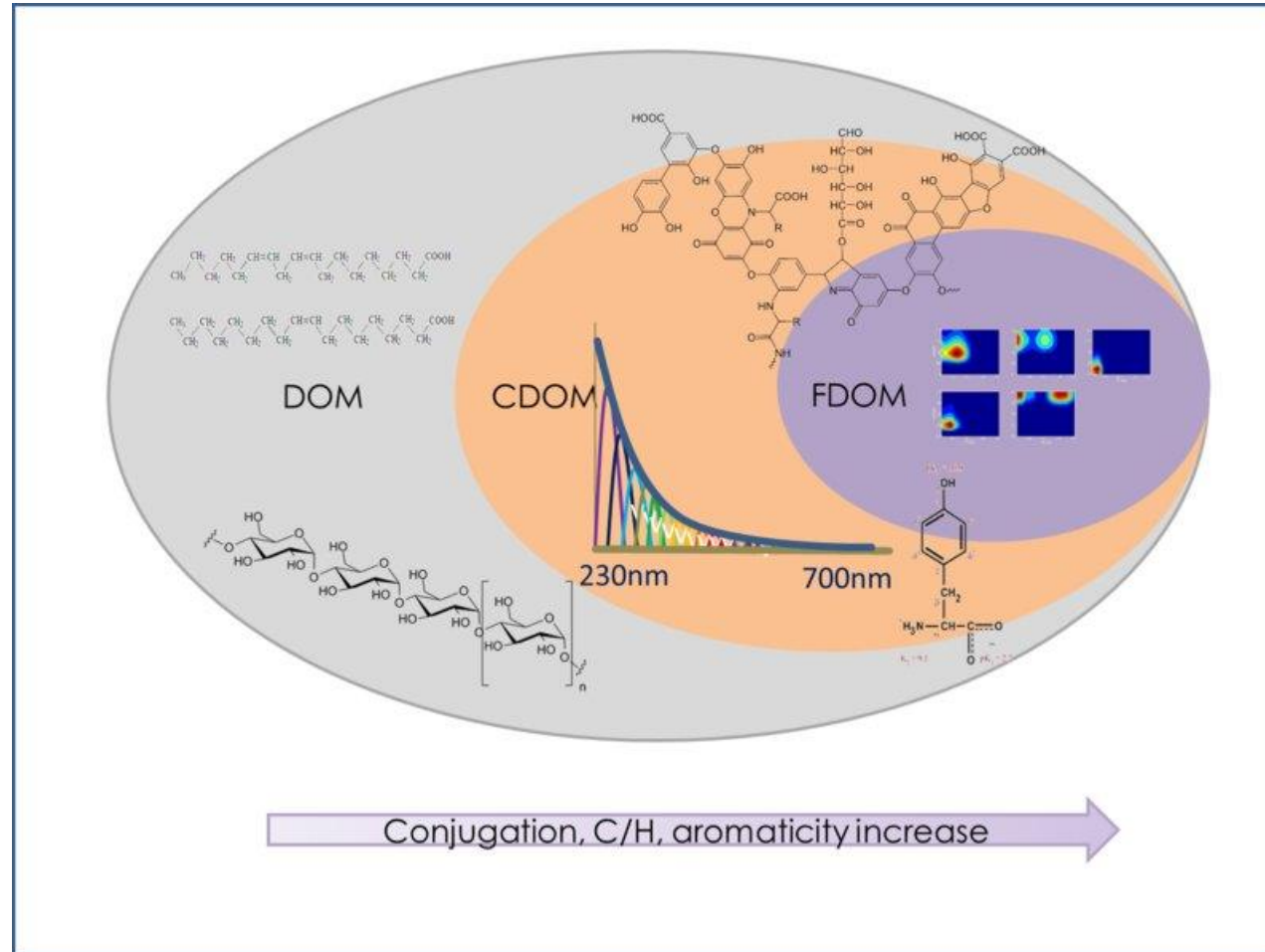


A fluoreszcens spektroszkópia alkalmazása természetes eredetű szerves anyag vizsgálataiban

