreszcencia kvantumhatásfoka (Q_F)

Q_F = kisugárzott fotonok száma / elnyelt fotonok száma

$$Q_F \leq 1$$

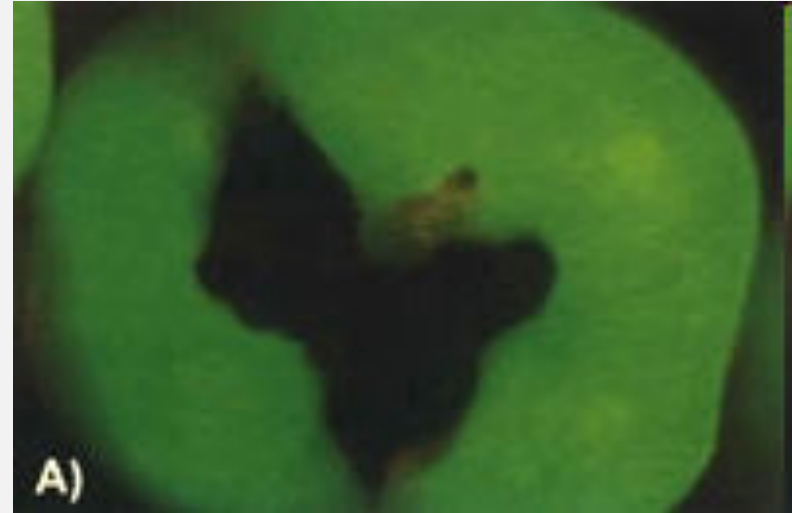
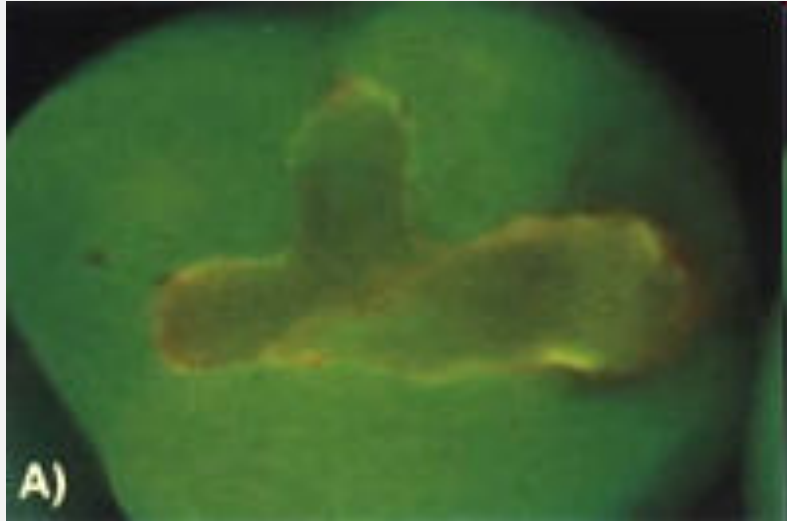
A lumineszcencia alkalmazási területei

