Magneto-optikai spektrométer fejlesztése vastartalmú vérfehérjék vizsgálatára

Szakdolgozat

2010

Butykai Ádám

fizikus hallgató Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

tém avezető:

dr. Kézsmárki István egyetemi docens

BME Fizika Tanszék



Tartalomjegyzék

1.	Bevezetés				
	1.1. Történeti áttekintés	3			
	1.2. Vastartalmú vérfehérjék magneto-optikai vizsgálata	3			
2 .	A magneto-optikai spektroszkópia elméleti alapjai	5			
	2.1. Fény-anyag kölcsönhatás	5			
	2.2. Lineáris válaszelmélet	7			
	2.3. Maxwell egyenletek	10			
	2.4. Alkalmazott kísérleti technika	14			
3.	A spektrométer	19			
	3.1. A mérőrendszer felépítése	19			
	3.2. Kalibráció	22			
	3.2.1. A forgatás kalibrációja	22			
	3.2.2. Az ellipticitás kalibrációja	23			
4.	Mérési eredmények	25			
	4.1. Tesztmérések vízen és kvarcon	25			
	4.2. Ferritin oldatok abszorpciójának vizsgálata	27			
	4.3. A ferritin magneto-optikai forgatásának				
	és ellipticitásának vizsgálata	31			
5. Összefoglalás					
	5.1. Eredmények, következtetések	33			
Köszönetnyilvánítás					
Függelék					
Irodalomjegyzék					

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Történeti áttekintés

A fény és az elektromágnesség kapcsolatát alátámasztó első kísérleti megfigyelések egyike az ún. magneto-optikai (MO) forgatás jelensége, melyet Michael Faraday fedezett fel 1845-ben (mintegy 20 évvel a Maxwell-egyenletek megszületése előtt), és tiszteletére Faraday-effektusnak hívjuk. A jelenség lényege, hogy a lineárisan polarizált fény polarizációs síkja elfordul, ha mágnesezett közegen halad át. A polarizáció elfordulásának szöge a tapasztalat szerint arányos a rétegvastagsággal, valamint a mágnesezettségel. Ez a jelenség kiválóan alkalmas mágneses anyagok mágnesezettségének optikai vizsgálatára, mellyel információt szerezhetünk az anyag mikroszkopikus szerkezetéről, különös tekintettel az elektronszerkezetre.

A magneto-optikai spektroszkópia az utóbbi évtizedekben egyre elterjedtebb a biológiai, valamint orvosi diagnosztikában. A fő motivációt az jelenti, hogy a módszer lehetőséget kínál az emberi szervezetben is megtalálható vastartalmú vérfehérjék kimutatására és koncentrációjának mérésére. Ezen kísérleti területhez kapcsolódó célkitűzéseim túlmutatnak a jelen szakdolgozat keretein– és lehetőség szerint az itt megkezdett munka a későbbiekben folytatódni fog–, ezért az alábbiakban a kutatás kérdésfelvetéseit és távlati céljait foglalom össze.

1.2. Vastartalmú vérfehérjék magneto-optikai vizsgálatának lehetősége

Az emberi szervezet átlagosan 4-5g vasat tartalmaz. Ennek kb. 2/3-ad része a vörösvértestekben található, és mintegy 30% -a úgynevezett ferritin formájában raktározódik (a maradék például izomsejtekben, stb.). A ferritin tulajdonképpen egy fehérjeburok, mely maximum 4500 Fe^{3+} ion raktározására képes $[FeO(OH)]_8[FeO(H_2PO_4)]$ kristályok formájában [1, 2]. Ha a szervezetnek vashiánya van, a sejten belüli emésztési folyamat révén ezen globuláris fehérjéket lebontva képes vasat felszabadítani. A vashiányos vérszegénység diagnosztizálására bevált módszer a vér ferritintartalmának mérése.

A ferritinben tárolt vas paramágneses tulajdonságai miatt elméletileg kimutatható magneto-optikai eljárással is. A kutatás célja olyan magneto-optikai módszer kidolgozása, amely képes jó pontossággal meghatározni a ferritin koncentrációját a vérben, ezzel akár széles körben használható diagnosztikai eszköz fejlesztésére nyújtva lehetőséget.

További cél, hogy a koncentráció mérésén keresztül nyomon tudjuk követni a ferritin lebontásának folyamatát, és megpróbáljuk mikroszkopikusan is megérteni a vas megkötésének és felszabadításának mechanizmusát a szervezetben. Megválaszolatlan kérdés például, hogy a vas képes-e kis adagokban is kijutni/megkötődni a fehérjeburokból/fehérjeburokban, vagy a fehérjeburok eltávolításával az összes atom egyszerre szabadul fel. Többek között erre a kérdésre is választ nyújthat a magneto-optikai vizsgálat.

A világ sok országában ma is komoly problémát jelent a malária betegség, melynek diagnosztizálása, valamint kezelése csak drágán, laboratóriumi körülmények között lehetséges [3]. A fertőzés során a malária kórokozók megemésztik a hemoglobin fehérjeszerkezetének jelentős részét. A heme komponens a paraziták számára toxikus, ezért azt vízben oldhatatlan, rúdszerű kristályok formájában kicsapják a vérből. Ezen kristályokat nevezzük hemozoinnak, vagy közismertebb néven malária pigmentnek. A vérben található hemozoin koncentráció pozitív indikátora a fertőzésnek, és arányos annak előrehaladottságával. A diamágneses (Fe^{2+}) oxyhemoglobinból a paramágneses (Fe^{3+}) hemozoinná történő átalakulásból következő mágneses szuszceptibilitás megváltozása lehetőséget biztosíthat a hemozoin koncentráció magneto-optikai úton történő mérésére. Ezen lehetőséggel eddig mindössze egy tudományos közleményben foglalkoztak [3]. D.M. Newmann és szerzőtársai hemozoin vizes oldatában mágnesesen indukált anizotrópiára, és az ennek következtében fellépő lineáris kettőstörés alkalmazására hívják fel a figyelmet. Véleményük szerint a csekély mértékű mágneses lineáris kettőstörés (Cotton-Mouton effektus) az oldatbeli hemozoin tűkristályok mágneses térrel párhuzamos rendeződéséből adódik. Ugyanakkor a hemozoin paramágneses tulajdonsága lehetőséget adhat mágnesesen indukált cirkuláris kettőstörés vizsgálatára is (melynek egyik megnyilvánulása a Faraday-effektus). Újabb távlati célkitűzés tehát a ferritin vizsgálata mellett hemozoin porminták, illetve oldatok magneto-optikai spektrumának mérése különböző koncentrációk mellett.

A fenti példák jól illusztrálják, hogy komoly kutatási potenciállal bír egy ilyen célokra alkalmas mérőberendezés kifejlesztése. A munkám során részt vettem egy magneto-optikai spektrométer összeállításában, melynek pontossága eléri a kereskedelmi forgalomban kapható berendezésekét, és széles alkalmazhatósági területét tekintve megelőzi azokat. Ezen spektrométer ugyanis –mivel diszkrét optikai elemekből van összeállítva–, tetszőlegesen módosítható, az adott mérési feladathoz illesztve. A berendezés megépítése és kalibrálása után különböző tesztméréseket végeztem transzmissziós elrendezésben.

2. fejezet

A magneto-optikai spektroszkópia elméleti alapjai

2.1. Fény-anyag kölcsönhatás

Annak érdekében, hogy az anyag mikroszkopikus szerkezetéről információt szerezzünk, az őt leíró Hamilton-operátort vizsgálhatjuk. Az optikai anyagvizsgálatok során azt használjuk ki, hogy az anyag a fénnyel, mint elektromágneses hullámmal lép kölcsönhatásba, melyet a Hamilton-operátorban perturbációként kezelhetünk. Célunk, hogy a perturbációra adott válasz ismeretében visszakövetkeztessünk az eredeti, perturbálatlan rendszer Hamilton-operátorára, annak spektrumára és sajátállapotaira. Ennek érdekében tekintsük egy atomi elektron mozgását külső elektromágneses tér jelenlétében szemirelativisztikus esetben, azaz a Dirac-egyenletet v^2/c^2 rendig sorfejtve:

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}')^2 + e\Phi' + \frac{e^2}{4m^2c^2} \mathbf{S} \left[\nabla\Phi' \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A}')\right] - \frac{e}{2m} \mathbf{SB} - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} (\nabla^2\Phi'), \quad (2.1)$$

ahol \mathbf{A}' az egész rendszer vektorpotenciálja, $\mathbf{A}' = \mathbf{A}_{mag} + \mathbf{A}$, azaz az atommag mágneses vektorpotenciáljának (\mathbf{A}_{mag}) és a külső vektorpotenciálnak (\mathbf{A}) az összege. A mag vektorpotenciáljától a továbbiakban eltekintünk (mivel az általában nagyságrendekkel kisebb a külső vektorpotenciálnál). Φ' a teljes elektromos potenciál, $\Phi' = V + \Phi$, azaz az atomi (V) és a külső (Φ) potenciál összege. Szeparálva az egyenletet a perturbálatlan rendszer Hamilton operátorára és a külső potenciálokra (H_0 a perturbálatlan Hamilton, H_{SO} a spin-pálya kölcsönhatás, H_{EM} a fény-anyag kölcsönhatás):

$$H = H_0 + H_{SO} + H_{EM} (2.2)$$

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + eV(\mathbf{r}) - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \left(\nabla^2 V(\mathbf{r})\right)$$
(2.3)

$$H_{SO} = \frac{e}{4m^2c^2} \mathbf{S} \left(\nabla V \times \mathbf{p}\right) \tag{2.4}$$

$$H_{EM} = -\frac{e}{2m}(\mathbf{pA} + \mathbf{Ap}) + e\Phi + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}^2 - \frac{e^2}{4m^2c^2}\mathbf{S}(\nabla V \times \mathbf{A}) - \frac{e}{2m}\mathbf{SB}.$$
 (2.5)

A fenti leírásmód természetesen alkalmazható molekulák vagy kristályok elektronjainak tárgyalására is V megfelelő megválasztásával. A perturbáló Hamilton operátort célszerű multipól formára alakítani, azaz kifejezni, hogy hogyan hat a külső tér a töltésspin rendszer elektromos és mágneses momentumaira. A H_{EM} operátor utolsó előtti tagját elhagyhatjuk. Belátható ugyanis, hogy a mágneses dipól folyamatokhoz ad járulékot, ami az általunk vizsgált foton energia tartományban teljességgel elhanyagolható [4]. Az utolsó (Seemann) tagot, mivel az eleve multipól alakban van, a mágneses dipólmomentumhoz soroljuk majd. A következő (implitcit) mértékválasztást hajtjuk végre:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi^0 - r_\alpha (E_\alpha)^0 - \frac{1}{2} r_\alpha r_\beta (\partial_\beta E_\alpha)^0 + \cdots$$
(2.6)

$$A_{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (B_{\beta})^0 r_{\gamma} + \frac{1}{3} \varepsilon_{\alpha\gamma\delta} r_{\beta} (\partial_{\beta} B_{\gamma})^0 r_{\delta} + \cdots, \qquad (2.7)$$

ahol E^0_{α} a térerősség az origóban vett értékének α -adik komponense és $\partial_{\beta} E^0_{\alpha}$ a térerősség α -adik komponensének a helyvektor β -adik komponense szerinti deriváltjának értéke az origóban. Ugyanezen jelölések érvényesek a második egyenletben a **B** vektorra is, ahol az $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ a teljesen antiszimmetrikus Levi-Civita tenzor.

