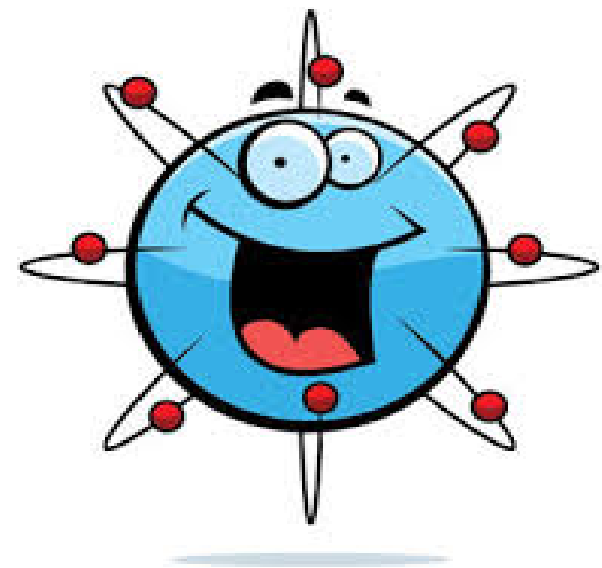


# 1. Úvod do biofotoniky

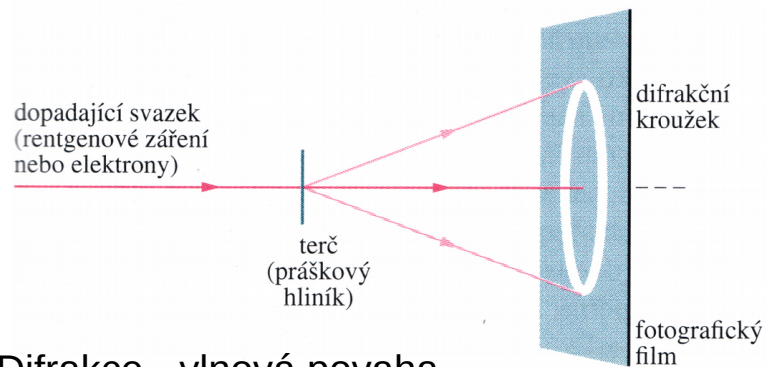
# Atom

- (z řeckého átomos – nedělitelný)
- definuje vlastnosti daného chemického prvku
- definoval jej Dalton začátkem 19. století
- Je opravdu nejmenší částice hmoty?
  - nelze jej dělit chemickými prostředky
  - fyzikálně ano, na co?
- Jaké známe elementární částice?

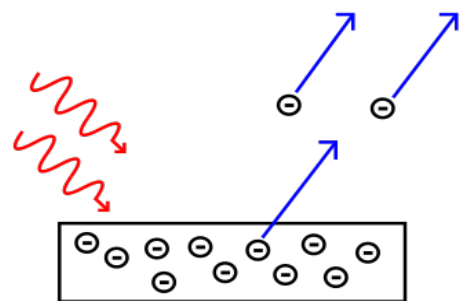
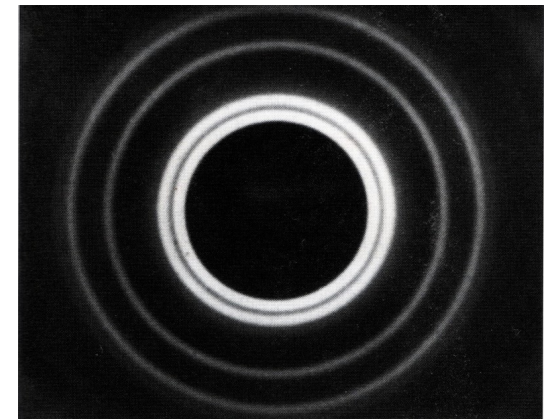
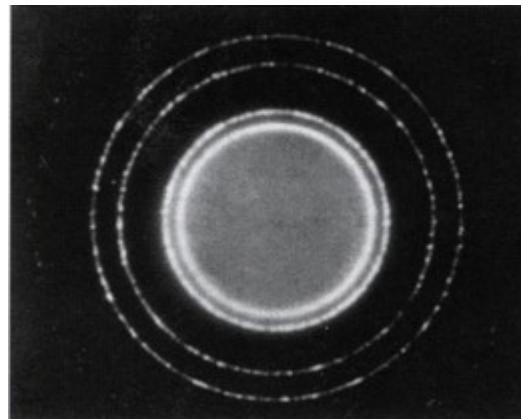


# Částice a EM vlna

- Myšlenku duality částic a vlnění zavedl v roce 1905 Albert Einstein pro objasnění fotoelektrického jevu
- Fyzikální pojem dualita částice a vlnění se vztahuje ke skutečnosti, že světlo lze popsat buď jako vlnu nebo jako částici, v závislosti na uspořádání experimentu a způsobu pozorování.



Difrakce - vlnová povaha



Fotoelektrický jev - částicová povaha

Každou částici látky s energií  $E$  a hybností  $p$  můžeme chápat jako vlnu s jistou frekvencí  $\omega$  podle rovnice

$$\omega = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}$$

a s vlnovou délkou  $\lambda$

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

$h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  Js ... Planckova konstanta

Ačkoliv se tato dualita v obecnosti týká veškeré hmoty, nejčastěji se s ní lze setkat v případě objektů s velmi malou hmotností, zvláště pak u elementárních částic.

# EM vlna

- Je charakterizována kmitáním Poyntingova vektoru

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

- okamžitá hodnota vektoru elektrické složky,  $\mathbf{E} = (0, E, 0)$

$$E = E_m \sin(kx - \omega t),$$

- okamžitá hodnota vektoru magnetické složky,  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$

$$B = B_m \sin(kx - \omega t),$$

kde  $k$  je vlnový vektor a  $\omega$  je úhlová frekvence vlny.

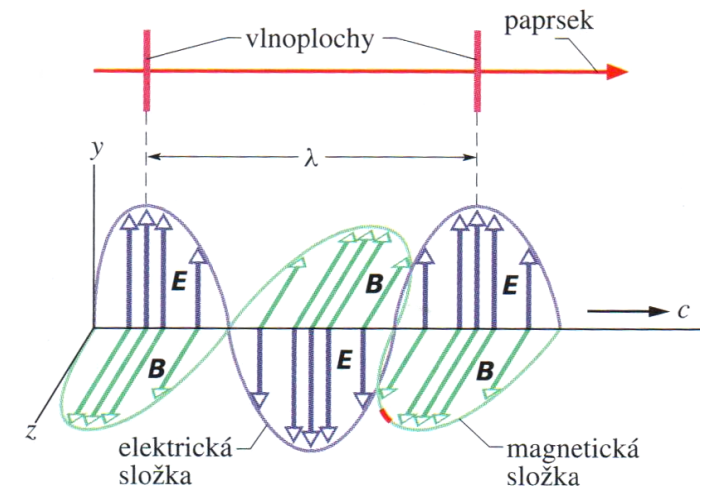
- rychlost šíření vlny

$$c = \frac{\omega}{k}, c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \quad \text{a také} \quad c = \frac{E}{B},$$

kde  $\mu_0$  je permeabilita vakua a  $\epsilon_0$  permitivita vakua.