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

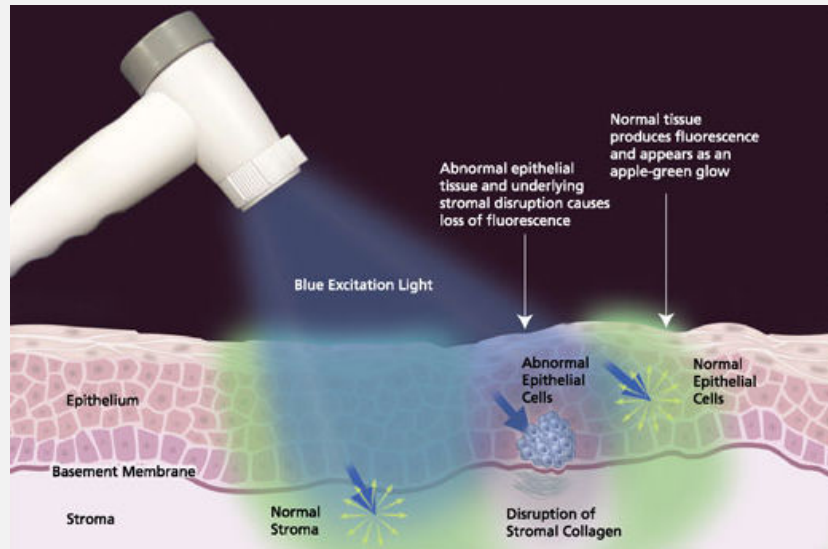


Példák a fogorvosi alkalmazásra

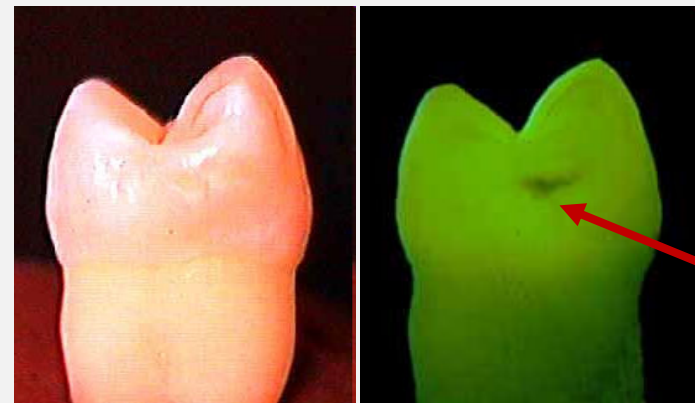
Piros fluoreszcencia a tömés peremén jelzi a tökéletlen illeszkedést és a megtelepedő baktériumokat



Amalgám tömés elégtelen illeszkedése



Egészséges és malignus szövetek eltérő fluoreszcens tulajdonságai

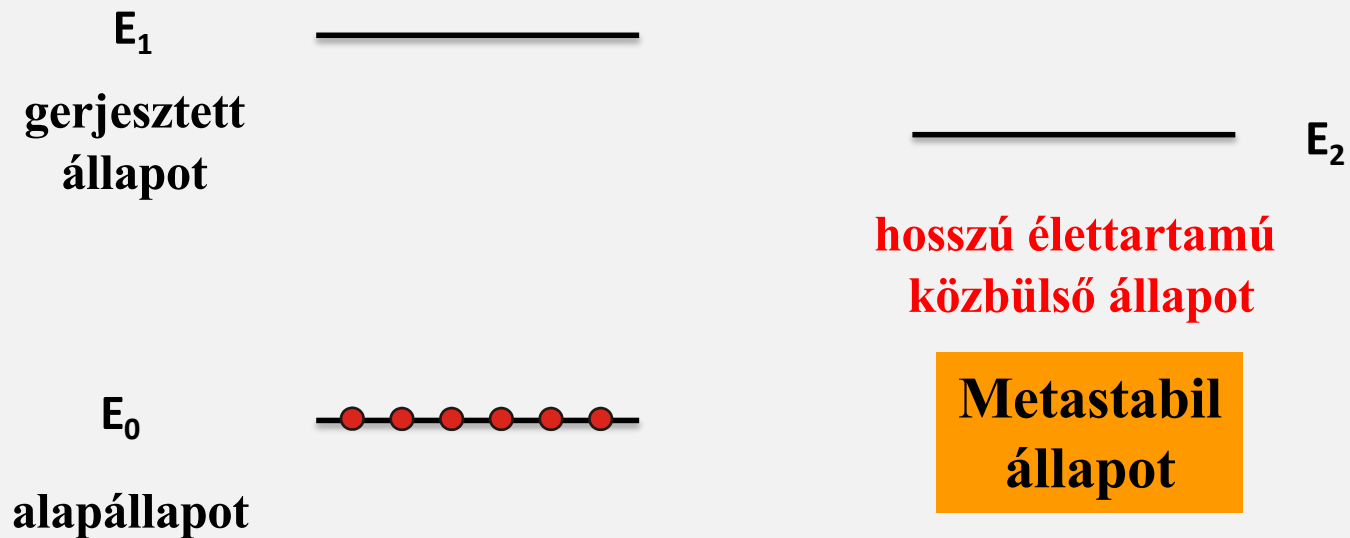


Kezdődő caries

Fog felszíne natív állapotban és fluoreszcens festés után

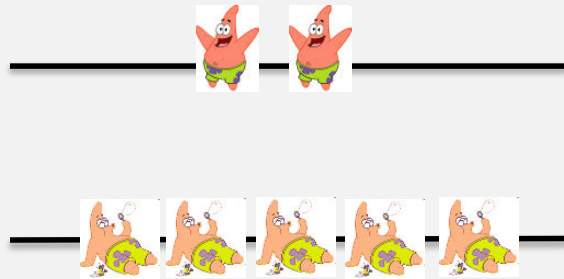
A lézerfény előállításának feltételei és lépései