A fluoreszcencia és a szerves anyagok



A fluoreszcens spektrum

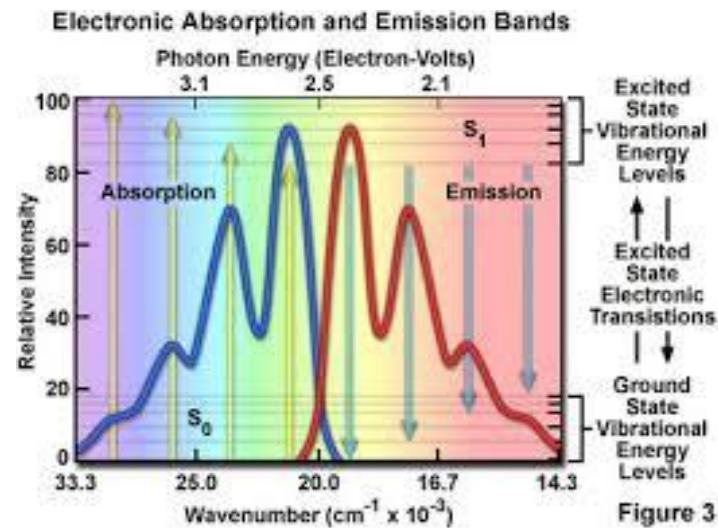