- vlnová délka

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}.$$



# Atom - model

- Thomsonův (pudinkový) model atomu
  - r. 1904
  - objev elektronu - jsou uspořádány v různých strukturách, kladný náboj ve formě „polévky“ obklopuje elektrony
- Rutherfordův (planetární) model atomu
  - r. 1911
  - objev jádra atomu a protonu – elektrony obíhají kolem jádra jako planety slunce
  - nevýhoda modelu – elektrony by spirálovitě klesaly k jádru a úbytek jejich energie by byl vyzářen formou EM záření (neděje se)

# Bohrův model atomu

- r. 1913
- elektrony se pohybují po kružnicových trajektoriích (hladinách), na nichž nevyzařují žádné elektromagnetické záření.
- při přechodu z jedné hladiny na druhou elektron vyzáří (pohlť) právě 1 foton.
- jsou dovoleny ty trajektorie, jejichž moment hybnosti  $L = n\hbar$ , kde  $n = 1, 2, 3 \dots$  a  $\hbar$  redukovaná Planckova konstanta.
- model je stále založen na klasické fyzice, na rozdíl od planetárního modelu využívá některých závěrů kvantové fyziky, kterými se pokouší odstranit nedostatky planetárního modelu

# Bohrův model atomu

- veškeré stavy elektronu v Bohrově modelu lze popsat jediným kvantovým číslem  $n$ , které můžeme interpretovat jako číslo hladiny (počítáno vzestupně od 1)
- poloměr kružnicové dráhy  $n$ -té hladiny po které se elektron v atomu vodíku pohybuje je

$$r(n) = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} \cdot n^2$$

kde  $m$  je hmotnost elektronu,  $e$  je náboj elektronu,  $\epsilon_0$  je permitivita vakua,  $\hbar$  je redukovaná Planckova konstanta

- energie elektronu vázaného v atomu vodíku na  $n$ -té hladině je

$$E(n) = -\frac{m e^4}{2 (4 \pi \epsilon_0)^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

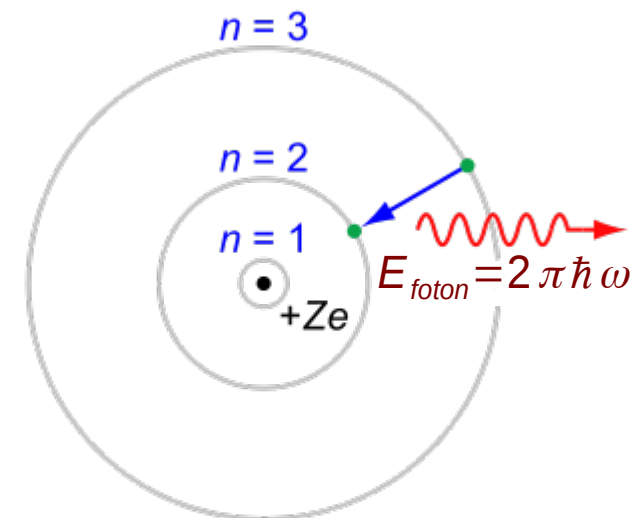
- postulát o vyzařování a pohlcování fotonu - pokud elektron vyzařuje foton, pak ze zákona zachování energie bude mít foton energii rovnu rozdílu energie elektronu před a po jeho vyzáření, tedy

$$E_e(t_1) - E_e(t_0) = E_{\text{foton}}$$

- pomocí Rydbergovy formule a Einsteinova vzorce pro energii fotonu dostáváme

$$E_{\text{foton}} = 2 \pi \hbar \omega = 2 \pi \hbar c R_{\infty} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \text{ kde } \omega \text{ je frekvence záření a } R_{\infty} \text{ je Rydbergova konstanta}$$

Energie vyzářeného (absorbovaného) fotonu je dána pouze rozdílem energií hladin mezi kterými elektron přechází




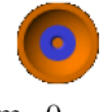


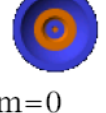
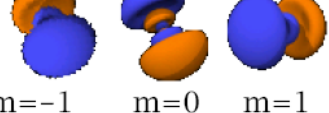
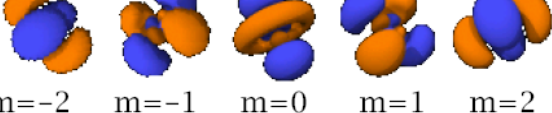
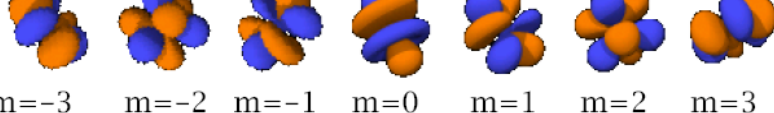




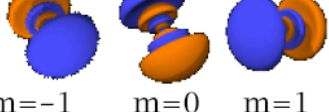



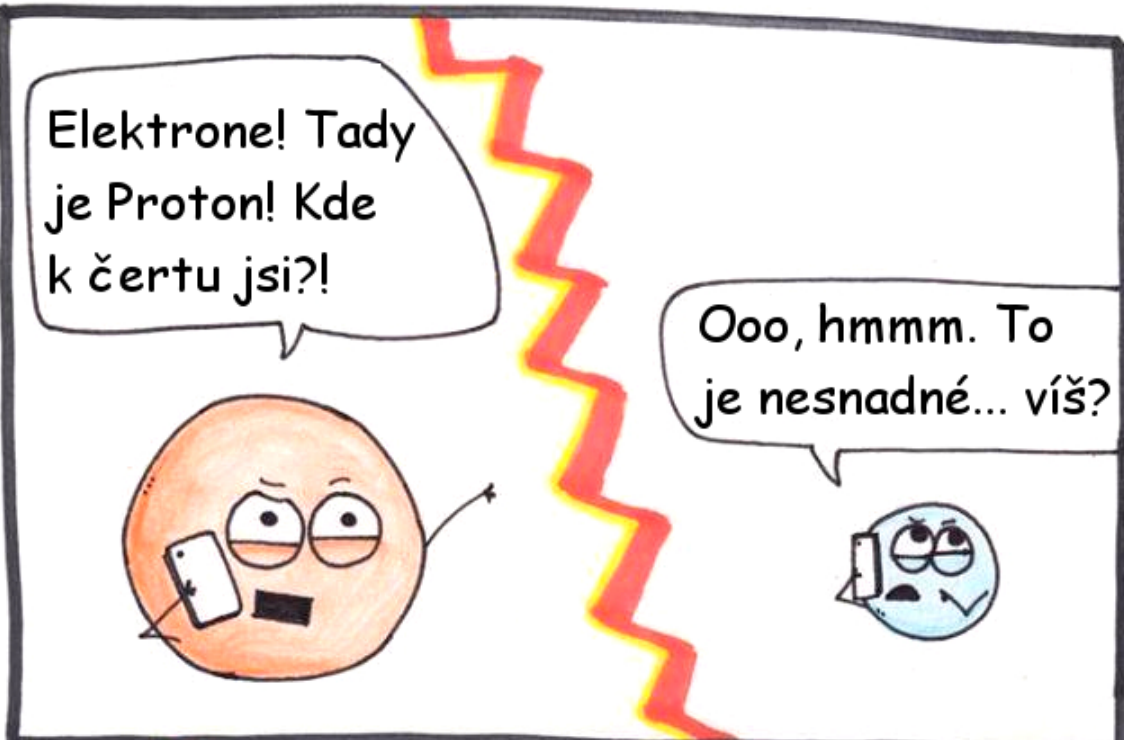
# Kvantově mechanický model atomu

- vznikl na základě de Broglieho teorie částicových vln a práci Schrödingera
- elektron (stejně jako všechny ostatní částice) není popisován jako hmotný bod, ale jako vlnová funkce definující pravděpodobnosti výskytu elektronu v různých místech prostoru
- s Heisenbergovými relacemi neurčitosti to znamená, že elegantní pravidelné eliptické dráhy Bohrova modelu nahrazeny neostře definovanými oblastmi, ve kterých se elektron s určitou pravděpodobností nalézá, tzv. orbitaly