Belátható (a differenciálások elvégzésével), hogy ez egy kiköthető mértékfeltétel sztatikus, ill. dinamikus terekre egyaránt, amennyiben **E** és **B** Taylor sorba fejthető a hely függvényében. Feltételezzük továbbá, hogy ezen mennyiségek változása lassú a töltésrendszer skáláján ($\lambda \gg a$), azaz a sugárzási tér nem ad át lényeges impulzust az anyagnak, ami igaz is az általunk vizsgált közeli infravöröstől a gyenge UV-ig terjedő tartományon. Ezen feltételezésekkel:

$$E_{\alpha}(\mathbf{r}) = (E_{\alpha})^{0} + r_{\beta}(\partial_{\beta}E_{\alpha})^{0} + \cdots, \qquad (2.8)$$

$$B_{\alpha}(\mathbf{r}) = (B_{\alpha})^{0} + r_{\beta}(\partial_{\beta}B_{\alpha})^{0} + \cdots .$$
(2.9)

A (2.6)-(2.7)-ben szereplő két potenciált beírva a H_{EM} operátorba, az ún. dinamikus multipól formát kapjuk:

$$H_{EM} = q(\Phi)^0 - p_\alpha(E_\alpha)^0 - \frac{1}{3}\Theta_{\alpha\beta}(\partial_\alpha E_\beta)^0 - m_\alpha(B_\alpha)^0 + \cdots$$
(2.10)

Ahol:

- $q = \sum_i e_i$ az össztöltés,
- $p_{\alpha} = \sum_{i} e_{i} r_{i\alpha}$ az elektromos dipól operátor,
- $\Theta_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \sum_{i} e_i (3r_{i\alpha}r_{i\beta} r_i^2 \delta_{\alpha\beta})$ az elektromos kvadrupól operátor,
- $m_{\alpha} = \sum_{i} \frac{e_i}{2m_i} (l_{i\alpha} + g_i S_{i\alpha})$ a mágneses dipól operátor.

Ezen multipól operátorok mátrixelemei szerepelnek az egyes szuszceptibilitások kifejezésében, melyekre kíváncsiak vagyunk. A szuszceptibilitás-tenzorok elemeinek mikroszkopikus mennyiségekből való származtatásáról a lineáris válaszelmélet keretein belül kapunk információt. A rendszer szimmetriái által nem megengedett (zérus) elemeket pedig a Neumann-elv segítségével fogjuk meghatározni.

2.2. Lineáris válaszelmélet

Tekintsük egy általános rendszer egyensúlyi Hamilton operátorát, és kapcsoljunk rá egy időfüggő h(t) klasszikus külső teret, ami a B operátorral leírt mennyiségre hat. Ekkor a perturbálatlan Hamilton operátor a következőképpen módosul:

$$\hat{H} \to \hat{H} - h(t)\hat{B}.$$
(2.11)

A rendszer válaszát, azaz egy tetszőleges fizikai mennyiséget reprezentáló operátor megváltozását a következőképpen írhatjuk fel, ezzel definiálva a rendszer általános szuszceptibilitását:

$$\delta A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau \chi_{AB}(t-\tau)h(\tau). \qquad (2.12)$$

A Kubo-formula értelmében a $\chi_{AB}(t-\tau)$ időfüggő válasz a következőképp számolható [5]:

$$\chi_{AB}(t-\tau) = \frac{i}{\hbar} \left\langle \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{B}(\tau) \right] \right\rangle \right\rangle_0 \Theta(t-\tau).$$
(2.13)

A belső zárójel itt a kvantummechanikai időátlagot, a külső pedig a rendszer egyensúlyi helyzetében vett termodinamikai sokaságátlagot jelenti. Látható tehát, hogy a lineáris választ pusztán a perturbálatlan rendszer paraméterei határozzák meg, vagyis a válaszból következtetni lehet a rendszer egyensúlyi paramétereire. A fentiek értelmében egy ω frekvenciájú gerjesztés esetén a szuszceptibilitást a rendszer energia sajátállapotainak bázisában ($H_0 | n \rangle = E_n | n \rangle$) a következő képlet adja meg:

$$\chi_{BA}(Z) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}, \frac{\langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle}{Z - \omega_{mn}}$$
(2.14)

ahol $Z = \omega + i\delta$ és δ egy infinitezimálisan kis pozitív valós szám, amely a kauzalitási feltételből származik, és a külső tér adiabatikus bekapcsolását jelenti, $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$ valamint szerint: $E_m - E_n \equiv \hbar \omega_{mn}$

Ezen kifejezés aT=0limeszben a következő alakra egyszerűsödik:

$$\chi_{BA}(Z) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{m} \frac{\omega_{nm} \mathcal{R}e\left\{\langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle\right\} + iZ\mathcal{I}m\left\{\langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle\right\}}{Z^2 - \omega_{nm}^2}, \quad (2.15)$$

melyet célszerűen két olyan tagra bonthatunk, amelyek (mint látni fogjuk) az időtükrözési operációra különbözőképpen viselkednek:

$$\chi'_{BA}(Z) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{m} \frac{\omega_{nm} Re\left\{ \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \right\}}{Z^2 - \omega_{nm}^2}, \qquad (2.16)$$

$$\chi_{BA}''(Z) = -\frac{2}{\hbar} \sum_{m} \frac{ZIm\left\{\langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle\right\}}{Z^2 - \omega_{nm}^2}.$$
(2.17)

A (2.15)-ből következik, hogy:

$$\chi_{BA} = \chi'_{BA} + i\chi''_{BA}, \tag{2.18}$$

$$\chi_{AB} = \chi'_{BA} - i\chi''_{BA}.$$
 (2.19)

Legyenek most A és B ugyanazon vektoroperátor komponensei. Ekkor a következő relációkhoz jutunk:

$$\chi'_{AiAj}(Z) = \chi'_{AjAi}(Z), \qquad (2.20)$$

$$\chi''_{AiAj}(Z) = -\chi''_{AjAi}(Z).$$
(2.21)

Tehát egy ilyen szuszceptibilitás-tenzorban a (2.20) tag indexcserére szimmetrikus, a (2.21) tag antiszimmetrikus. Vizsgáljuk most az operátorok szimmetriáit időtükrözésre :

$$A \xrightarrow{T} \tilde{A} = \varepsilon_A A.$$

Vannak időtükrözésre szimmetrikus ($\varepsilon_A = 1$) és antiszimmetrikus ($\varepsilon_A = \pm 1$) operátorok. Ezt alkalmazva a Kubo-formulában megjelenő tetszőleges operátorra:

$$\chi_{AB}(Z, \mathbf{M}) = \varepsilon_A \varepsilon_B \chi_{BA}(Z, -\mathbf{M}), \qquad (2.22)$$

ahol M az anyag mágnesezettség sűrűsége.

A mágnesezettségtől való függést explicit módon jelezve (2.18) és (2.19) felhasználásával a következőt kapjuk:

$$\chi'_{BA}(Z, \mathbf{M}) = \varepsilon_A \varepsilon_B \chi'_{BA}(Z, -\mathbf{M}), \qquad (2.23)$$

$$\chi_{BA}^{\prime\prime}(Z,\mathbf{M}) = -\varepsilon_A \varepsilon_B \chi_{BA}^{\prime\prime}(Z,-\mathbf{M}).$$
(2.24)

Itt látható, hogy χ'_{BA} és χ''_{BA} időtükrözésre eltérő módon viselkedik. Speciálisan egy vektoroperátor komponenseire (azaz A=B):

$$\chi'_{A_iA_j}(Z, \mathbf{M}) = \chi'_{A_iA_j}(Z, -\mathbf{M}),$$
(2.25)

$$\chi_{A_iA_j}''(Z, \mathbf{M}) = -\chi_{A_iA_j}''(Z, -\mathbf{M}).$$
(2.26)