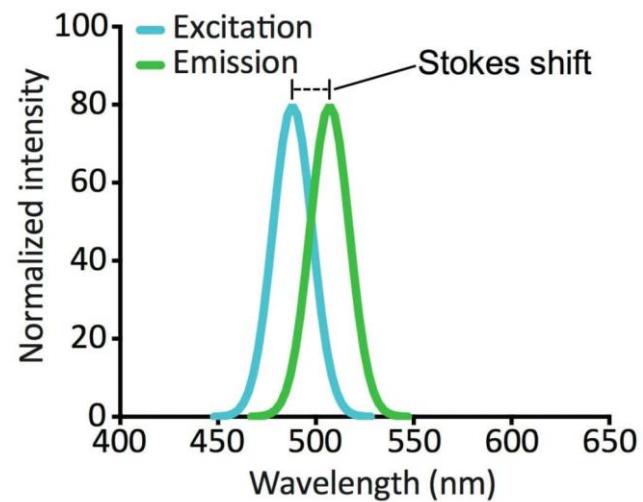
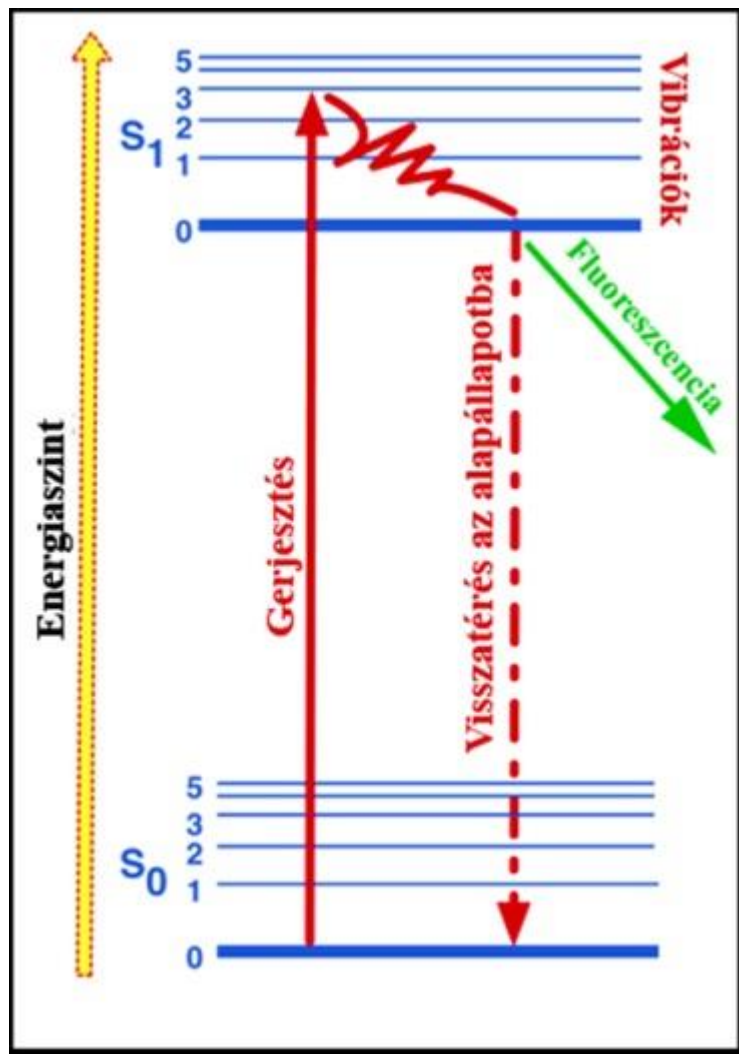
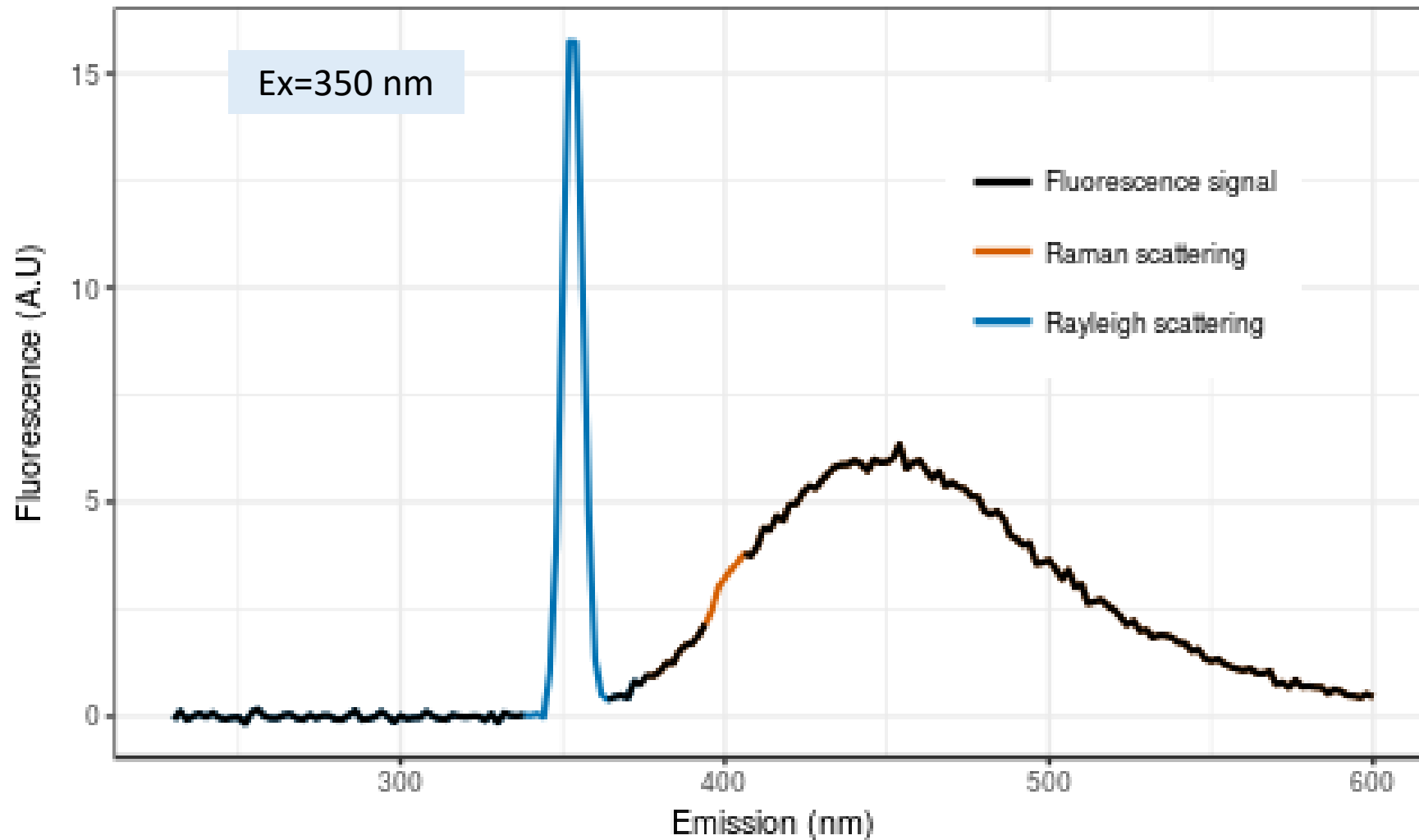