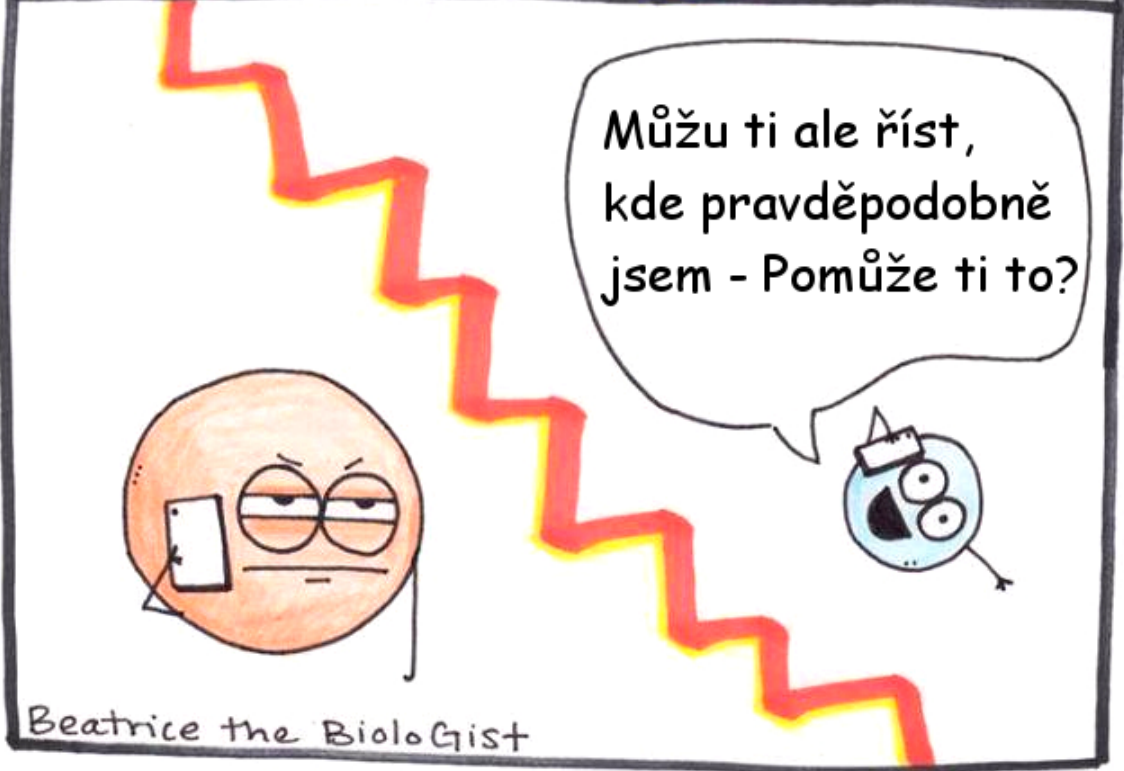
# Kvantově mechanický model atomu

	<i>s</i> : $l=0$	<i>p</i> : $l=1$	<i>d</i> : $l=2$	<i>f</i> : $l=3$
<b>n=1</b>	 m=0			
<b>n=2</b>	 m=0	 m=-1   m=0   m=1		
<b>n=3</b>	 m=0	 m=-1   m=0   m=1	 m=-2   m=-1   m=0   m=1   m=2	
<b>n=4</b>	 m=0	 m=-1   m=0   m=1	 m=-2   m=-1   m=0   m=1   m=2	 m=-3   m=-2   m=-1   m=0   m=1   m=2   m=3
<b>n=5</b>	 m=0	 m=-1   m=0   m=1	 m=-2   m=-1   m=0   m=1   m=2	<p>n – hlavní kvantové číslo (vrstva dle Bohrova modelu)</p> <p>l – vedlejší kvantové číslo</p> <p>m – magnetické kvantové číslo</p> <p>s – spinové kvantové číslo (up, down)</p>
<b>n=6</b>	 m=0	 m=-1   m=0   m=1		
<b>n=7</b>	 m=0			



Elektrone! Tady  
je Proton! Kde  
k čertu jsi?!

Ooo, hmmm. To  
je nesnadné... víš?



Můžu ti ale říst,  
kde pravděpodobně  
jsem - Pomůže ti to?

# Molekulový orbital

- Pokud orbitaly atomů interagují, vzniká jeden z těchto typů molekulového orbitalu:

- Symetrický MO:

- vazebné interakce mezi AO konstruktivně interagují (jsou ve fázi)
- má nižší energii než je energie skládaných atomových orbitalů, které jej tvoří

- Asymetrický MO:

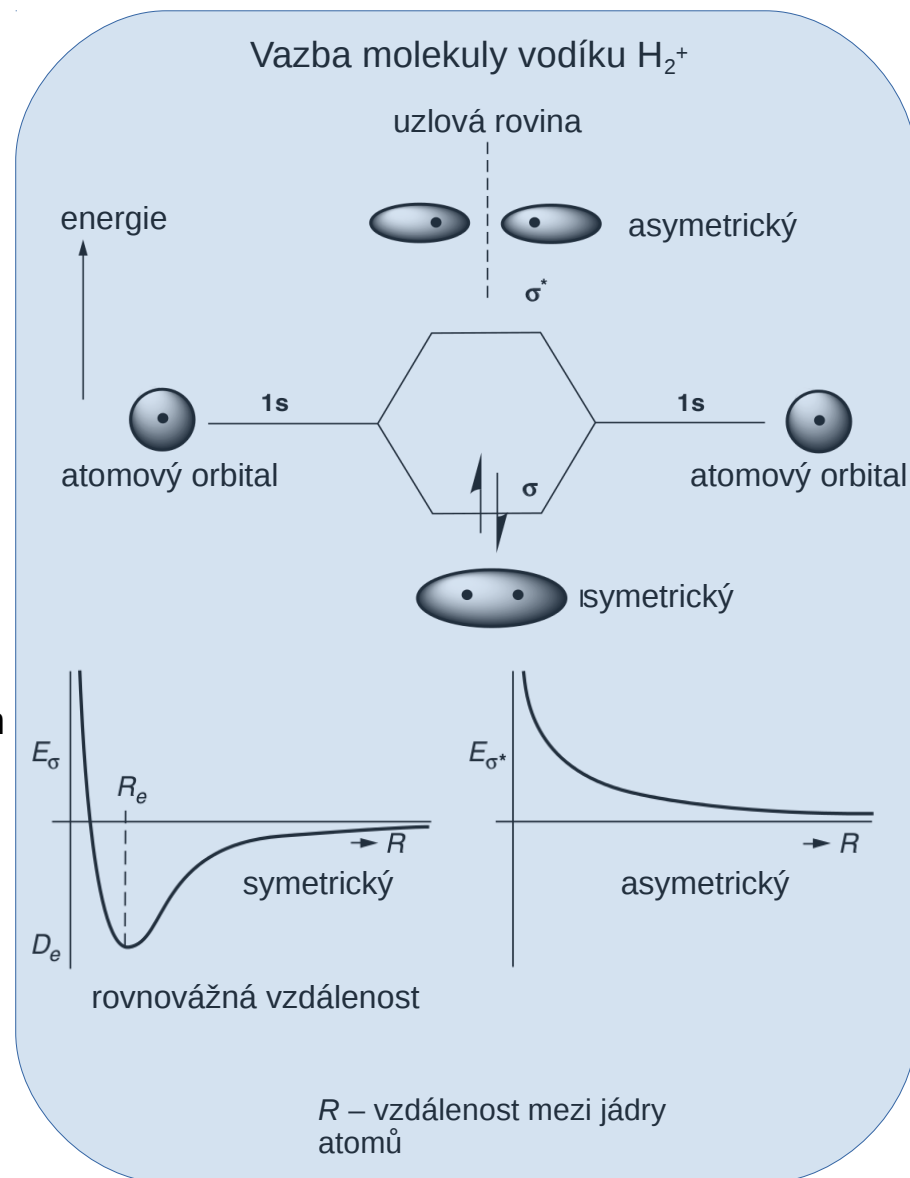
- vazebné interakce mezi AO destruktivně interagují (jsou v protifázi)
- v uzlové rovině mezi dvěma vzájemně působícími atomy je vlnová funkce nulová
- má vyšší energii než je energie skládaných atomových orbitalů, které jej tvoří