Tehát a szimmetrikus rész térben páros, az antiszimmetrikus térben páratlan. Világos, hogy ha a rendszernek van időtükrözési szimmetriája ($\mathbf{B} = 0$), akkor az antiszimmetrikus tagok eltűnnek. Ezen információk figyelembe vételével megkonstruálható tetszőleges lineáris válasz esetén az általános szuszceptibilitás tenzora, melyet a rendszer további szimmetriáinak tekintetében tovább egyszerűsíthetünk. Alkalmazzuk a lineáris válaszelmélet eredményeit a fény-anyag kölcsönhatást kifejező, multipól formában (2.10)ben felírt Hamilton-operátorra. A számunkra fontos esetben (hosszú hullámhosszú határeset) az elektromos és mágneses dipól gerjesztéseket leíró szuszceptibilitás tenzorok kielégítő leírását adják a fény-anyag kölcsönhatásnak és az alábbi mátrixelemekkel fejezhetők ki:

$$\varepsilon_{ij} = 1 + 4\pi \chi_{ij}^e = 1 - \frac{8\pi}{\hbar} \sum_m \frac{\omega_{nm} \mathcal{R}e\left\{\langle n|p_j|m\rangle \langle m|p_i|n\rangle\right\} + iZ\mathcal{I}m\left\{\langle n|p_j|m\rangle \langle m|p_i|n\rangle\right\}}{Z^2 - \omega_{nm}^2},$$

$$\mu_{ij} = 1 + 4\pi \chi_{ij}^m = 1 - \frac{8\pi}{\hbar} \sum_m \frac{\omega_{nm} \mathcal{R}e\left\{\langle n|\mu_j|m\rangle \langle m|\mu_i|n\rangle\right\} + iZ\mathcal{I}m\left\{\langle n|\mu_j|m\rangle \langle m|\mu_i|n\rangle\right\}}{Z^2 - \omega_{nm}^2},$$

$$(2.27)$$

$$(2.28)$$

ahol $\hat{\varepsilon}$ a dielektromos permittivitás tenzor, $\hat{\mu}$ pedig a mágneses permeábilitás tenzor. Az előzőek alapján például a dielektromos tenzor a következő általános alakban írható:

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} & \varepsilon'_{xy} + \varepsilon''_{xy} & \varepsilon'_{xz} + \varepsilon''_{xz} \\ \varepsilon'_{xy} - \varepsilon''_{xy} & \varepsilon'_{yy} & \varepsilon'_{yz} + \varepsilon''_{yz} \\ \varepsilon'_{xz} - \varepsilon''_{xz} & \varepsilon'_{yz} - \varepsilon''_{yz} & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix}.$$
(2.29)

Tekintsünk most egy izotróp közeget, és kapcsoljunk be egy z tengely irányú mágneses teret. A rendszer szimmetriái a következők:

- $m'_{\parallel}:$ B-vel párhuzamos normálisú síkra való tükrözés+időtükrözés
- m_{\perp} : **B**-re merőleges normálisú síkokra való tükrözés
- $C_{\infty}^{z}:$ **B**-vel párhuzamos tengely körüli tetszőleges szöggel történő forgatás
- i : inverzió

A Neumann-elv figyelembe vételével a megfelelő szimmetriák alapján az alábbi megállapítások tehetők a tenzor komponenseire:

2)
$$\rightarrow \varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx}; \varepsilon_{yz} = -\varepsilon_{zy}; \varepsilon_{xz} = -\varepsilon_{zx} \rightarrow \varepsilon'_{xy} = \varepsilon'_{xz} = \varepsilon'_{yz} = 0$$
,

$$3) \to \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}; \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{xz} = 0.$$

A többi szimmetriából nem nyerünk további megszorítást a tenzor elemeire. A dielektromos tenzor alakja tehát z irányú mágneses térben:

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} & \varepsilon''_{xy} & 0\\ -\varepsilon''_{xy} & \varepsilon'_{xx} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix}.$$
(2.30)

Látható, hogy az antiszimmetrikus, nem-diagonális elemek megjelenéséért a mágneses tér felelős, hiszen $\mathbf{B} = 0$ mellett ezen tagok eltűnnek (lásd: (2.25),(2.26)). Bár $\hat{\mu} = 1 + 4\pi \hat{\chi}^m$ is ugyanilyen szerkezetű, a továbbiakban –mivel az anyagban az általunk vizsgált energiatartományban mágneses gerjesztés nem lép fel, azaz $\hat{\mu} = 1$ –, csak az elektromos dipólfolyamatok hatását tekintjük, azaz a dielektromos tenzort vizsgáljuk, a többi szuszceptibilitás-tenzor minden elemét zérusnak véve.

2.3. Makroszkópikus jelenségek, a Maxwell egyenletek megoldása

A magneto-optika koncepciója akkor használható az vizsgált anyag szerkezetének megismerésére, ha az elméleti eredményekből valamily mérhető mennyiségekre tudunk következtetni. Erre a fényterjedést leíró Maxwell-egyenletek biztosítanak lehetőséget. Tekintsük azt az esetet, amikor a fény a mágneses térrel páruzamos irányban terjed, és keresztülhalad az anyagon, vagy visszaverődik a vákuum-anyag határfelületen. A terjedés során az elektromos térerősség vektor változását követjük nyomon. A Maxwell-egyenletek szabad töltések nélkül (optikai frekvenciákra) CGS egységrendszerben:

$$\nabla \mathbf{D} = 0 \tag{2.31}$$

$$\nabla \mathbf{B} = 0 \tag{2.32}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \tag{2.33}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t},\tag{2.34}$$

ahol az anyag-egyenletek formája (2.27) és (2.28) szerint:

$$\mathbf{B} = (1 + 4\pi\hat{\chi}^m)\mathbf{H} = \hat{\mu}\mathbf{H} = \mathbf{H}$$
(2.35)

$$\mathbf{D} = (1 + 4\pi\hat{\chi}^e)\mathbf{E} = \hat{\varepsilon}\mathbf{E}.$$
(2.36)

Keressük a Maxwell-egyenletek megoldását az alábbi, síkhullám alakban:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\mathbf{0}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$
(2.37)

Vegyük a második Maxwell-egyenlet rotációját, és helyettesítsük be a negyedik egyenletetbe:

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = -\frac{\omega^2}{c^2} \hat{\mu} \hat{\varepsilon} \mathbf{E} \to \mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{E} + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\mu} \hat{\varepsilon} \mathbf{E} = 0$$
(2.38)

Ekkor egy sajátérték-egyenletet kapunk a térerősség vektorra. $\hat{\mu} = 1$ -et tekintve, keressük a megoldást a transzverzális elektromos térerősségvektorok alterén ($\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$). Ekkor a (2.38) sajátértékegyenlet a következő formára egyszerűsödik:

$$\hat{\varepsilon}\mathbf{E} = \frac{k^2}{\omega^2} c^2 \mathbf{E} \equiv n^2 \mathbf{E}.$$
(2.39)

Az egyenlet sajátértékei a komplex törésmutató négyzetét adják. A transzverzális módusok alterén a rezgések sajátállapotait, valamint az ezekhez tartozó komplex törésmutatókat a dielektromos tenzor diagonalizálásával keressük:

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{xx} + i\varepsilon''_{xy} & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon'_{xx} - i\varepsilon''_{xy} & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon'_{zz} \end{pmatrix}.$$
(2.40)

A sztatikus mágneses térrel párhuzamosan, azaz a z irányban terjedő fény esetén a komplex polarizációs sajátvektorok:

$$\mathbf{E}_{\mathbf{0}}^{+} = \begin{pmatrix} 1\\i\\0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}_{\mathbf{0}}^{-} = \begin{pmatrix} 1\\-i\\0 \end{pmatrix}.$$
(2.41)

Azaz a két sajátállapot a jobbra és a balra cirkulárisan polarizált fényhullám. Az egyes állapotokhoz tartozó komplex törésmutató:

$$\tilde{n}_{\pm} = \sqrt{\varepsilon_{\pm}},\tag{2.42}$$

ahol $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon'_{xx} \pm i \varepsilon''_{xy}$.

Ez adja a cirkuláris kettőstörés jelenségének magyarázatát. Látható, hogy az effektus oka a dielektromos tenzorban a mágneses térben páratlan, nem-diagonális elemek megjelenése, melyek az időtükrözési szimmetria sérülésének következményei. Az ε'_{xx} és ε'_{zz} diagonális elemek különbözősége – amely az anyag mágnesesen indukált anizotrópiájából következik–, felelős a lineáris kettőstörésért, amit Voigt konfigurációban ($\mathbf{k} \perp \mathbf{B}_{dc}$) megfigyeletünk. A két jelenség (mágneses cirkuláris és lineáris kettőstörés) közti különbség a mágneses térben való szimmetriában rejlik. A diagonális elemek (2.30)-ban ugyanis a tér megfordítására érzéketlenek, annak páros függvényei, míg a nem-diagonális elemek előjelet váltanak. Ez a különbség alkalmas a két effektus elkülönítésére, ha az anyagban megfordítjuk a mágnesezettséget, és a mért paraméterek különbségét (antiszimmetrikus rész), ill. átlagát (szimmetrikus rész) vesszük.

Egy kettőstörő anyag felületéről visszaverődő, illetve azon áthaladó hullám polarizációállapota megváltozik. Az egyes térerősség-komponensek transzmittált, ill. reflektált értékeit a Fresnel-formulák segítségével számítjuk, így merőleges beesés esetén:

$$\tilde{r}_{\pm} = \frac{1 - \tilde{n}_{\pm}}{1 + \tilde{n}_{\pm}}, \quad \tilde{t}_{\pm} = \frac{2\tilde{n}_{\pm}}{1 + \tilde{n}_{\pm}}.$$
(2.43)

Másrészt egy véges vastagságú anyagon áteresztett fény intenzitása az anyagban végbemenő abszorpció révén exponenciálisan csökken. Ennek megfelelően a hullám amplitúdója és fázisa *d* rétegvastagságon áthaladva a következőképpen módosul:

$$\tilde{a}_{\pm} = e^{i\tilde{n}_{\pm}kd} = e^{-Im\{\tilde{n}_{\pm}\}\frac{\omega}{c}d} e^{iRe\{\tilde{n}_{\pm}\}\frac{\omega}{c}d}, \qquad (2.44)$$

ahol a törésmutató képzetes/valós része felelős az amplitúdó/fázis megváltozásáért.