Speciális elektron energia állapotok:
legalább három energianívós rendszer



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

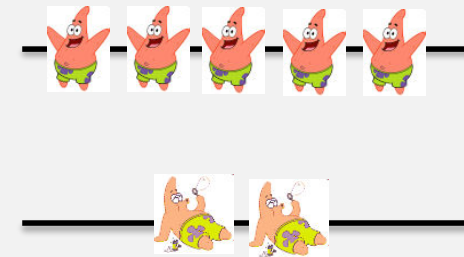
Elektronállapotok betöltöttsége: Populáció inverzió



Termikus egyensúly

Boltzmann eloszlás szerint:

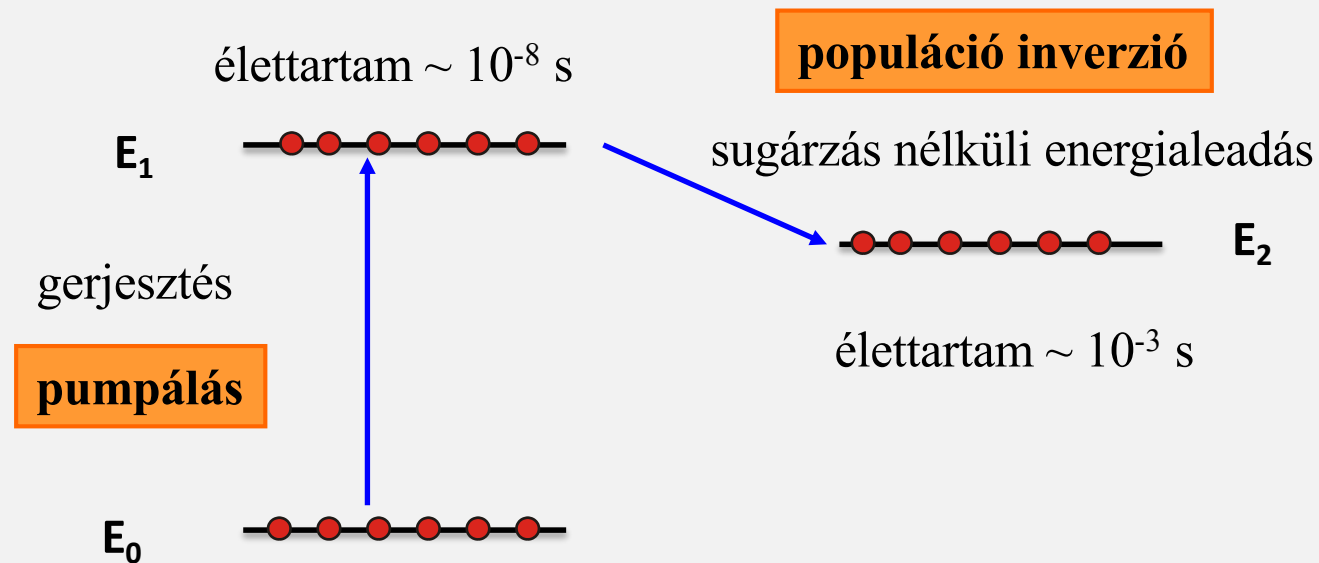
$$n = n_0 e^{-\frac{\Delta\varepsilon}{kT}}$$