- Bezvazebný MO:

- MO je výsledkem AO bez reakce mezi atomovými orbitaly z důvodu nedostatku symetrií
- má stejnou energii jako atomový orbital jednoho z atomů v molekule

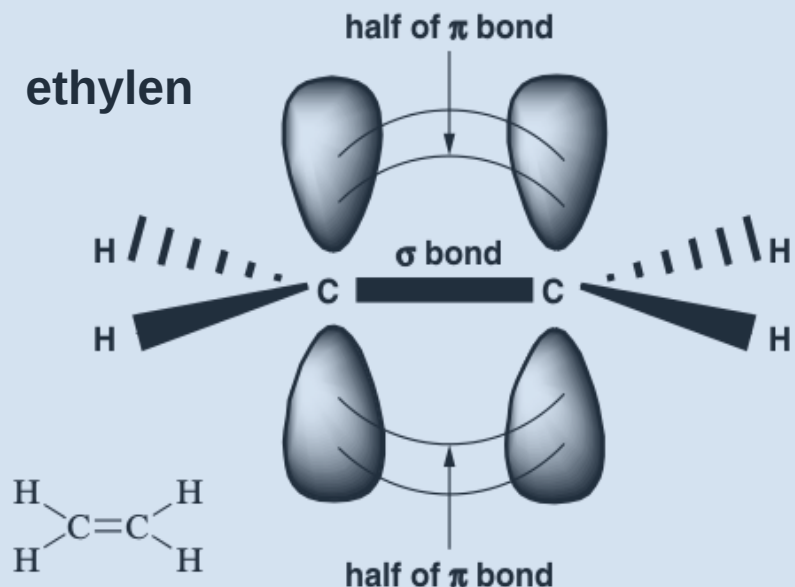
- Označuje se dle interagujícího orbitalu

- symetrické  $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ ,  $\varphi$
- asymetrické  $\sigma^*$ ,  $\pi^*$ ,  $\delta^*$ ,  $\varphi^*$



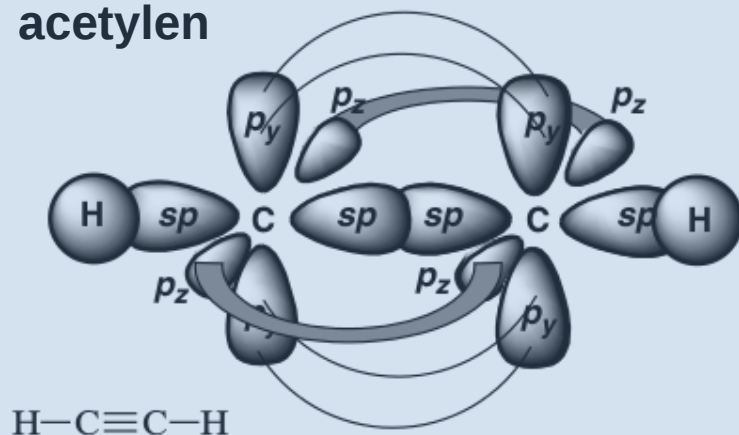
# Vazby v organických molekulách

ethylen



- Vazby C-C
  - prvá vazba mezi orbitaly p –  $\sigma$  vazba
  - druhá vazba mezi orbitaly p –  $\pi$  vazba
  - dáno geometrií atomů uhlíku
- Vazby C-H –  $\sigma$  vazby mezi p a s orbitaly

acetylen



- Vazby C-C
  - prvá vazba mezi orbitaly p –  $\sigma$  vazba
  - druhá a třetí vazba mezi orbitaly p –  $\pi$  vazba
- Vazby C-H –  $\sigma$  vazby mezi p a s orbitaly

# Vibrační stav molekuly

- je řešením Schrödingerovy rovnice molekuly
- dvouatomová molekula dovolující jen jeden vibrační stupeň volnosti (stlačení, natažení) má jednoduché řešení
- energie  $E_e(R)$  definuje potenciální energii  $V(R)$  pro vibrační pohyb jader
- $V(R)$  [ $E_e(R)$ ] lze rozepsat Taylorovým polynomem pro výchylku  $x = (R - R_e)$  okolo  $R_e$

$$V(x) = E_e(R) = V(x=0) + \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right) x + \dots$$

- první derivace v rovnovážné poloze má minimum pro  $x = 0$ :

$$\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_0 = 0$$

- pokud je referenční bod energie posunut na  $x = 0$  [tj.,  $V(x=0) = 0$ ] a kubický řád a vyšší řády (neharmonické) jsou ignorovány, pak potenciální energie je

$$V(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right) x^2 = \frac{1}{2} k x^2, \text{ kde } k \text{ je tuhost}$$

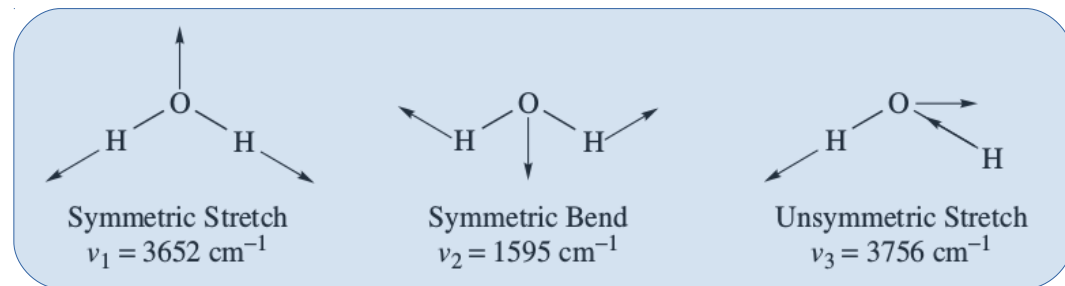
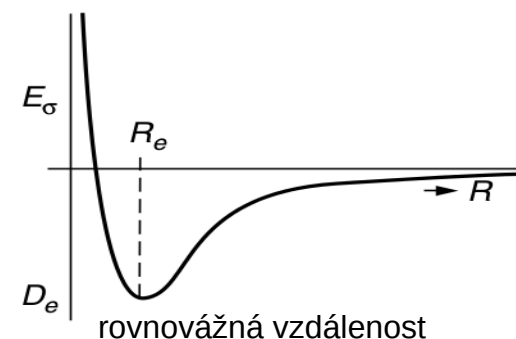
- řešení vibrační Schrödingerovy rovnice, pomocí této harmonické aproximace s okrajovou podmínkou