Ha tehát a vizsgált anyagra lineárisan polarizált fény esik, mely a két cirkuláris komponens egyenlő arányú keveréke, azon áthaladva (vagy visszaverődve) a fény polarizációs állapota megváltozik. Ezt hívjuk komplex magneto-optikai forgatásnak, melyet két paraméterrel tudunk jellemezni, a forgatással és ellipticitással. A polarizációs sík Θ elfordulása a két térerősség komponens fáziskülönbségével arányos, $\Theta = \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} dRe\{\tilde{n}_{+} - \tilde{n}_{-}\},$ míg az η ellipticitás az amplitúdók arányát fejezi ki, azaz $\eta = \frac{1}{2} \frac{\omega}{c} dIm\{\tilde{n}_{+} - \tilde{n}_{-}\}$. Mivel a komplex törésmutató a rendszer optikai gerjesztésre adott lineáris válaszát jellemző kauzális válaszfüggvény (ugyanez igaz a polarizációs sajátállapotokra definiált \tilde{n}_{+} és \tilde{n}_{-} sajátértékekre is), így annak képzetes és valós része között, és ezért a magneto-optikai forgatás és ellipticitás között is fennáll a Kramers-Kronig reláció:

$$\eta(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathbb{P} \int \frac{\Theta(\omega')}{\omega - \omega'} d\omega'$$
(2.45)

A (2.44) egyenlet segítségével a fenti definíciók alapján kifejezve a forgatást és ellipticitást a fénynek mágneses anyagban való terjedése esetén:

$$\Theta = \frac{\operatorname{arc}(\tilde{a}_{+}) - \operatorname{arc}(\tilde{a}_{-})}{2} \tag{2.46}$$

$$\eta = \frac{1}{2} (ln(|\tilde{a}_{+}|) - ln(|\tilde{a}_{-}|)) \approx \frac{|\tilde{a}_{+}| - |\tilde{a}_{-}|}{|\tilde{a}_{+}| + |\tilde{a}_{-}|} \approx \frac{|\tilde{a}_{+}|^{2} - |\tilde{a}_{-}|^{2}}{2(|\tilde{a}_{+}|^{2} + |\tilde{a}_{-}|^{2})} \equiv \frac{\Delta A}{A},$$
(2.47)

ahol az ellipticitás kifejezésében a közelítő formulában a $\frac{|\tilde{a}_{+}|-|\tilde{a}_{-}|}{|\tilde{a}_{+}|+|\tilde{a}_{-}|} << 1$ feltevéssel éltünk.

Amikor transzmisszióban vizsgálunk egy átlátszó anyagot, csak forgatást tapasztalunk és Faraday-effektusról beszélünk. Ekkor csak a két cirkuláris komponens relatív fázisa változik (lásd: (2.46)). Amennyiben az anyagban abszorpció is fellép, úgy η sem zérus, amit az irodalomban cikuláris dikroizmusnak hívnak. Ez (2.47) szerint a két cirkuláris állapot intenzitásában kialakuló különbséget jelenti. Láttuk, hogy a Faraday-effektusért is az időtükrözési szimmetriasértés, azaz a külső mágneses tér a felelős. Az anyagok (ν) Verdet-konstansát, azaz az egységnyi mágneses térben egységnyi úton kialakuló forgatást a következő egyenlet definiálja:

$$\Theta = \nu B d, \tag{2.48}$$

ahol B a mágneses indukció és d a fény által az anyagban megtett úthossz.

Ugyanezen megállapítások megtehetők reflexiós elrendezés esetén is, ekkor magnetooptikai Kerr forgatásról és ellipticitásról beszélünk:

$$\Theta = \frac{\operatorname{arc}(\tilde{r}_{+}) - \operatorname{arc}(\tilde{r}_{-})}{2}, \qquad (2.49)$$

$$\eta = \frac{1}{2} (ln(|\tilde{r}_{+}|) - ln(|\tilde{r}_{-}|)) \approx \frac{|\tilde{r}_{+}| - |\tilde{r}_{-}|}{|\tilde{r}_{+}| + |\tilde{r}_{-}|} \approx \frac{|\tilde{r}_{+}|^{2} - |\tilde{r}_{-}|^{2}}{2(|\tilde{r}_{+}|^{2} + |\tilde{r}_{-}|^{2})}.$$
(2.50)

A Θ és η paraméterek jelentését a 2.2 ábra szemlélteti reflexiós geometriában.



2.1. ábra. Faraday-effektus. Optikailag átlátszó anyagon áthaladó lineárisan polarizált fény polarizációs síkja a külső mágneses indukcióval (vagy az anyag mágnesezettségével) és az anyagban megtett úthosszal arányosan elfordul.



2.2. ábra. Magneto-optikai Kerr-effektus. A lineárisan poláros fény mágnesezett anyag felületéről visszaverődve elliptikusan polárossá válik, hiszen a cirkuláris kettőstörés és dikroizmus a két cirkuláris állapot relatív fázisának és intenzitásának megváltozását eredményezi.

 Θ a polarizációs ellipszis nagytengelyének elfordulása a bejövő lineárisan polarizált fény polarizációs síkjához képest, η pedig ezen ellipszis kis- és nagytengelyének aránya ($\eta \approx \frac{|\tilde{r}_+|-|\tilde{r}_-|}{|\tilde{r}_+|+|\tilde{r}_-|}).$

Látjuk tehát, hogy az anyag mikroszkopikus tulajdonságait jellemző multipól mátrixelemek a lineáris válaszelmélet és a Neumann elv segítségével mérhető mennyiségekre vezet- hetők vissza. Célunk tehát ezen mennyiségek minél pontosabb kísérleti meghatározása.

2.4. Alkalmazott kísérleti technika: komplex magnetooptikai forgatás mérése fotoelasztikus modulátorral

Egy fénynyalábot keresztezett polarizátorokon áteresztve, az elrendezés mögött elhelyezett detektor zérus intenzitást mér. Ha a polarizátorok közé olyan anyagot teszünk, amely megváltoztatja a fény polarizációs állapotát, a térerősségnek lesz a második polarizátorral (analizátorral) párhuzamos komponense, így a fény egy része eljut a detektorba. Elvileg az analizátor forgatásával meghatározható lenne a polarizáció megváltozása, így pl. mágneses anyagok esetén a magneto-optikai forgatás és ellipticitás. A gyakorlatban azonban az anyagok magneto-optikai forgatása és ellipticitása kicsi, tipikusan $0,001 - 1^{\circ}$ között változik, melyet nem tudunk kellő pontossággal megmérni az analizátor helyzetének mechanikus változtatásával.

Egy jóval érzékenyebb eljárás, ha a mintára eső fény polarizációját periodikusan moduláljuk, és a detektor jelében a forgatás és ellipticitás által generált harmonikust mérjük. Ezt például egy fotoelasztikus modulátorral (továbbiakban PEM) érhetjük el [6]. A PEM egy nagy mértékben izotróp kristály, melyben egy hozzá kapcsolt, elektromosan vezérelhető piezo-kristály által egy kitüntetett irányban periodikus deformációt hozunk létre. Az íly módon anizotróppá váló kristály, mely a kívánt foton energiatartományban átlátszó, lineáris kettőstörést (fázistolást) mutat, mely az időben periodikusan változik. Az eredmény, hogy a PEM-ből kijutó fény polarizációját periodikusan kapcsolgathatjuk. Amennyiben az eszközre érkező lineárisan polarizált fény polarizációs síkja az optikai tengelyekkel 45°-ot zár be, és a két lineáris komponens közti fázistolás amplitúdója $\frac{\pi}{2}$, ahogy ezt a 2.3 ábra szemlélteti, úgy éppen a számunkra fontos két cirkuláris polarizációs) tényezője különböző, így azt várjuk, hogy a PEM frekvenciájának alap és magasabb harmonikusain észlelhetjük a mérendő MO paramétereket a mért fény intenzitásában (lásd 2.3 ábra). A PEM-el történő mérésekhez az 2.4 ábrán látható elrendezést alkalmazhatjuk.

A fényúton végighaladva kövessük nyomon a fény polarizációjának megváltozását. A



2.3. ábra. A kísérletben alkalmazott fotoelasztikus modulátor, illetve az optikai tengelyekkel párhuzamos lineárisan polarizált komponensek fázisviszonyai a modulációs frekvencia egy periódusára.



2.4. ábra. A polarizáció modulációs elven működő magneto-optikai forgatás mérésének elvi vázlata.

PEM által létrehozott polarizáció változás Jones-mátrixa a következő:

$$\left(\begin{array}{cc}1&0\\0&e^{i\Phi}\end{array}\right).$$
(2.51)

A minta Jones-mátrixa cirkuláris bázisból lineáris bázisba történő transzformációt követően:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ i & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ e^{i\Theta_+} & 0\\ 0 & r_- e^{i\Theta_-} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i\\ i & i \end{pmatrix}$$
(2.52)

Az α szögben elhelyezett analizátorra eső térerősség vetületet a (cos α sin α) vektorral való skalárszorzással kapjuk meg:

$$\mathbf{E} = E_0 \left(\cos(\alpha) \sin(\alpha) \right) \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ i & -i \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} a_+ e^{i\Theta_+} & 0 \\ 0 & a_- e^{i\Theta_-} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 1 & -i \\ 1 & i \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\Phi} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 1 \\ 1 \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} 1 \\ 2.53 \end{array} \right)$$

A detektor által mért intenzitást a térerősség abszolútérték-négyzetének időátlagának kiszámításával kapjuk a másodrendben kis mennyiségek elhanyagolása mellett (a detektor nem képes követni a fény rezgési frekvenciáját, ezért gyakorlatilag időátlagot mér):

$$I = \frac{1}{4\pi} \overline{\mathbf{E}^* \mathbf{E}} = 4A[1 + 2\eta \sin \Phi + \sin (2\alpha - 2\Theta) \cos \Phi], \qquad (2.54)$$

ahol $A = \frac{1}{2}(|a_+|^2 + |a_-|^2).$

Ha a PEM-en nagyfrekvenciás harmonikus váltóáramot folyatunk keresztül, a mágneses tér és ezzel együtt a forgatás szöge is szinuszosan váltakozik:

$$\Phi(t) = \Phi_0 \sin 2\pi f t. \tag{2.55}$$

A szögfüggvények argumentumában megjelenő harmonikus időfüggés a J_i Bessel-függvények szerint Fourier-sorba fejthető:

$$\sin(\Phi_0 \sin 2\pi f t) = 2J_1(\Phi_0) \sin 2\pi f t + \cdots, \qquad (2.56)$$

$$\cos(\Phi_0 \sin 2\pi f t) = J_0(\Phi_0) + 2J_2(\Phi_0) \sin 4\pi f t + \cdots .$$
(2.57)



2.5. ábra. Bessel-függvények: Kék: J_0 ; piros: J_1 ; szaggatott: J_2 .