Populáció inverzió

“fordított” betöltöttség

Gerjesztés: Optikai pumpálás



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

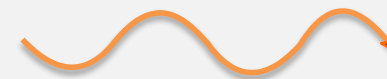
Spontán emisszió

E_1 _____

E_0 _____ ●

●●●●●● _____

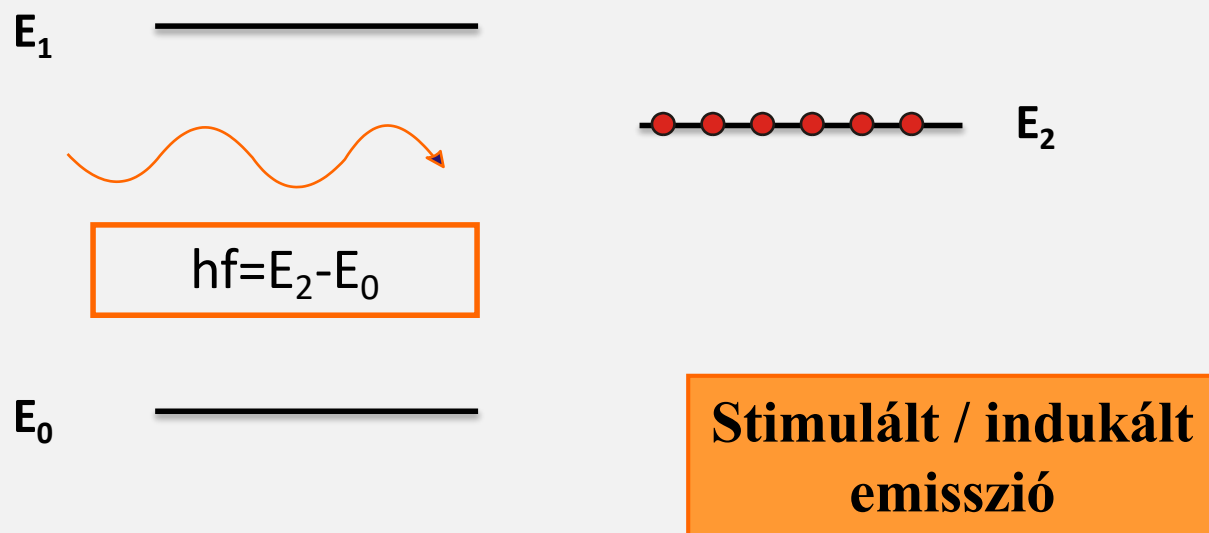
E_2



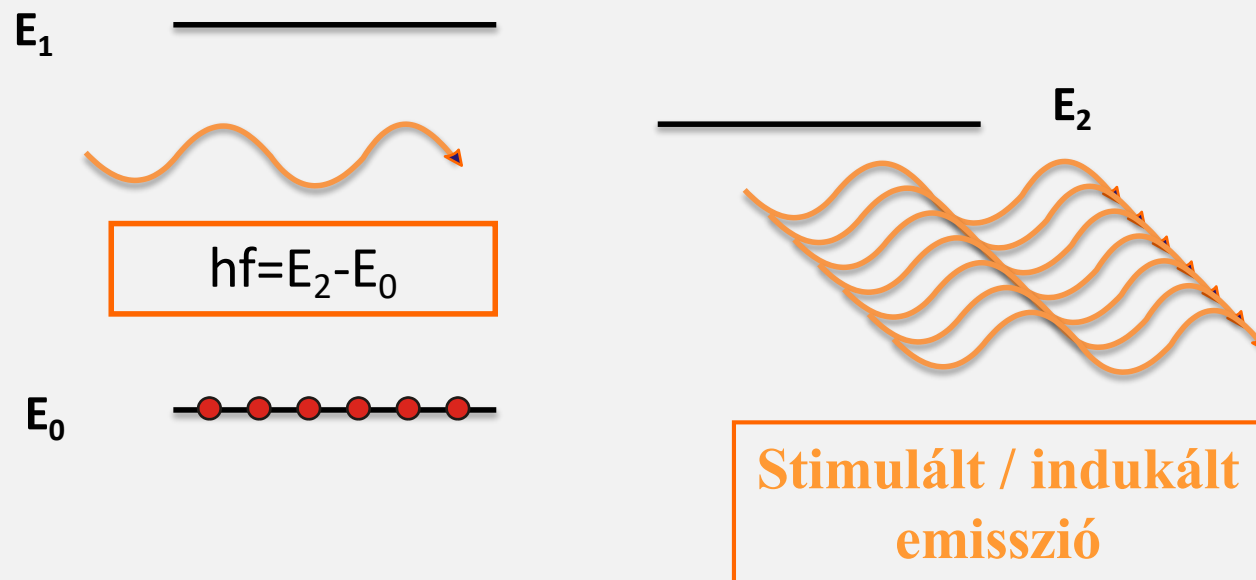
spontán
fényemisszió

kis valószínűséggel