$\Psi_{vib}(x) = 0$  pro  $x = \infty$  je vibrační energie:

$$E_v = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \nu$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\nu =$  vibrační frekvence  $(k/\mu)^{1/2}$ ,

$\mu =$  redukovaná hmotnost  $= m_a \cdot m_b / (m_a + m_b)$  a  $m_a$  a  $m_b$  jsou hmotnosti jader, tvořících vazbu



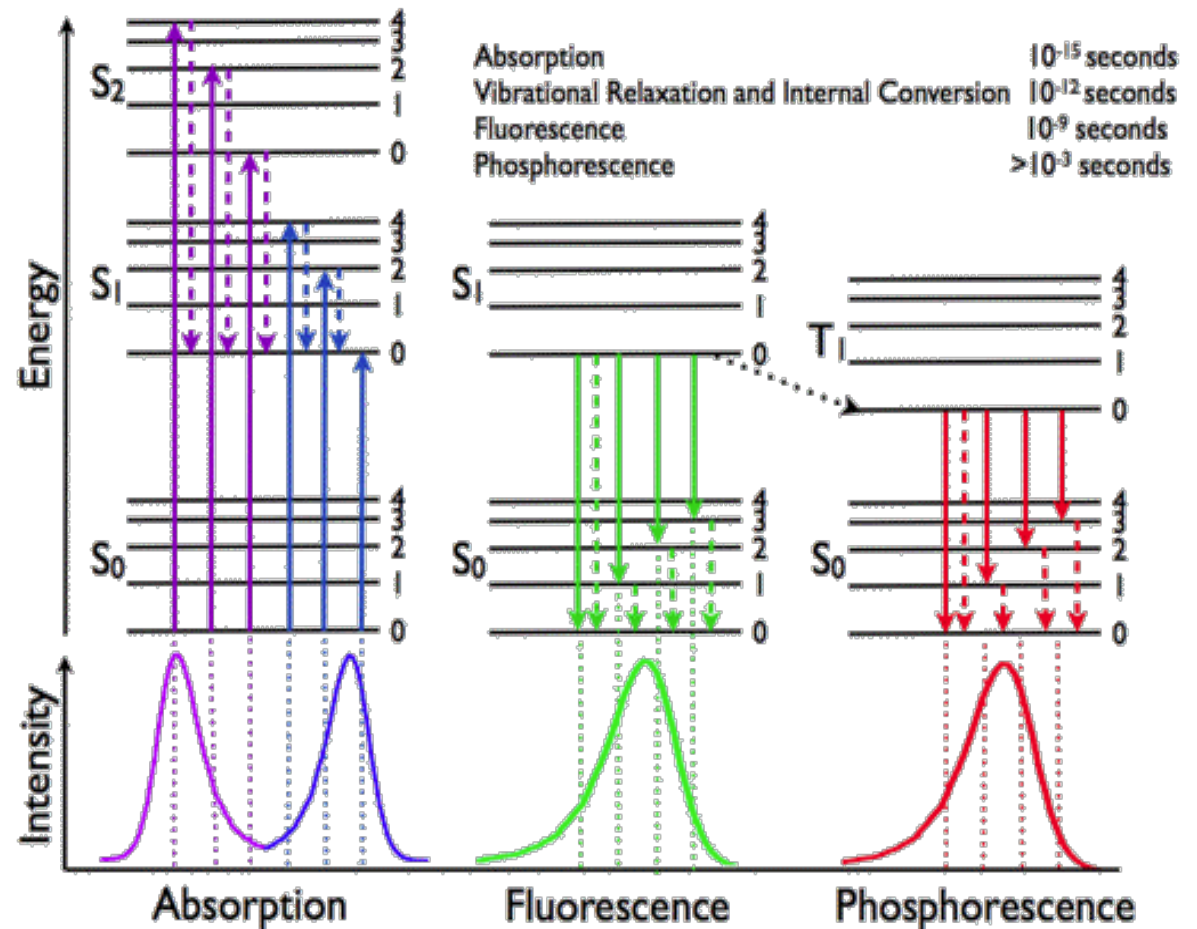
# Absorbce a emise záření molekulou

- **Singletový stav molekuly  $S_n$**

– spin jednoho excitovaného elektronu je stále spárovaný s druhým elektronem setrvávajícím v základním stavu (viz. Pauliho vylučovací princip)

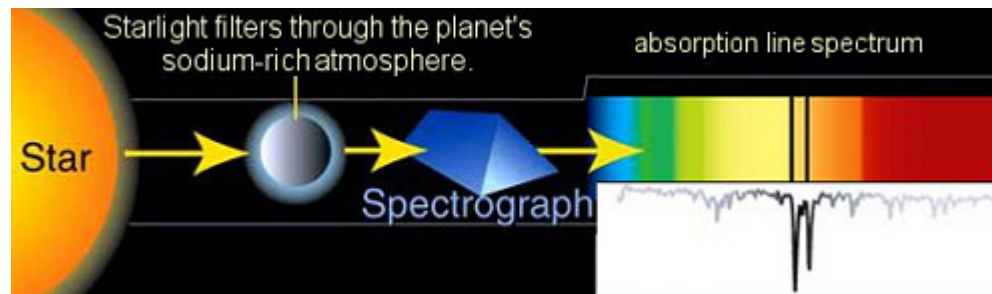
- **Tripletový stav molekuly  $T_n$**

– spin excitovaného elektronu není spárovaný s druhým elektronem setrvávajícím v základním stavu. Excitace do tripletového stavu zahrnuje "zakázaný" přechodu spinu - méně pravděpodobné. Přechod je povolen ze singletového stavu, pokud se energiové hladiny překrývají



# Typy spekter záření

- dělení dle způsobu vzniku spektra:
  - 1. emisní - spektrum, které je vyzařováno (emitováno) daným tělesem
  - 2. absorpční - jestliže bílé světlo projde přes nějakou látku, mluvíme o spektru absorpčním. V prostředí jsou pohlceny ty vlnové délky, které dané prostředí samo vyzařuje. Spektrum pak vypadá jako negativ spektra emisního, tzn. že na pozadí spojitého spektra jsou tmavé absorpční čáry.