Az érzékelt intenzitás ezek alapján időfüggés szerint az alábbi dc, 1f és 2f komponensekre bontható:

$$I_{dc} = 4R[1 + 2(\alpha - \Theta_k)J_0(\Phi_0)]c_0$$
(2.58)

$$I_f = 4R[4\eta_K J_1(\Phi_0)]c_f \tag{2.59}$$

$$I_{2f} = 4R[4(\alpha - \Theta_k)J_2(\Phi_0)]c_{2f}$$
(2.60)

A dc komponens a PEM megfelelő amplitúdójának beállításával A J_0 Bessel-függvény zérushelyén (lásd 2.5 ábra) konstansnak választható. Ha az 1f, illetve a 2f komponenst normáljuk a dc intenzitással, akkor az egyes optikai elemekből származó intenzitáscsökkenések, valamint a fényforrás intenzitásbeli ingadozásai miatti korrekciót kiküszöböljük. A következő mennyiségek mérésére van tehát szükség:

$$\frac{I_f}{I_{dc}} \approx \frac{c_f}{c_0} 4 J_1(\Phi_0) \eta \tag{2.61}$$

$$\frac{I_{2f}}{I_{dc}} \approx -\frac{c_{2f}}{c_0} 4J_2(\Phi_0)(\alpha - \Theta)$$
(2.62)

Látható, hogy a várakozásoknak megfelelően a Kerr-ellipticitás a PEM modulációs frekvenciájával oszcilláló intenzitáskomponensben, a forgatás pedig a kétszeres frekvenciájú komponensben jelenik meg. Ezen jeleket két Lock-in erősítővel párhuzamosan mérhetjük, és az arányossági tényezők ismeretében közvetlenül megkapjuk a keresett mennyiségeket.

Az arányossági tényezők meghatározása a kalibráció feladata [7]. Ehhez kihasználjuk, hogy a (2.62) egyenletben a minta forgatása, és az analizátor szöge ekvivalens szerepet tölt be (egy előjel különbséggel). Az analizátor forgatása tehát alkalmas a kalibráció elvégzésére minden foton energián. A különböző hullámhosszakon történő kalibrálásra azért van szükség, mert a PEM fázistolásának amplitúdója a foton energia növelésével csökkenhet, így a kalibrációs együttható hullámhosszfüggő lehet.

Elképzelhető, hogy a PEM mellett a fényútban másik lineárisan kettőstörő (fázistoló) elem is megjelenik (például a nem merőleges beesés, illetve a lencsékben lévő feszültség révén), mely a mágneses térben szimmetrikus alapvonalat ad az intenzitás kifejezésében. Ahhoz tehát, hogy az együtthatót valóban pontosan kapjuk meg, ki kell küszöbölni a szimmetrikus tagokat. Ezért a (2.62)-ben szereplő mennyiséget az analizátor $+\alpha$ és $-\alpha$ szögénél egyaránt megmérjük, majd antiszimmetrizálunk:

$$4\frac{c_{2f}}{c_0}J_2(\Phi_0) = \frac{[I_f/I_{dc}]_{+\alpha} - [I_f/I_{dc}]_{-\alpha}}{2\alpha}.$$
(2.63)

Ez alatt a minta Θ magneto-optikai forgatása nem változik, ezért az analizátor szögére való antiszimmetrizálás során kiesik.

Az ellipticitás kalibrálásához a fényútba a PEM után egy fázistoló lemezt helyezünk. Ekkor a PEM által történő fázistoláshoz hozzáadódik a lineárisan kettőstörő lemez fázistolása (Φ_{λ}), mely szintén hullámhossz függő:

$$\Phi_{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda} ln, \qquad (2.64)$$

ahol l a lemez vastagsága, n a törésmutatója.

Ha most (2.54)-ben kicseréljük a Φ -t $\Phi_{\lambda} + \Phi_0 \sin(2\pi ft)$ -re, az addíciós tételek felhasználásával a három intenzitás komponensre a következő kifejezések adódnak:

$$I_{dc} = 4A[1 + 2\eta \sin \Phi_{\lambda} J_0(\Phi_0) - \sin (2\alpha - 2\Theta) \cos \Phi_{\lambda} J_0(\Phi_0)]$$

$$(2.65)$$

$$I_f = 4A[4\eta\cos\Phi_\lambda J_1(\Phi_0) - 2\sin(2\alpha - 2\Theta)\sin\Phi_\lambda J_1(\Phi_0)]$$
(2.66)

$$I_{2f} = 4A[4\eta\sin\Phi_{\lambda}J_2(\Phi_0) - 2\sin\left(2\alpha - 2\Theta\right)\cos\Phi_{\lambda}J_2(\Phi_0)]$$
(2.67)

Látható, hogy az egyes komponensekben mindkét Kerr-paraméter megjelenik, azonban az (2.66) egyenletben a keresett kalibrációs konstans az analizátor szögére antiszimmetrikus, azaz:

$$\frac{I_f}{I_{dc}} \approx 4 \frac{c_f}{c_0} J_1(\Phi_0) (\Theta_K - \alpha) \sin \Phi_\lambda.$$
(2.68)

Ha tehát változtatjuk a foton frekvenciáját, a lemez fázistolása $\pi/2$ és $-\pi/2$ között oszcillál (a lemez vastagsága 1mm, azaz az optikai hullámhosszaknak legalább 1000-szerese). Ekkor (2.68) szerint egy adott analizátor állásnál a foton frekvencia függvényében az intenzitás oszcillál. Ha ezen görbe minimum- és maximumhelyeit megkeressük, a szélsőértékek abszolútértékének burkolója adja az ellipticitás kifejezésében (2.61) szereplő kalibrációs konstans frekvenciafüggését. Itt szintén elvégezzük a forgatás kalibrációjánál végrehajtott antiszimmetrizáló eljárást (az analizátor $-\alpha$ állása mellett újra felvéve a görbét):

$$4\frac{c_f}{c_0}J_1(\Phi_0) = \frac{[I_f/I_{dc}]_{+\alpha} - [I_f/I_{dc}]_{-\alpha}}{2\alpha}.$$
(2.69)

A magneto-optikai forgatás mérésében az alkalmazott mágneses tér megfordításával a térbeni antiszimmetrizálást szintén elvégezhetjük, hiszen a magneto-optika forgatás és ellipticitás páratlan függvényei a külső térnek (2.26), így tisztán a mágneses minta által létrehozott polarizáció változást kapjuk.

A föntebb transzmissziós geometriára tárgyalt méréstechnika természetesen reflexiós mérések esetén is használató.

3. fejezet

A spektrométer

3.1. A mérőrendszer felépítése

A bevezetőben ismertetett célok érdekében belefogtam egy polarizáció modulációs elven működő magneto-optikai spektrométer építésébe, amely lehetőség szerint a $\lambda = 300 - 1300$ hullámhossztartományban használható. A megvalósult optikai elrendezésről készült fényképet a 3.1 ábra tartalmazza. Az egyes optikai elemek fizikai adatait a függelékben gyűjtöttem össze.



3.1. ábra. A magneto-optikai spektrométer a főbb elemek megnevezésével. A számozott lencsék listája ill. az összes elem rövid specifikációja a függelékben található.



3.2. ábra. A mintatartó és a sínen mozgatható rúdmágnes.

A széles spektrum eléréséhez két különböző fényforrást –egy halogén, valamint egy xenon lámpát- használtam, melyek között mozgatható tükör segítségével lehet váltogatni. A $\lambda = 200 - 800nm$ tartományban a xenon lámpát, a hosszabb $\lambda = 800 - 1300nm$ hullámhosszakra pedig a halogén izzót alkalmaztam. A lámpák fényét egy-egy f = 80mmfókusztávolságú lencse párhuzamosítja, majd egy f = 260mm fókusztávolságú gyűjtőlencse egy színszűrőn keresztül az optikai rácsos monokromátor belépő résére koncentrálja. A felhasznált lencsék ömlesztett kvarcüvegből készültek, így a vizsgált hullámhosszakon abszorpciójuk elhanyagolható. A rácsos monokromátor a bejutó fényt holografikus optikai rácsok segítségével választja szét hullámhossz szerint a térben. Az általam használt monokromátor három rácsból áll, így a rácsok váltogatásával a különböző hullámhossztartományokra optimalizálni lehet a színek térbeli elkülönítésének mértékét. A megfelelő rácsról visszaverődött fény végül a kilépő résre jut, melynek szélességét a belépő résével párhuzamosan állítva, a kijutó fény hullámhosszbeli felbontását (azaz a kiválasztott hullámhossz körüli áteresztett tartomány szélességét) lehet rögzíteni. A monokromátor előtt elhelyezett színszűrő használata azért szükséges, mert a rács által másod- és harmadrendben diffraktált (fél és harmad hullámhosszúságú) fény is ugyanazon szögben verődik vissza, mint az általunk kiválasztott hullámhosszúságú, ily módon ezen komponensek hozzákeverednének a résen kijutó fényhez.

A monokromátorból kilépő fényt egy f = 94mm fókusztávolságú lencse kollimálja, majd a párhuzamos nyaláb átmérőjét két egymással szembe helyezett, közös fókuszsíkú gyűjtőlencse (f = 150mm és f = 100mm) kétharmadára csökkenti (annak érdekében, hogy a nyaláb át tudjon haladni a PEM és a polarizátor ablakán). A lencsék közös fókuszpontjában elhelyezett írisz apertúrájának változtatásával meghatározható az összes későbbi fókuszpontbeli fényfolt mérete. Ezek után egy 45°-ban elhelyezett polarizátoron keresztül jut el a fény a PEM-be. A PEM frekvenciája 50kHz, a fázistolás amplitúdóját pedig a hullámhossz felére állítottam (π fázistolás), hiszen itt van a J_2 Bessel-függvénynek maximuma (2.5 ábra), azaz itt lehet maximális feszültségértékeket mérni az intenzitás 2f-komponensére. Az ábrán látható, hogy ugyanekkor a J_1 függvény itt már nem maximális, ezért az ellipticitás mérésekor tovább növelhető az érzékenység a fázistolás szögének csökkentésével (a maximumhely $\pi/2$ környékén található).