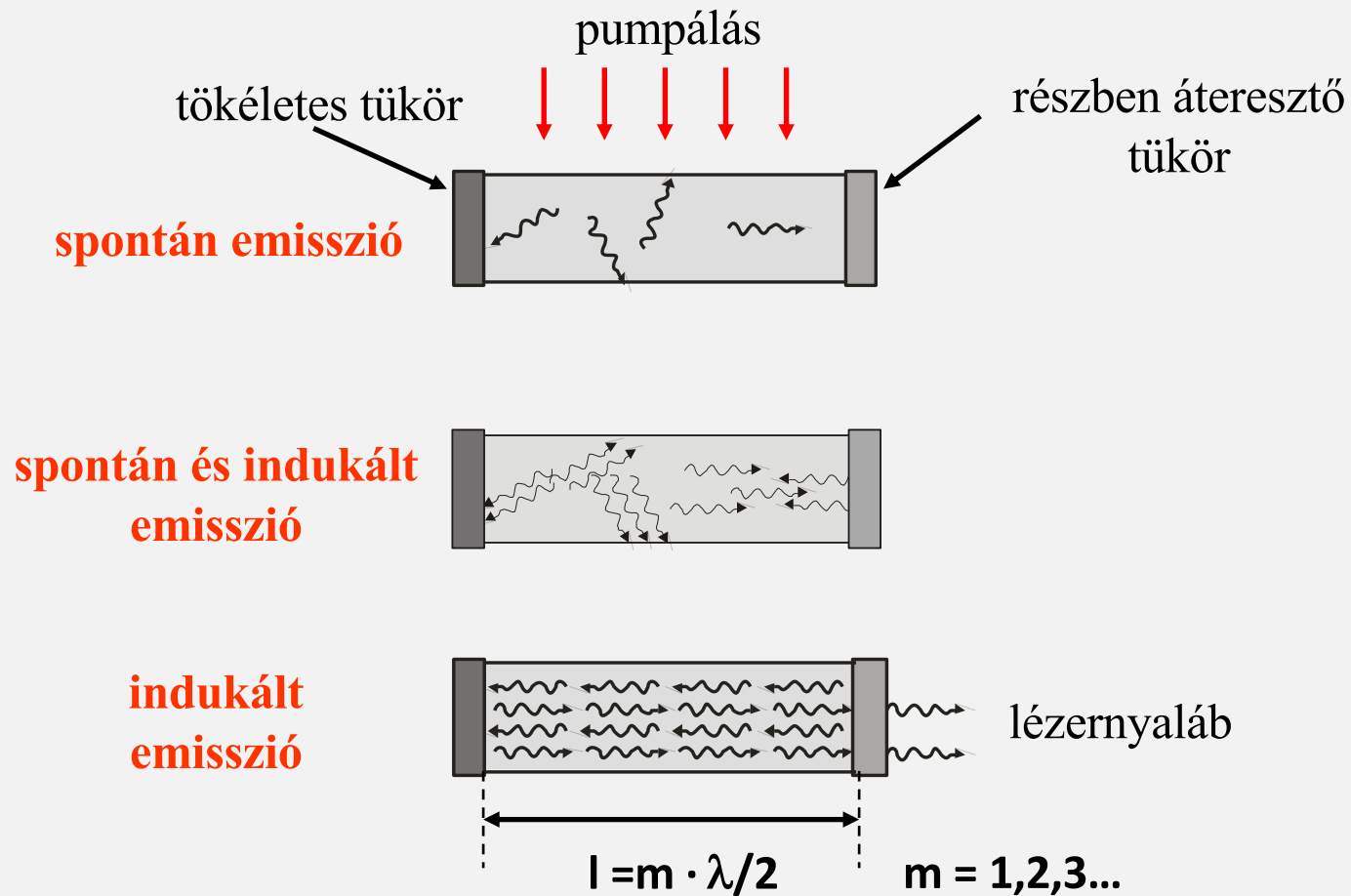
A metastabil nívón lévő elektronok relaxációjának stimulálása



A metastabil nívón lévő elektronok relaxációjának stimulálása



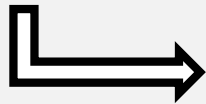
Lézercső – optikai rezonátor



Lézerfény általános tulajdonságai

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

- energiája
- fázisa
- rezgési síkje
- terjedési iránya.