- dělení dle tvaru spektra:
  - 1. spojité - je tvořeno elektromagnetickým zářením všech vlnových délek (resp. všech vlnových délek z určitého intervalu)
  - 2. čárové - spektrum je tvořeno pouze zářením o určitých vlnových délkách

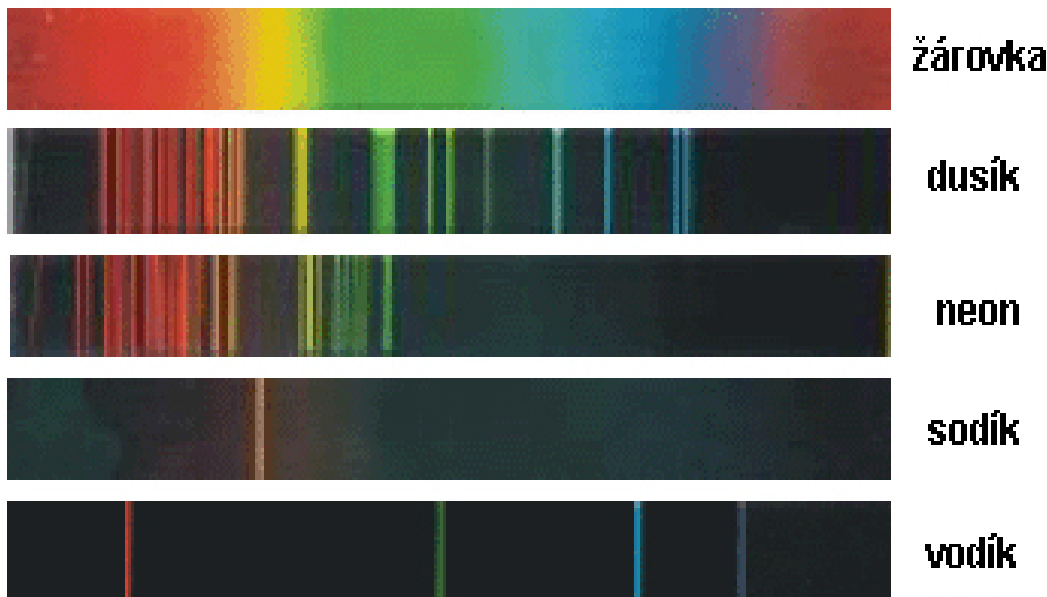
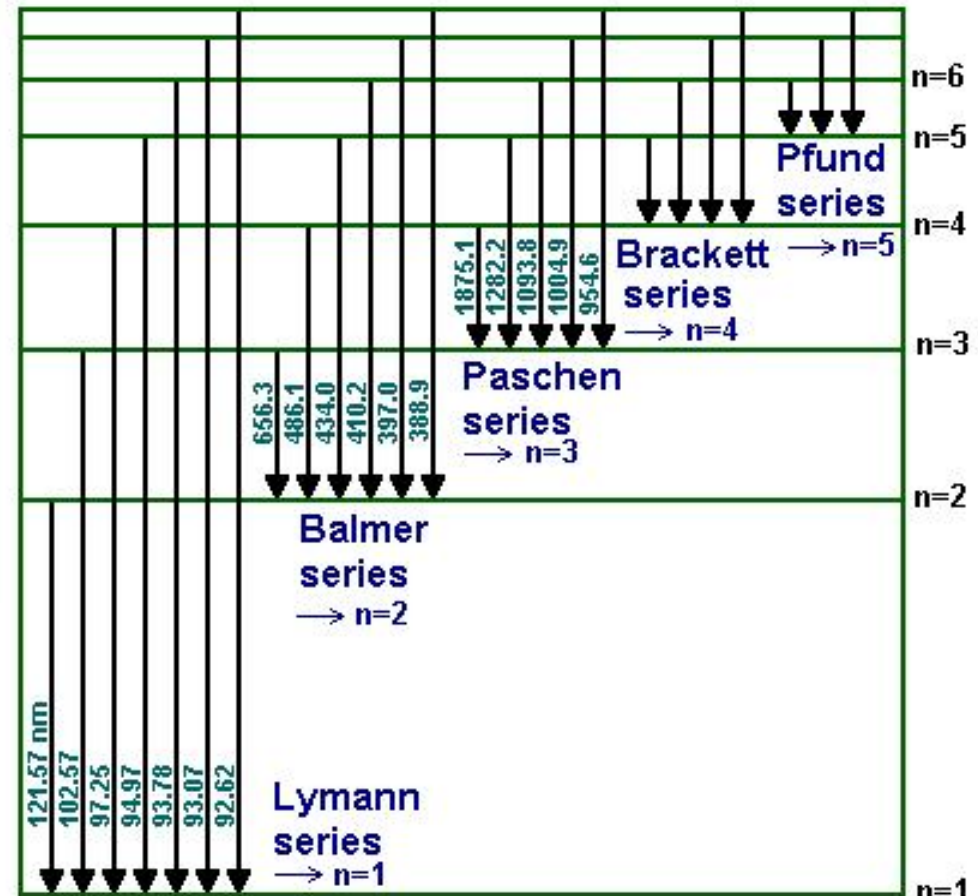
# Spektra látek

- každý chemický prvek má jakýsi „otisk“ ve spektru
- pomocí absorpčních spekter lze zkoumat chemické složení různých těles vyzařujících nebo pohlcujících elektromagnetické záření.



# Spektra látek

- Lyman series (Ultraviolet)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, \dots$
- Balmer series (Visible)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots$
- Paschen series (Infrared)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, \dots$
- Brackett series (Infrared)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots$
- Pfund series (Infrared)  $\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6, 7, 8, \dots$



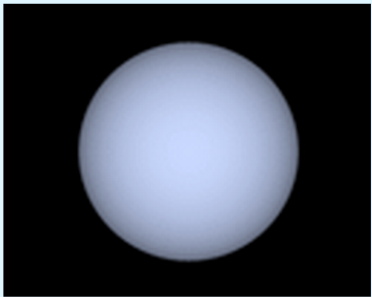
$$R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

$\lambda$  = wavelengths (m)  
 $n$  = integer

# Spektra látek

- Silné čáry Balmerovy série vodíku. Objevují se čáry ionizovaného vápníku a čáry kovů.