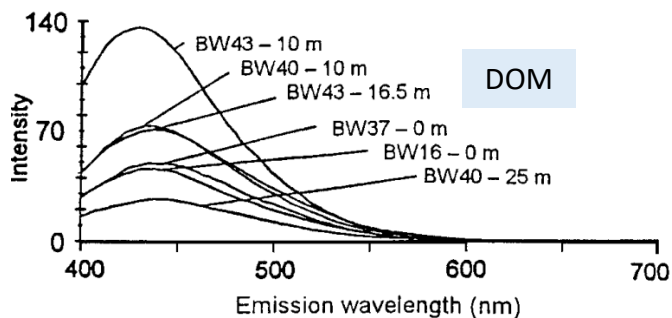
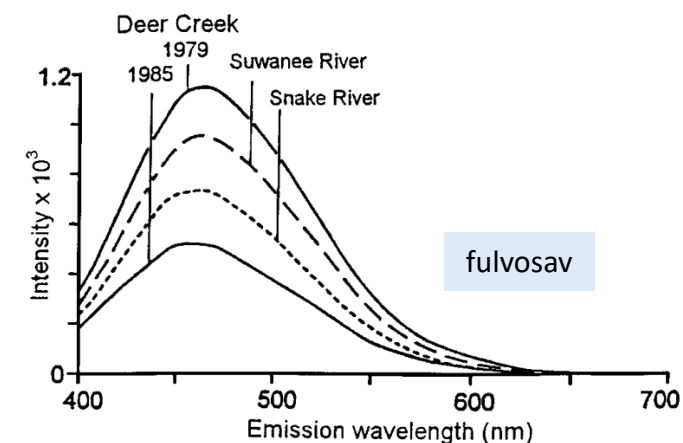
Figure 3