A PEM-ből kilépő –periodikusan változó polarizációs állapotú– fényt egy f = 100mmes fókusztávolságú lencse egy speciálisan kialakított mintatartóban elhelyezett küvettára (3.2 ábra) gyűjti. Méréseim során ezen küvettába töltöttem a folyékony állapotban lévő mintát. A csiszolt kvarcküvetta belsejében a fényút hossza d = 1mm. Mivel a mágneses teret a küvetta mögé helyezett permanens rúdmágnessel állítottuk elő, a küvetta mögé egy apró aluminiumtükröt helyeztünk, így a nyaláb kétszer haladt át a mintán. A tükör küvettához viszonyított dőlésszöge egy csavar segítségével állítható, ily módon térben el lehet választani a küvetta faláról közvetlenül visszaverődött fényt a számunkra értékes (tükörről visszavert, így a mintán kétszeresen áthaladó) fénynyalábtól. A visszavert nyalábot egy szintén 100mm fókusztávolságú lencse kollimálja, és egy írisz biztosítja, hogy csak a megfelelő fényfolt essen a további elemekre. Ezután következik a keresztezett állásba helyezett analizátor.

Polarizátorokként egy-egy Rochon prizmát használtam, melyből az ordinárius fénynyaláb egyenes vonalban, az extraordinárius pedig kissé eltérítve (tipikusan 7-15°-ban) lép ki. Az elrendezésnél tehát ügyelni kell arra, hogy a detektorba csak a megfelelő polarizációjú (ordinárius) nyaláb jusson el.

Az analizátoron átjutó fényintenzitás mérésére két különböző detektort használtam. Az egyik egy fotoelektron sokszorozó, mely a rövidebb hullámhosszakon (200-900nm), a másik egy félvezető InGaAs detektor, amely a hosszabb hullámhosszakon (800-1600nm) mér. A kettő között egy elektromágnes által mozgatható tükörrel lehet váltani. A kollimált nyalábot egy-egy f = 50mm fókusztávolságú lencse koncentrálja a detektorok érzékeny felületére.

A minta (és az aluminium tükör) mögött egy tízed-milliméter beosztású skálával ellátott sínen mozgatható rúdmágnest helyeztem el, melynek polaritását a mágnes vízszintes tengely körüli 180°-os forgatásával lehet megcserélni. Az általam beállított pozíciónál (kb. 2mm-re a mintától) a mágneses indukció nagysága kb. 0,4T volt.

A beszűrődő külső fény a detektorok alapos burkolásával van kiküszöbölve, valamint a teljes optikai elrendezést egy sötétítő doboz fedi.

Az egyes frekvenciakomponensek méréséhez egy Keithley típusú dc voltmérőt, valamint 2 Lock-in erősítőt használtam. A Lock-in erősítőket a PEM elektronikus vezérlő egysége által szolgáltatott 50kHz-es és 100kHz-es referencia frekvenciákra állítottam.

A spektrum felvétele egy számítógépes mérőszoftveren keresztül van automatizálva, melyet Szaller Dávid és Kocsis Vilmos fejlesztettek Visual Basic programnyelven. A szoftver lépteti a monokromátort megadott hullámhossz egységenként, beállítja a megfelelő szűrőt, valamint a megadott PEM fázistoláshoz tartozó modulációs amplitúdót. A detektorok jeleit a Lock-in erősítőkön, valamint a Keithley voltmérőn keresztül kérdezi le, és a két frekvenciakomponenst (2.61) és (2.62) szerint normálja a dc jellel. A Kerr-paraméterek kalibrációjának elvégzése után a szoftver automatikusan fokban adja meg a magnetooptikai forgatás és ellipticitás értékeket. A PMT érzékenységi görbéjének felvétele (lásd később) mintacsere után a megfelelő funkció segítségével szintén a programon belül elvégezhető.

3.2. Kalibráció

A rendszer kalibrációja két részből áll. Az első, melyet minden új minta behelyezése után el kell végezni, a PMT érzékenységi görbéjének felvétele, a másik a magneto-optikai forgatás és ellipticitás értékének kalibrációja, melyet elegendő egyszer végrehajtani az adott mérőrendszerrel.

A fotoelektron sokszorozó által mért feszültség a PMT érzékenységével (amely a rá kapcsolt vezérlő feszültség 6,92-ik hatványával arányos), valamint a beérkező fényintenzitással egyenesen arányos. A PMT emiatt könnyen túlvezérelhető, és túl nagy fotoáram esetén károsodhat. Ezért a mérőszoftver először a megadott hullámhossz felbontással végiglépteti a monokromátort a spektrumon, és midnen lépésben meghatározza azt a maximális vezérlőfeszültséget, amely a fotoelektron sokszorozón 2,6V kimenő feszültséget eredményez. Erre azért van szükség, mert a lámpáknak és optikai elemeknek köszönhetően a rendszer fényessége erősen hullámhosszfüggő. Két mérési pont között, amenynyiben a tényleges mérés során az előzőnél nagyobb felbontást állítunk be, a szoftver a vezérlőfeszültség értékét lineáris interpoláció alapján határozza meg. Így a spektrumok mérésekor a program minden hullámhosszon olyan feszültséget ad a PMT-re, hogy annak kimenő feszültsége 2,5-2,6V legyen. Tudjuk, hogy ez nem befolyásolja a mérést, hiszen az I_{dc} , I_f , I_{2f} intenzitáskomponensek ily módon egyforma arányban vannak erősítve, és a magneto-optikai forgatás ás ellipticitás spektrumnál pedig a relatív, I_{dc} -vel normált jelet mérjük.

A forgatás és ellipticitás kalibrációja, melynek elvét az előző fejezetben taglaltam, a rendszerre magára jellemző erősítési tényezők meghatározására irányul. Mivel az f és 2f frekvenciás választ a dc válasszal normáljuk, így elegendő a kalibrációt egyszer elvégezni, hiszen azt a fényforrások, más optikai elemek és a minták változtatása a kalibrációs görbét nem befolyásolja.

3.2.1. A forgatás kalibrációja

Kihasználva, hogy (2.62) szerint a 2f frekvenciás fényintenzitás tekintetében a minta magneto-optikai forgatása és az analizátor elfordulása azonos szerepet játszik ($\Theta \propto -\alpha$), az analizátor szögét +2°-ra állítva felvettem a 2f- spektrumot, majd ugyanezt -2°-nál is elvégeztem. A két spektrumot kivonva egymásból, majd elosztva 4°-al a keresett $\frac{c_{2f}}{c_f} 4J_2(\Phi_0)$ kalibrációs konstanst kapjuk az adott hullámhosszon. Az így felvett pontokra harmadfokú görbét illesztettem, mely jó közelítéssel megadja a kalibráiciós görbéket az egyes detektorokra (3.3 ábra és 3.1 táblázat).

Az illesztett görbék egyenlete:

$$\frac{c_{2f}}{c_f}4J_2 = A + B_1\lambda + B_2\lambda^2 + B_3\lambda^3.$$
(3.1)

Az illesztett görbék alapján tehát egy mágnesezhető mintánál a következő képlet adja a MO forgatást (az I intenzitások itt a mért feszültség értékeket jelölik, melyek arányosak a beérkező intenzitással, az arányossági tényező viszont a dc-vel való normálás miatt kiesik):

$$\Theta(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{I_{2f}/I_{dc}(B) - I_{2f}/I_{dc}(-B)}{A + B_1\lambda + B_2\lambda^2 + B_3\lambda^3}.$$
(3.2)

3.2.2. Az ellipticitás kalibrációja

A 2.5. fejezetben leírtaknak megfelelően egy fázistoló lemezt helyezve a fényútba, kalibrálható az 1f-komponens. A kapott pontokon jól látszik a fázistolás szinusza miatti oszcilláció (3.3 ábra).

A $+2^{\circ}$ és a -2° analizátor állás mellett felvett spektrumok különbségét képezve, valamint kiválasztva a burkológörbe abszolútérték-maximumait, a kapott pontokra PMT detekror esetén harmadfokú, az InGaAs detektorra másodfokú görbét illesztettem (3.3 ábra). Az illesztés paramétereit a 3.1 és 3.2 táblázatok tartalmazzák.

A MO forgatáshoz hasonlóan a mért 1f komponens normálásából ellentétes mágneses terek mellett a következő képlettel kapjuk meg az ellipticitást:

$$\eta(\lambda) = \frac{I_{1f}/I_{dc}(B) - I_{1f}/I_{dc}(-B)}{A + B_1\lambda + B_2\lambda^2 + B_3\lambda^3}.$$
(3.3)



3.3. ábra. Kerr forgatás (bal oldali ábra) és ellipticitás (jobb oldali ábra) kalibrációja a hullámhossz függvényében.

PMT			InGaAs		
Paraméter	Érték	Hiba	Paraméter	Érték	Hiba
А	0,01037	8,26423E-4	А	-0,02203	$0,\!00559$
B1	3,21214E-5	$4,\!34125\text{E-}6$	B1	$8,\!95935\text{E-}5$	$1,\!60748\text{E-}5$
B2	-4,1737E-8	$7,\!31448\text{E-9}$	B2	-6,71642E-8	1,52465E-8
B3	1,79056E-11	3,96948E-12	B3	1,44153E-11	4,77503E-12

3.1. táblázat. A MO forgatás kalibrációs paraméterei a két detektorra

PMT			InGaAs		
Paraméter	Érték	Hiba	Paraméter	Érték	Hiba
А	-0,0218	0,00332	А	0,02538	$0,\!00372$
B1	1,23184E-4	1,81274E-5	B1	-3,88887E-5	6,99391E-6
B2	-1,526E-7	3,18304E-8	B2	2,75284E-8	3,24763E-9
B3	6,71331E-11	1,80237E-11	B3	0	0

3.2. táblázat. A MO ellipticitás kalibrációs paraméterei a két detektorra

4. fejezet

Mérési eredmények

4.1. Tesztmérések vízen és kvarcon

A megépített spektrométer érzékenységének és a mérési eredmények reprodukálhatóságának vizsgálatához azt a kvarc küvettát használtam, amelyben a későbbiekben a vastartalmú vérfehérjék vizes oldatát kívánjuk mérni.