$T = 7\,500$   
 $K - 11\,000\,K$  typický představitel: **Sírius, Vega**

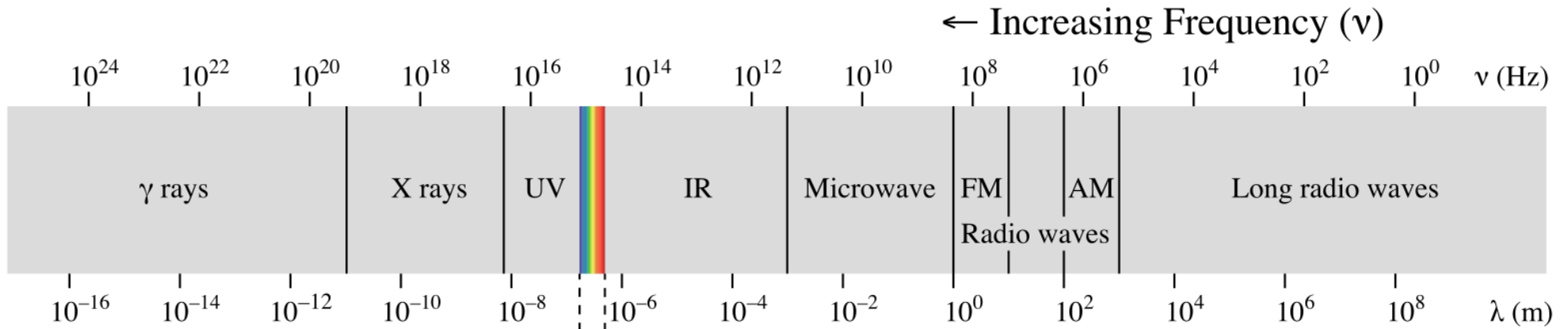


Hvězda  
spektrální třídy  
A

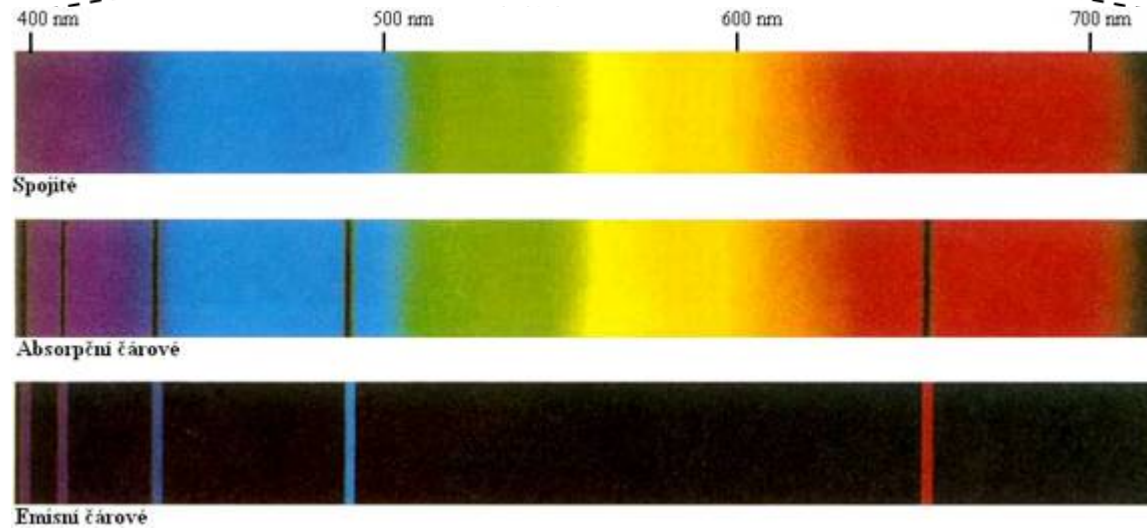


Spektrum hvězd A1v (nahore) a A5v (dole), vlnové  
délky 350-740 nm (zleva doprava)