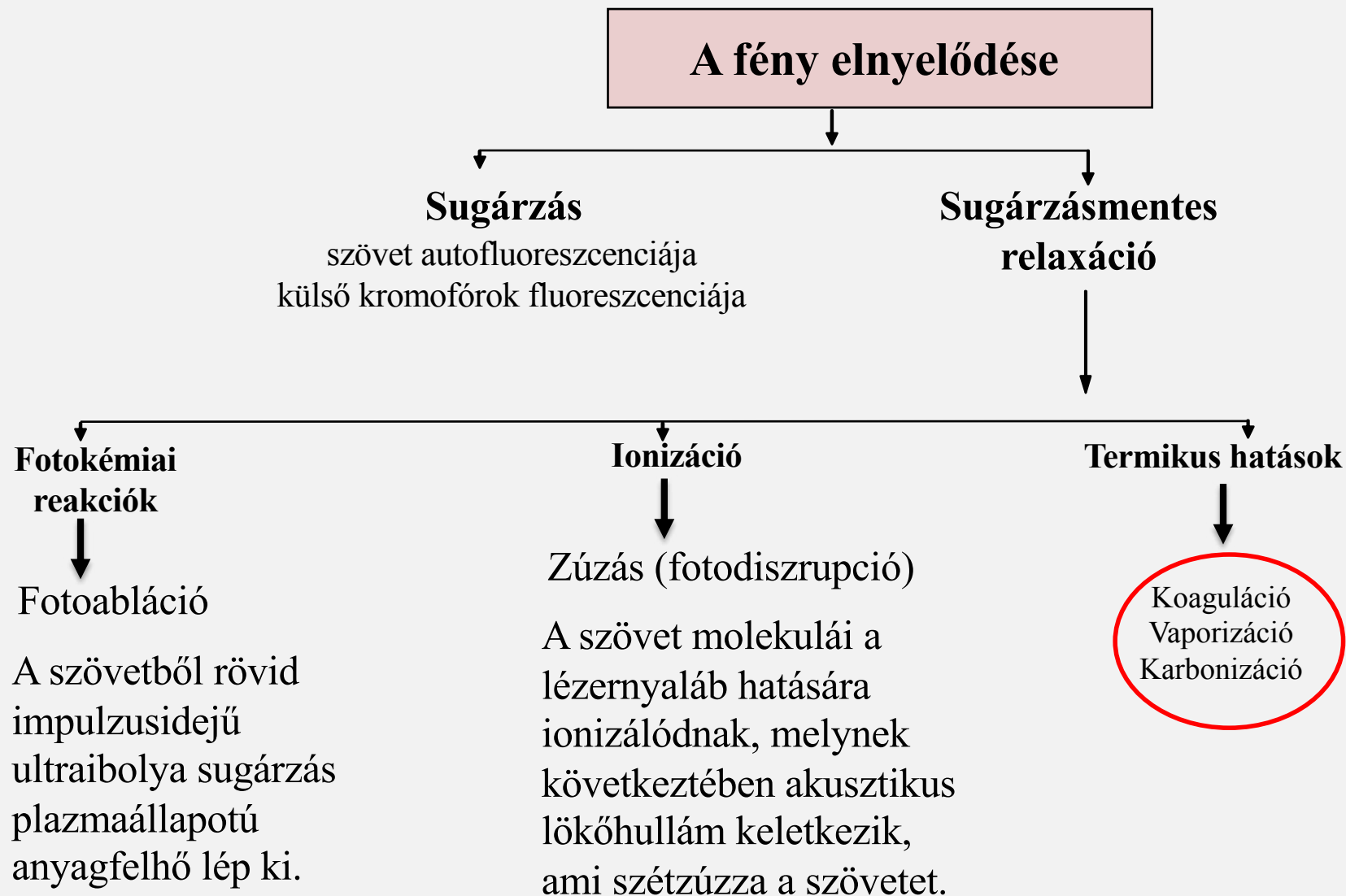


Ezért az indukált emisszióval keletkezett fény:

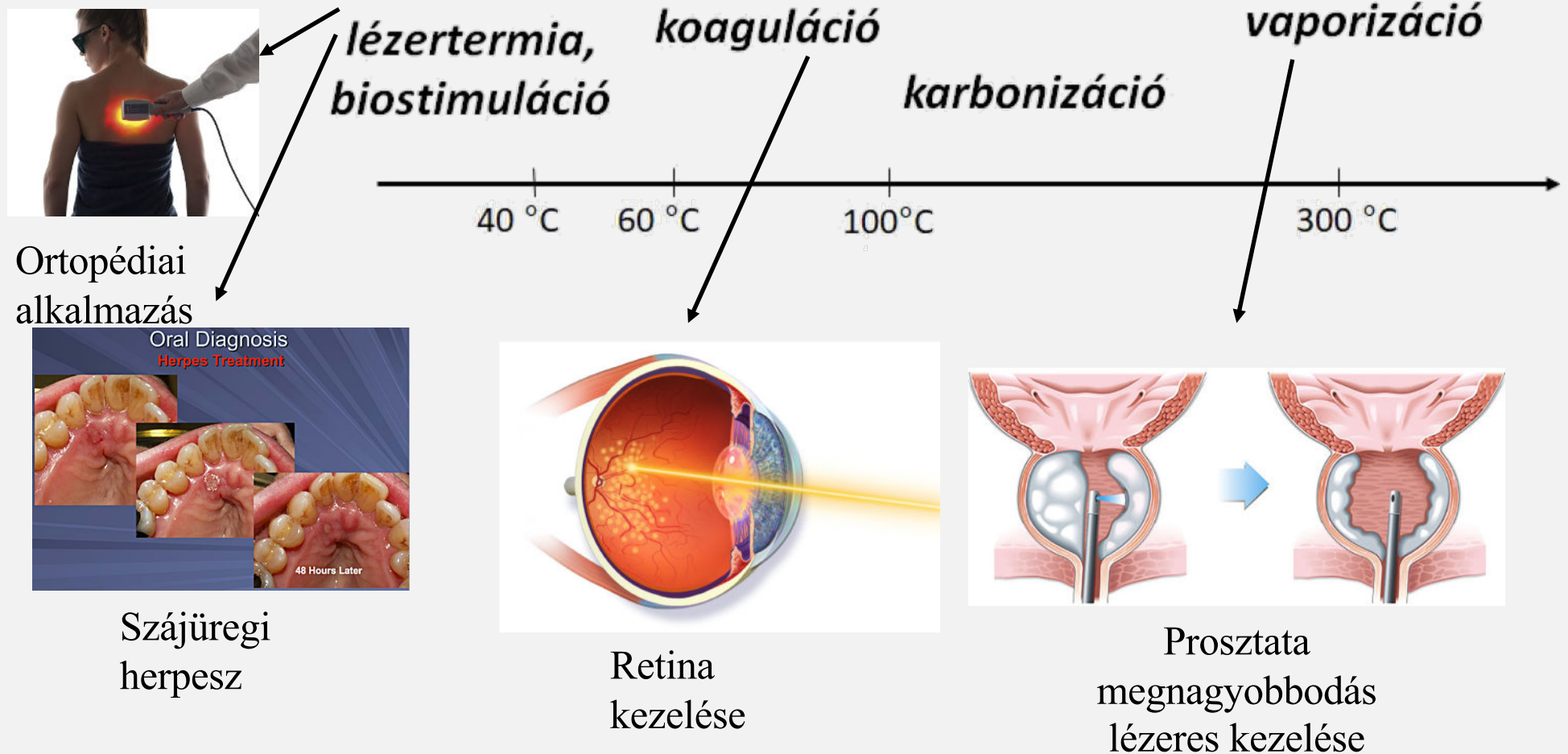


- Monokromatikus
- koherens
- poláros
- jól fókuszálható

Lézerek orvosi alkalmazási lehetőségei



Termikus hatások



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>