Felvettem a magneto-optikai forgatás és ellipticitás spektrumot a rúdmágnes mindkét polaritása mellett, azt mindig adott távolságra helyezve a mintától. Így a minta pozíciójában a mágneses tér közelítőleg $\pm 0, 4T$ volt. A kalibrációs eljáráshoz hasonlóan, itt is kivontam egymásból az ellentétes mágneses polaritáshoz tartozó spektrumokat, így a mágneses térben szimmetrikus alapvonal kiesett és (3.2) és (3.3)-nak megfelelően a valós forgatás és ellipticitás spektrumokat kaptam. A küvetta magneto-optikai forgatását és ellipticitását a 4.1 grafikonon ábrázoltam.



4.1. ábra. Kvarc küvetta Kerr-forgatása (balra) és ellipticitása (jobbra).

Az ábrán látható, hogy a kvarc MO ellipticitása gyakorlatilag zérus az egész spektrumon, míg a forgatás a foton-energia növelésével növekszik. Ez megérthető, ha tekintetbe vesszük, hogy a SiO_2 szigetelő, így nagyobb energiákon van abszorbciója (a vezetési és



4.2. ábra. Víz magneto-optikai forgatása (bal oldalt) és ellipticitása (jobb oldalt) (fekete: küvetta mintatartóban, piros: küvetta spektrumát levonva).

vegyérték sáv közti gap szélessége kristályos kvarcra $\Delta = 8, 4eV$, az általunk használt ömlesztett kvarcra $\approx 7 - 8eV$). Az abszorbciós és a diszperziós spektrum (a törésmutató képzetes és valós része) között a Kramers-Kronig reláció teremt kapcsolatot, azaz a magasabb energiatartományban jelenlévő abszorbciós csúcs egy szélesebb tartományra kiterjedő diszperziós spektrumot eredményez.

Tudjuk, hogy a magneto-optikai forgatásért (2.44) szerint a törésmutató valós részének különbsége felelős, azaz a diszperziós spektrummal áll kapcsolatban, vagyis a (2.45)-beli Kramers-Kronig transzformáció értelmében az abszorpció tényleges tartományán kívül is véges lehet.

Ezután a küvettát megtöltöttem fiziológiás só oldattal (0,9% NaCl koncentráció). Ez szintén alkalmat ad az irodalmi adatokkal való összevetésre (a só magneto-optikai hatása elhanyagolható, tehát az oldat MO paraméterei azonosak desztillált vízével), íly módon használható a spektrométer tesztelésére. Másrészt később ferritin oldatok mérésénél megadja a puffertől származó hátteret, melyet –ha pusztán a ferritin magneto-optikai paramétereire vagyunk kíváncsiak–, le kell vonnunk a mért spektrumokból. Ugyanígy a vízre kapott értékekből levontam a küvettánál mért értékeket. A mért forgatás és ellipticitás spektrumokat a 4.2 grafikonon ábrázoltam.

A (2.48) definíció szerint kiszámítható a víz Verdet-állandója minden hullámhosszon (a külső mágneses indukció $B = 0, 4 \pm 0, 05T$, a fényút hossza a küvettán kétszer áthaladva d = 0, 2cm). Ezen értékek jó referenciát biztosítanak az szakirodalomban található adatokkal való összehasonlításhoz [8, 9]. A 4.3 grafikonon az általam mért spektrumon piros és zöld színnel feltűntettem az irodalmi értékeket is. Az egyezés jól látható, ami jól példázza mérőrendszerünk megbízhatóságát.

Itt megjegyezném, hogy az általam épített spektrométer a MO paraméterek meghatározásán túl alkalmas egyszerű abszorpciós (és reflexiós) spektrumok felvételére is.



4.3. ábra. A víz Verdet-állandójának hullámhosszfüggése. Fekete: mért értékek, piros, zöld: irodalmi adatok.

4.2. Ferritin oldatok abszorpciójának vizsgálata

A tudományos szakirodalomban többnyire bakterio ferritin magneto-optikai vizsgálatáról szóló cikkek jelentek meg, én – orvosi vonatkozásai miatt – állati (ló lépéből származó) mintát vizsgáltam, mely lényegében megegyezik az emberi ferritinnel. A bakterio ferritin ettől abban különbözik, hogy nemcsak a fehérjeburkon belül található vas, hanem a burokhoz kapcsolódó heme-csoportokban is. A kísérletek szerint [10] ezen minták magneto-optikai tulajdonságait a heme-csoportban található vas ionok határozzák meg. A kap- csolódó cikk [10] szerzői ilyen bakterio ferritin abszorpciós spektrumát vizsgálták a ferritin két állapotában. Holoferritinnek nevezik a ferritinnek azon állapotát, mikor a fehérjeburok fel van töltve vassal ($[FeO(OH)]_8[FeO(H_2PO_4)]$ kristály formában) és apoferritinnek, mikor a fehérjeburok üres (lásd 4.4 ábra). Ezen két állapot abszorpciós spektruma éppen a fehérjeburokban jelenlévő vas abszorpciójának következtében különbözik egymástól (azaz éppen az általam vizsgált állati ferritin abszorpciójában). Az abszorpciós spektrum felvétele tehát egyrészt az erre vonatkozó tudományos eredményekkel való összevetésre alkalmas, másrészt annak megállapítására, hogy milyen hígítású ferritin oldaton érdemes magneto-optikai méréseket végezni az általam mért hullámhossztartományon belül a későbbi mérések során.

Mivel a MO forgatás és ellipticitás jó közelítéssel arányos a mágnesezettséggel, így célszerű a minta szuszceptibilitását növelni, melyet a paramágneses ferritin esetében a hőmérséklet csökkentésével érhetünk el (paramágneses kristály esetén a Curie-szuszceptibilitás a meghatározó, mely fordítottan arányos a hőmérséklettel $\chi_{Curie} \propto \frac{1}{T}$). Elektron-



4.4. ábra. Ferritin. A képen az üres fehérjeburok látható (apoferritin). A vas az apoferritin magjában $[FeO(OH)]_8[FeO(H_2PO_4)]$ kristály formájában raktározódik (holoferritin).

spin rezonancia kísérletek szerint [11] a ferritin magjában található vastartalmú krisztallitok T = 15K alatt antiferromágneses rendet mutatnak, így ilyen hőmérséklet alatt nem várható magneto-optikai effektus. A későbbi kísérletek során ezért az alábbiakban meghatározott megfelelő koncentrációjú oldatot érdemes vizsgálni alacsony (de az antiferromágneses rendeződés feletti) hőmérsékleten a ferritin paramágneses fázisában.

A ferritin vizsgálatára kb. 1ml c = 56mg/ml koncentrációjú minta állt rendelkezésemre. Ebből egy injekciós tű segítségével egy $100\mu l$ -es beosztású skálával ellátott fecskendővel tudtam adagolni a küvettába. A térfogatmérés bizonytalanságát a ferritin esetében kb. $10\mu l$ -nek tekinthetjük.

A kezdetben $100\mu l$ mennyiségű ferritin mintát minden új mérésnél további $100\mu l$ térfogatú fiziológiás só oldattal hígítottam. Miután a küvetta megtelt $(400\mu l)$,tartalmának felét a fecskendővel eltávolítottam, majd ugyanennyi sóoldatot töltöttem vissza, ezzel megfelezve a ferritin koncentrációt. Ezt az eljárást háromszor is megismételtem. Így az egyes mérésenként a vizsgált ferritin koncentrációkat rendre a 4.1 táblázat foglalja össze.

A méréseket sorra a legtöményebbtől kezdve a leghígabb oldatig végeztem, minden új minta behelyezésekor elvégezve az érzékenységkalibrációt a PMT detektorra (hiszen a minta minden hígitásnál egyre átlátszóbb lett).

Az abszorpciós spektrumokat a ferritin oldaton és a vízzel töltött küvettán (referencia) átmenő fény intenzitása, valamint a PMT vezérlőfeszültségek alapján számítottam. Tudjuk, hogy a detektor a teljes beérkező intenzitást a következő képlet szerint alakítja feszültséggé (I^{be} a fényforrás által kibocsátott teljes bejövő intenzitás, c a PMT-re adott vezérlőfeszültség, mely függ a koncentrációtól és a hullámhossztól, α az abszorpciós együtt-

Sorszám	$V(\mu l)$	c(mg/ml)
1	100	56
2	200	28
3	300	$18,\!67$
4	400	14
5	400	7
6	400	3,5
7	400	1,75

4.1. táblázat. A vizsgált minták ferritin koncentrációja

ható, mely a várakozás szerint a ferritin koncentrációval egyenesen arányos, d a fény mintában megtett útja, azaz a küvetta vastagságának kétszerese: d = 0, 2cm):

$$I_{dc} = I^{be}(\lambda)e^{-\alpha d}c(\lambda)^{6,92}.$$
(4.1)

Legyen a referencia a fiziológiás sóoldat, ahol zérusnak tekintjük az abszorpciót (minden vizsgált hullámhosszon tökéletesen átlátszó). Hasonlóan a víznél mért értékeket:

$$I_{dc}^{0} = I^{be}(\lambda)c_{0}(\lambda)^{6,92}.$$
(4.2)

Így az abszorpciós konstans a következőképpen határozható meg:

$$\alpha = \frac{1}{d} \left(ln \frac{I_{dc}^0}{I_{dc}} - 6,92 ln \frac{c_0}{c} \right).$$
(4.3)

A gyakorlatban elvégeztem még egy mérést úgy, hogy letakartam a minta mögött elhelyezett tükröt, ily módon megmértem azt a szórt hátteret a dc jelben (14 és 28mg/ml ferritin koncentráció mellett), amely a hasznos jelen kívül a detektorba jut. Ezt levonva az egyes koncentrációknál mért dc intenzitásból, a (4.3) képletben csak a mintán valóban áthaladó fény intenzitása szerepel. A 4.5 grafikonon együtt ábrázoltam az abszorpciós spektrumokat különböző ferritin koncentrációk mellett:

A nagyobb koncentrációknál megfigyelhető egy letörés az abszorpciós spektrumban az alacsonyabb hullámhosszakon. Ez nyilvánvalóan szisztematikus hiba, ami abból származik, hogy a mintán átjutó fény igen csekély, és emellett a szórt intenzitás és a PMT sötét árama is számít. Ezen részben segít a szórt háttér levonása, de teljesen ez sem küszöböli ki.