A szerves anyagok fluoreszcens spektruma



Fluoreszcens index

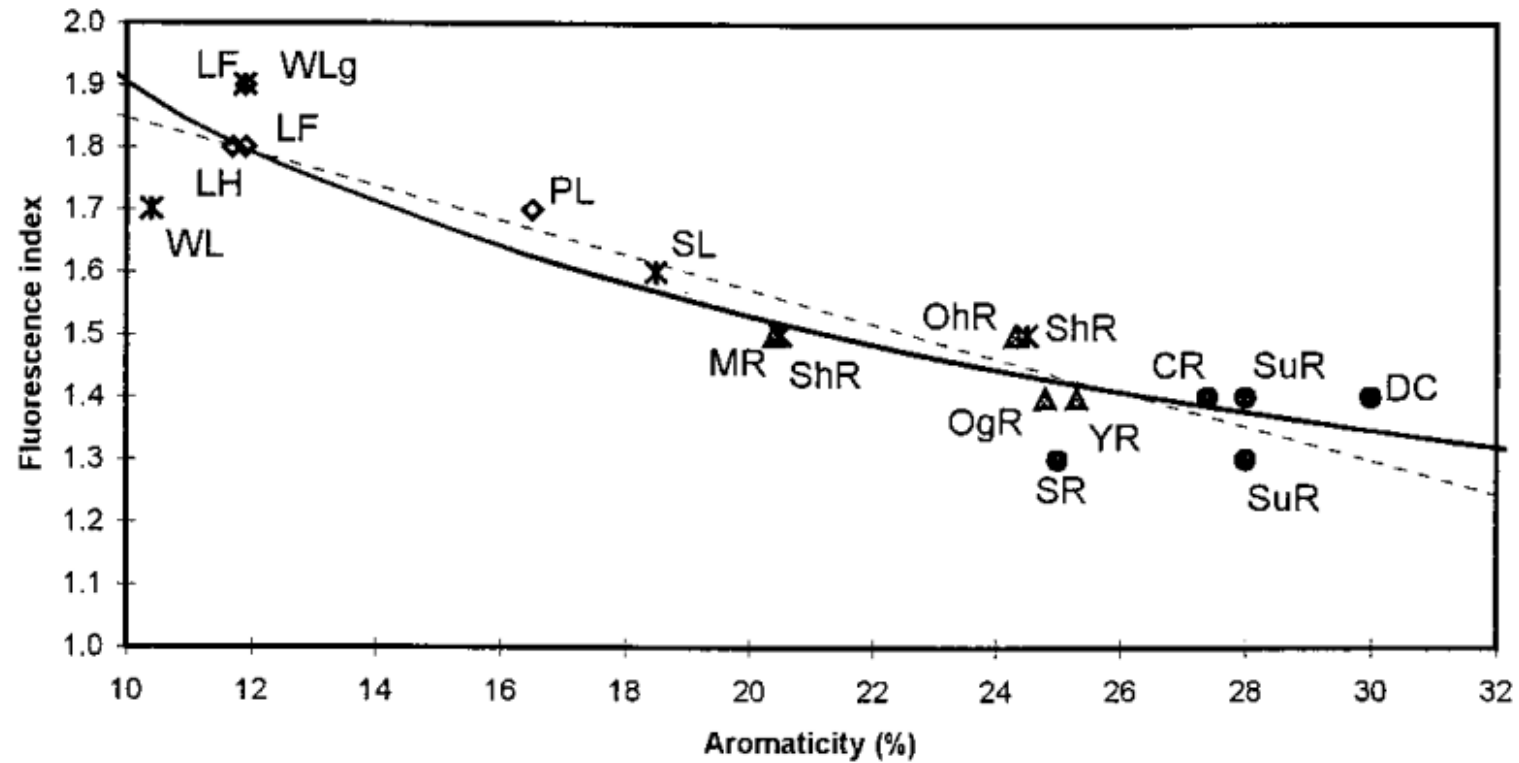
$$FI = \frac{I_{450}}{I_{500}} @370$$



- a nagyobb molekulaméretű, aromásabb szerves molekulák emissziós maximuma magasabb hullámhosszakon jelenik meg
- a mikrobiális eredetű szerves anyagok FI értéke magas (~1.8)
- a terasztriális, szárazföldi eredetű anyagok indexe jóval kisebb (~1,2 vagy kisebb)