# Viditelné spektrum záření



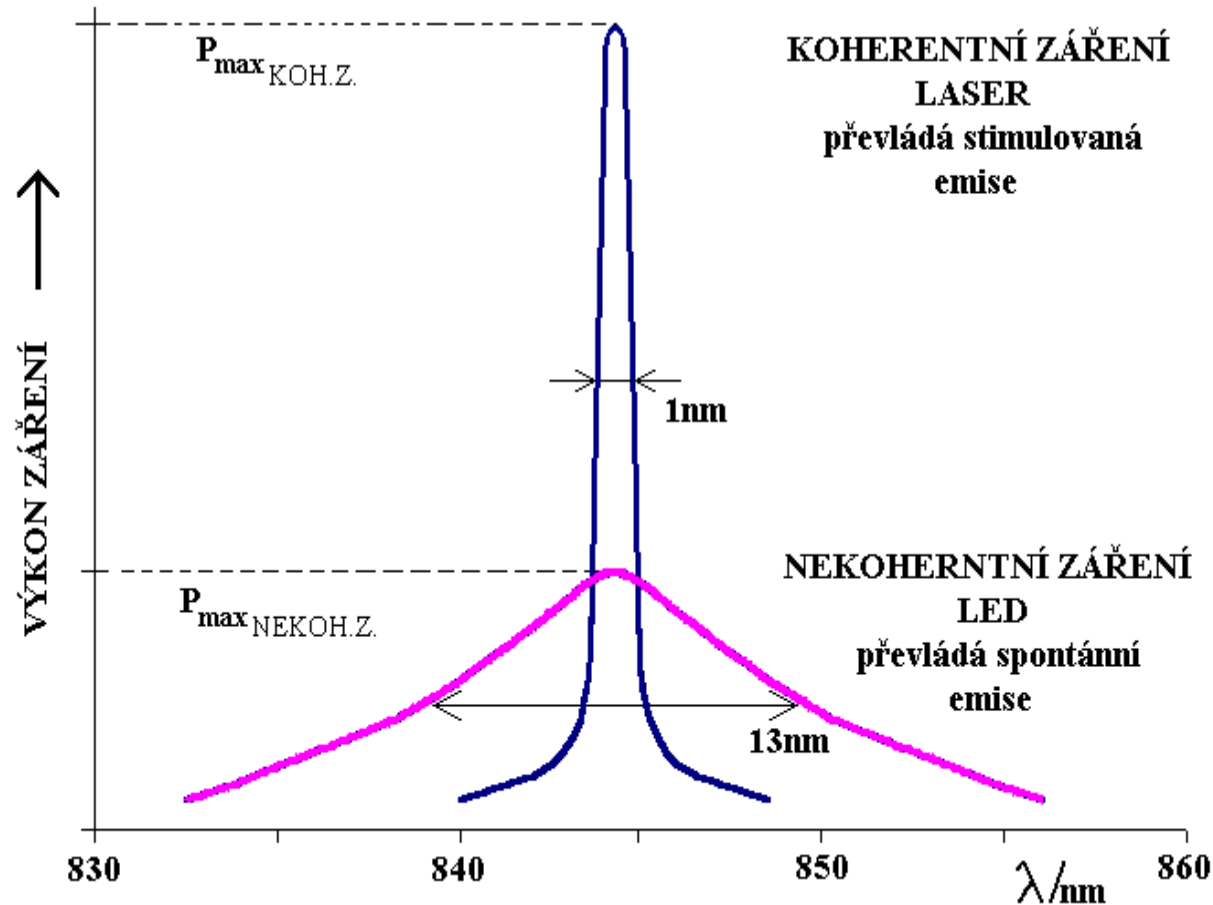
Increasing Wavelength ( $\lambda$ ) →



# Koherenční délka záření – časová koherence

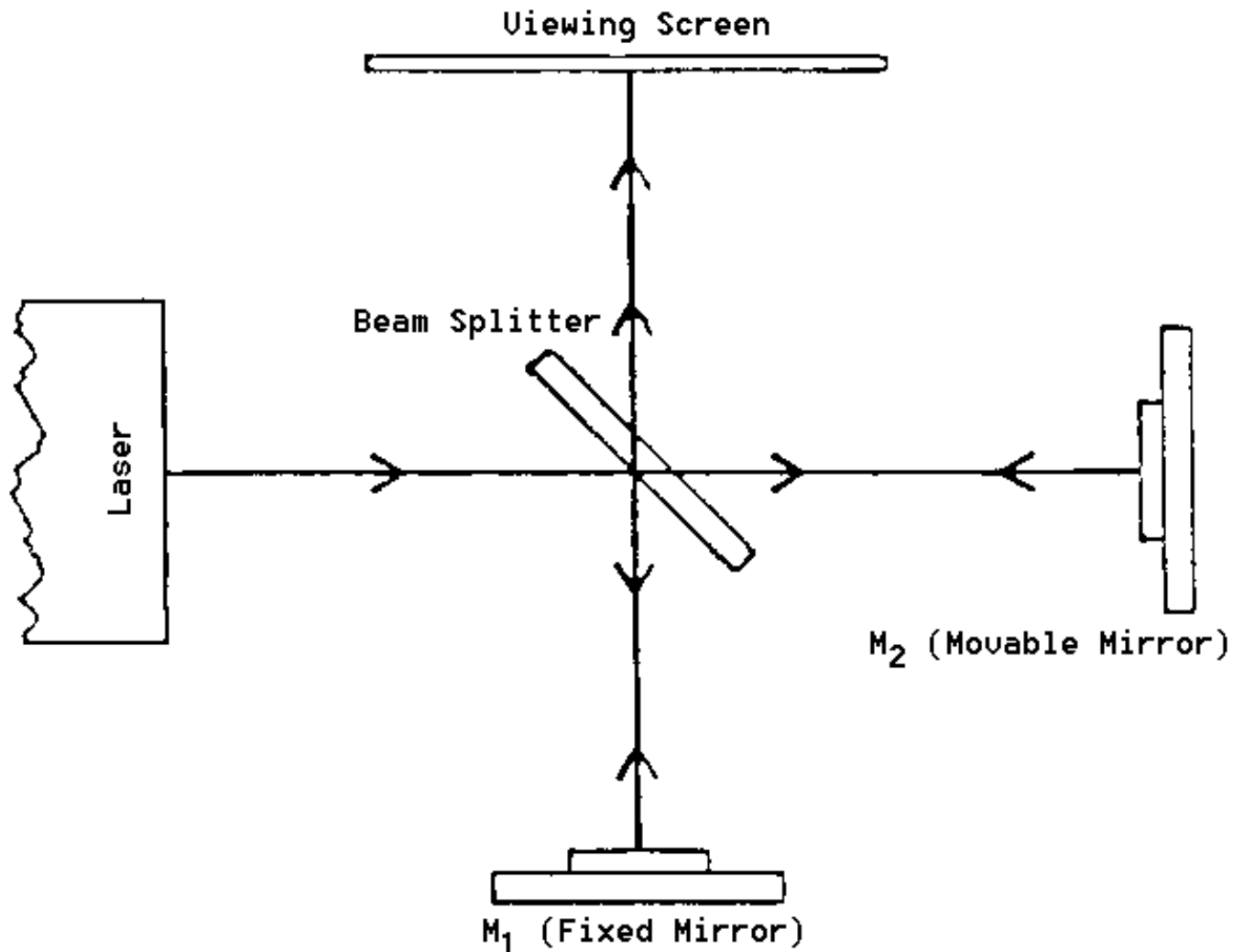
- Záření každého atomu (molekuly) si lze představit jako řadu vlnových klubek, které jej opouštějí s určitou vzájemnou časovou odlehlostí
- Interferenční jev nastává pouze mezi vlnami toho samého klubka
- Koherenční délka klubka je závislá na spektrální šířce záření

$$L_k = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$$



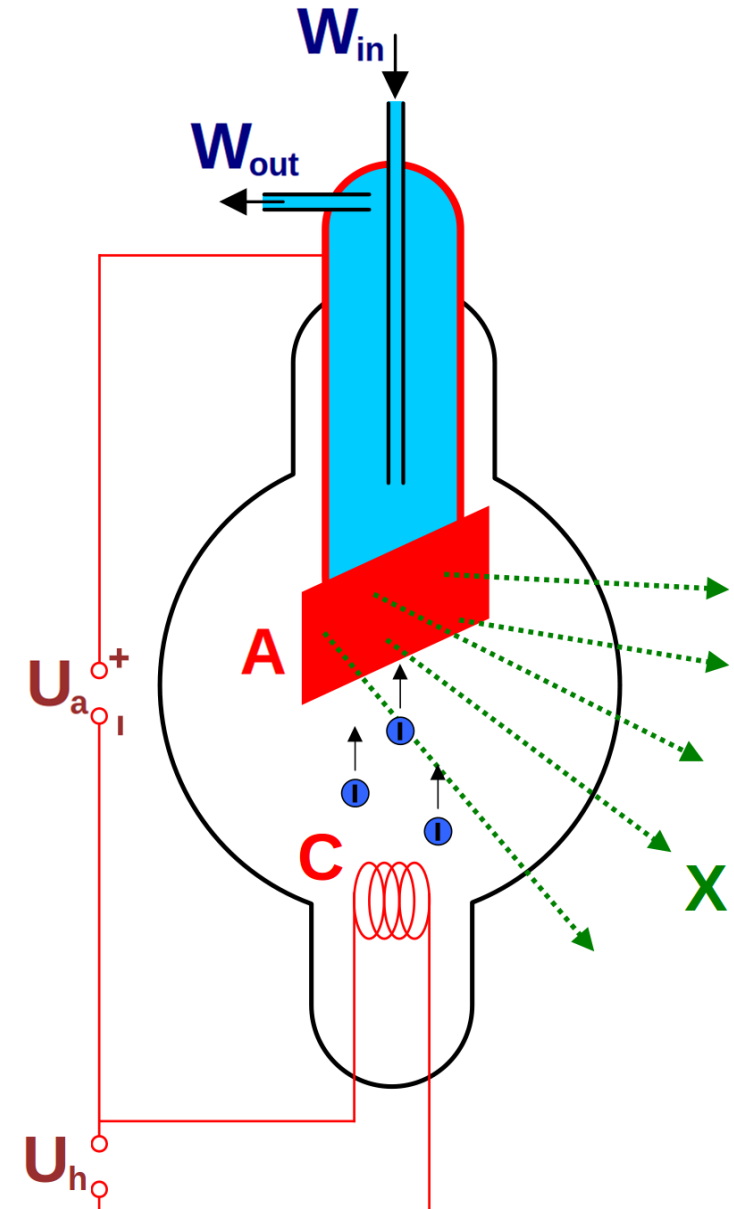
# Měření koherenční délky

- Michalsonův interferometr



# Rentgenové záření

- elektromagnetického záření o  $\lambda = 10 \text{ nm} - 1 \text{ pm}$
- lékařské vyšetření, krystalografie
- Rentgenka vytváří:
  - diskrétní, popř. charakteristické rentgenové záření
    - vysokoenergetické elektrony dopadající na anodu vyrážejí z atomů elektrony z vnitřních slupek
    - do vzniklých mezer pak „skáčou“ elektrony z vyšších energetických hladin nebo elektrony volné
    - vazební energie elektronů vnitřních slupek je vysoká - nevzniká viditelné světlo, ale charakteristické rentgenové záření s diskrétními kvantovanými energiemi, které jsou typické pro jednotlivé materiály.
  - brzdné rentgenové záření
    - vzniká zabrzděním elektronů při jejich pronikání kovovým materiálem anody
    - elektrický náboj pohybující se se zrychlením vytváří elektromagnetické záření. Vlnová délka závisí na velikosti zrychlení (zbrzdění)
    - při vyšším urychlovacím (anodovém) napětí vzniká tvrdší rentgenové záření



# Gama záření

- záření o energii fotonu nad 10 keV, což odpovídá vlnové délce kratší než 124 pm
- vysoce energetické elektromagnetické záření vznikající při radioaktivních a jiných jaderných a subjaderných dějích
  - Např. beta rozpad kobaltu-60  $^{60}\text{Co}$  na nikel-60  $^{60}\text{Ni}$ , při kterém v prvním stupni nejprve jádro kobaltu vyšle částici  $\beta$  (tedy elektron  $e^-$ ) a elektronové antineutrino  $\bar{\nu}_e$  a přemění se na jádro niklu v excitovaném stavu



- nově vzniklé excitované jádro zbaví přebytečné energie vyzáření kvanta záření gama