Az abszorpciós együttható és a koncentráció közti lineáris összefüggés ellenőrzését két módon is elvégeztem. Ha az egyes abszorpciós együtthatókra kapott értékeket az adott ferritin koncentrációval lenormáljuk minden hullámhosszon, akkor azt várjuk, hogy a görbék egymásra skálázódnak. Ez kis koncentrációk mellett jól teljesül, ahogy azt a 4.6 ábra mutatja.

Megvizsgáltam az abszorpciós konstansokra kapott értékeket a koncentráció függvényében is különböző hullámhosszakon. Látható, hogy a grafikonok –főleg a magasabb koncent-



4.5. ábra. A különböző koncentrációjú ferritin oldatok abszorpciós spektruma.

rációk felé– kissé eltérnek a lineáristól. Ennek oka lehet egyrészt az említett szisztematikus hiba a kis mért intenzitások miatt, másrészt a ferritin bemérésének, azaz a számolt koncentráció értékének pontatlansága, mely főleg a töményebb oldatok felé volt jelentős, mivel a ferritin mintából kevés állt rendelkezésre, így annak felszívása és pontos kitöltése nagyobb nehézséget okozott. A víz adagolása, mivel abból kellő mennyiséget fel lehetett szívni, ennél pontosabb volt, ezért érvényesül jobban a lineáris összefüggés kisebb koncentrációknál (4.6 ábra).



4.6. ábra. A ferritin fajlagos (koncentrációval normált) abszorpciós együtthatója a 320-800nm tartományban, illetve a koncentráció függés néhány hullámhosszon.

4.3. A ferritin magneto-optikai forgatásának és ellipticitásának vizsgálata

Az abszorpció vizsgálata után a ferritin oldatok magneto-optikai tulajdonságait tanulmányoztam. Bár szobahőmérsékleten nem tapasztalható jelentős effektus, jelen esetben a mérés abból a szempontból informatív, hogy a későbbi, alacsony hőmérsékleti vizsgálat során milyen hígítású oldatnál számíthatunk optimális jel-zaj viszonyra (A MO effektus ui. arányosan nő a koncentrációval, viszont a mintán átjutó intenzitás exponenciálisan csökken ennek függvényében).

A magneto-optikai forgatás és ellipticitás spektrumokat különböző ferritin koncentrációk mellett a 4.7 grafikon ábrázolja. A víz és a küvetta spektrumát levonva az oldatokéból, látható, hogy a forgatást teljes egészében a víz forgatása határozza meg, a ferritin forgatása emellett elhanyagolható.

A grafikonról leolvasható, hogy azon hullámhossztartományban, ahol magneto-optikai jel zajmentesen mérhető, a ferritin minták magneto-optikai forgatása kb. 0,003°-on belül zérus. Az ellipticitás detektálása még pontosabb, a spektrumok kb. 0,001°-os hibával a nulla vonalon helyezkednek el. A mérésekből kiderül továbbá, hogy a rövid hullámhosszak vizsgálata ilyen elrendezésben csak hígabb ferritin oldat minták esetében lehetséges a ferritin nagy abszorpciója miatt.

Mind az abszorpciós, mind pedig a magneto-optikai méréseknek az a tanulsága, hogy a rövidebb hullámhosszak felé ($\lambda < 400nm$) a ferritin nagy abszorpciója miatt csak elegendően híg (c < 3, 5mg/ml koncentrációjú) ferritin oldatok vizsgálhatók. A későbbiekben ezért alacsony hőmérsékleten ilyen minták mérését tervezem.

Az itt használt elrendezésben – mivel a mágneses tér létrehozásához tömör rúdmágnest használtam–, a minta mögött elhelyezett tükör segítségével a mintán kétszer áthaladó fényt reflexiós geometriában vizsgáltam. Ennek hátránya, hogy a mintára nem merőlegesen esik be a fény, így az egyes határrétegek lineáris kettőstörésének hatása is számottevő lesz. Ez a lineáris kettőstörés nagy alapvonalat ad az ellipticitás mérésében, így annak észlelése pontatlanná válik. Ez eredményezi η zérustól való eltérését, ami a koncentráció függvényében semmi szisztematikát nem mutat. A jövőben a MO paraméterek valódi transzmissziós geometriában (melyben az analizátor és a detektor a minta mögött van elhelyezve) történő mérését tervezem rúdmágnes helyett gyűrű alakú mágnesek alkalmazásával, melyek íly módon nem akadályoznák a fény egyenes vonalú terjedését a minta mögött.



4.7. ábra. Magneto-optikai forgatás és ellipticitás spektrum különböző ferritin koncentrációk mellett. Az ábra betétek kis hullámhossz tartományra nagyítanak rá, ahol a tipikus zajszintet szintén feltüntettem.

5. fejezet

Összefoglalás

5.1. Eredmények, következtetések

A fenti eredmények bizonyítják, hogy az itt összeállított spektrométer kiválóan alkalmas az anyagok magneto-optikai paramétereinek detektálására. A tesztmérések tanulsága szerint a pontosság MO forgatás esetén 0,003° nál jobb, míg ellipticitásra kb. 0,001° adódik.Ez eléri a kereskedelmi forgalomban kapható eszközökét. Ugyanakkor ezen spektrométer egyes elemei tetszőlegesen módosíthatók az adott kísérleti feladatra optimalizálva azt, így sokkal több célra és különböző geometriájú mérésekre is alkalmazható a készen vásárlható berendezésekhez képest.

Víz esetén az általam mért Verdet-állandó spektrumát összevetve a szakirodalomban közöltekkel, nagyon jó egyezést találtam.

A ferritinen végzett szobahőmérsékleti mérések eredményéből leszűrhető, hogy a későbbiekben alacsonyabb hőmérsékleten (15-300K), valamint az abszorpció miatt lehetőleg híg oldaton (c < 3, 5mg/ml) célszerű kísérletezni, ha a ferritin számottevő magneto-optikai hatását kívánjuk kimutatni.

Ezen cél megvalósítására a jövőben egy új mintatartó építését tervezzük, melyet a már meglévő kriosztátba helyezve mind a ferritin, mind pedig a hemozoin minták tanulmányozhatók lennének alacsony hőmérsékleten.

Köszönetnyilvánítás

Szeretném köszönetemet kifejezni témavezetőmnek, Dr. Kézsmárki Istvánnak az elmélet feldolgozásában és a kísérleti munkában nyújtott segítségéért.

Köszönet illeti Bordács Sándort a kísérletekhez adott iránymutatásáért.

Köszönettel tartozom továbbá Orbán Ágnesnek, Szaller Dávidnak és Kocsis Vilmosnak, akik részt vettek a spektrométer építésében és a mérőszoftvert fejlesztették.

Függelék

A spektrométerben felhasznált optikai elemek adatai

Fényforrások		Hullámhossztartomány
	75W Xe	200-800nm
	$100 \mathrm{W}$ Halogén	800-1300 nm
Lencsék	Suprasil3	
sorszám	d(mm)	f(mm)
1	70	85
2	70	260
3	$25,\!5$	94
4	$25,\!5$	150
5	$25,\!4$	100
6	25,4	100
7	$25,\!4$	100
8	$25,\!4$	50
Rácsos spektrométer	Newport-Oriel 74100	
	$\operatorname{Hull\acute{a}mhossz(nm)}$	Rács száma
	200 - 320,07	1
	$320,\!07\text{-}640,\!07$	2
	640,07-1300	3
Szűrő		
	$\operatorname{Hull\acute{a}mhossz}(\operatorname{nm})$	Szűrő száma
	0-180	nincs szűrő
	$180 - 320,\! 07$	1
	$320,\!07\text{-}430,\!07$	2
	$430,\!07\text{-}640,\!07$	3
	$640 extrm{-}07 extrm{-}840, 07$	4
	840-1300	5
Tükrök	Ag tükör MgO védőbevonattal	
PEM	$\mathrm{PEM} ext{-}90~\mathrm{i}/\mathrm{FS50}$	
Polarizátor	Rochon prizma, BBO (190-3500nm)	
Detektor		Hullámhossztartomány (nm)
	PMT	180-800
	InGaAs	700-1800

Irodalomjegyzék

- [1] E. Theil: Annual review of biochemistry 56, 289 (1987)
- [2] S.C. Andrews, P.M. Harrison, S.J. Yewdall, P. Arosio, S., Levi, W. Bottke, M. Von Darl, J.F. Briat: Journal of Inorganic Biochemistry 47, 161 (1992)
- [3] D.M.Newman, J.Heptinstall, R.J.Matelon, L.Savage, M.L.Wears, J.Beddow, M.Cox, H.D.F.H.Shallig, P.F.Mens: Biophysical Journal 95, (2008) 994.
- [4] L.D.Barron, A.D.Buckingham: J.Phys.B 6, (1973) 1295.
- [5] Sólyom Jenő: A modern szilárdtestfizika alapjai III.kötet. 1639.
- [6] K.Sato: Jpn.J.Appl.Phys. **20**, (1981) 2403.
- [7] K.Sato, H.Hongu, H.Ikekame, Y.Tosaka, M.Watanabe, K.Takanashi, H.Fujimori: Jpn.J.Appl.Phys. 32 (1993) 989.
- [8] C.E.Waring, R.L.Custer: Jour.Am.Chem.Soc. 74, (1954) 2506.
- [9] A.Cotton, R.Lucas, M.Cau: International critical tables of numerical data, physics, chemistry and technology (1930) 425.
- [10] M.R.Cheeseman, F.H.A.Kadir, J.Al-Basseet, F.Al-Massad, J.Farrar, C.Greenwood, A.J.Thomson, G.R.Moore: Biochem.J. 286, (1992) 361.
- [11] E.Wajnberg, L.J.El-Jaick, M.P.Linhares, D.M.S.Esquivel: Journal of Magnetic Resonance 153, (2001) 69.