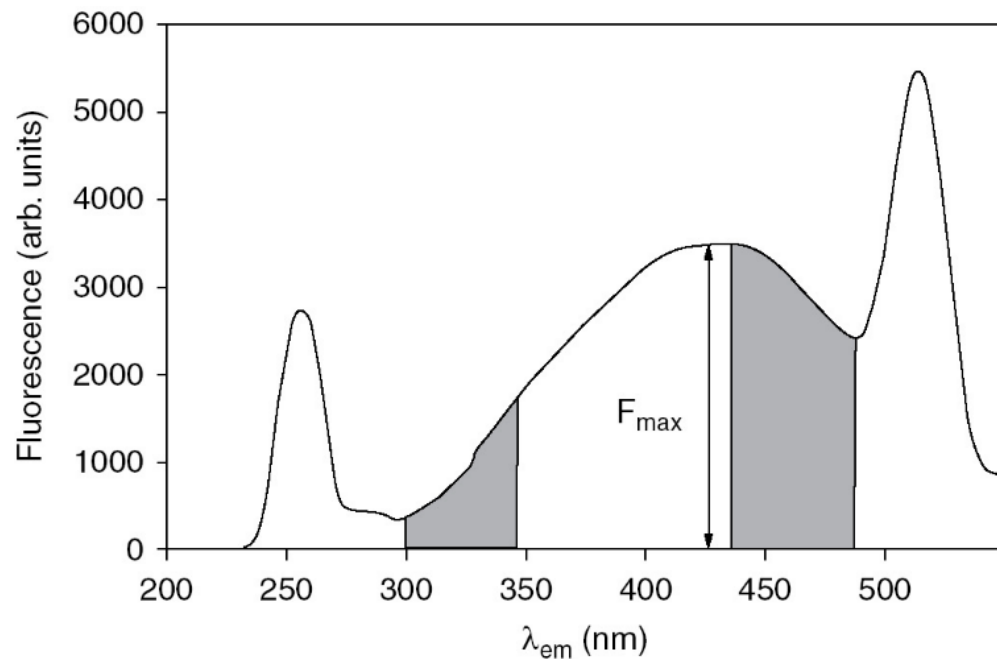
Fluoreszcens index

$$FI = \frac{I_{450}}{I_{500}} @370$$



Humifikációs index

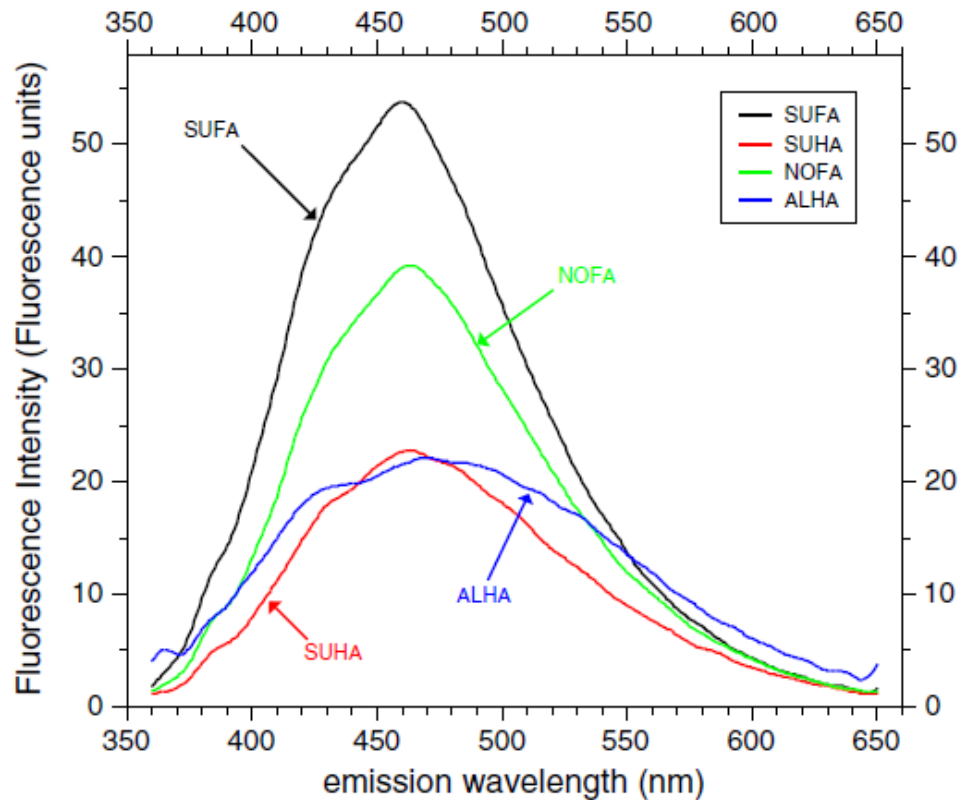
$$HIX = \frac{\sum I_{435 \rightarrow 480}}{\sum I_{300 \rightarrow 345} + \sum I_{435 \rightarrow 480}} @254$$



- nagyobb HIX érték a „humifikáltság” magasabb fokát jelzi
- a „humifikáltabb” (kevésbé degradált, nagyobb molekulatömegű, aromásabb, nagyobb C/O arányú) szerves anyag emissziója a magasabb hullámhosszak felé tolódik el (*red shift*)

Biológiai index

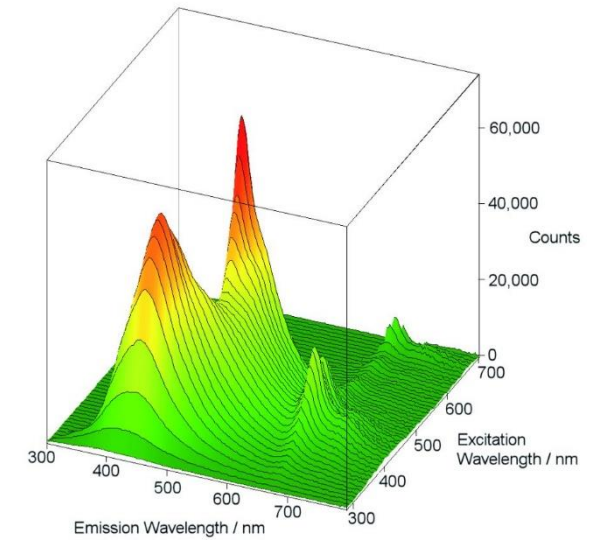
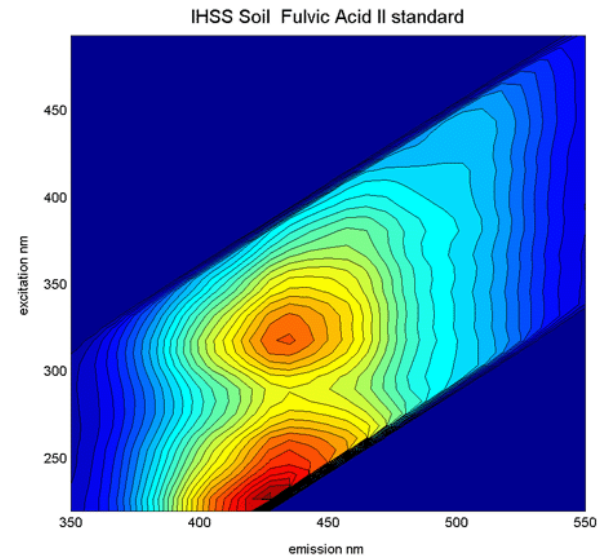
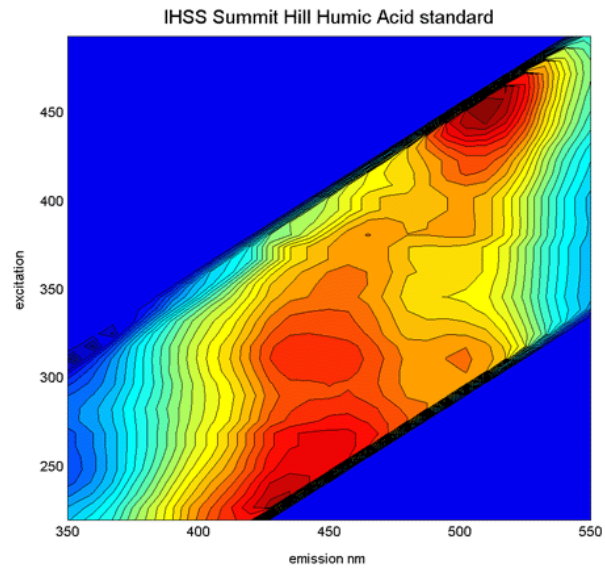
$$BIX = \frac{I_{380}}{I_{430}} @310$$



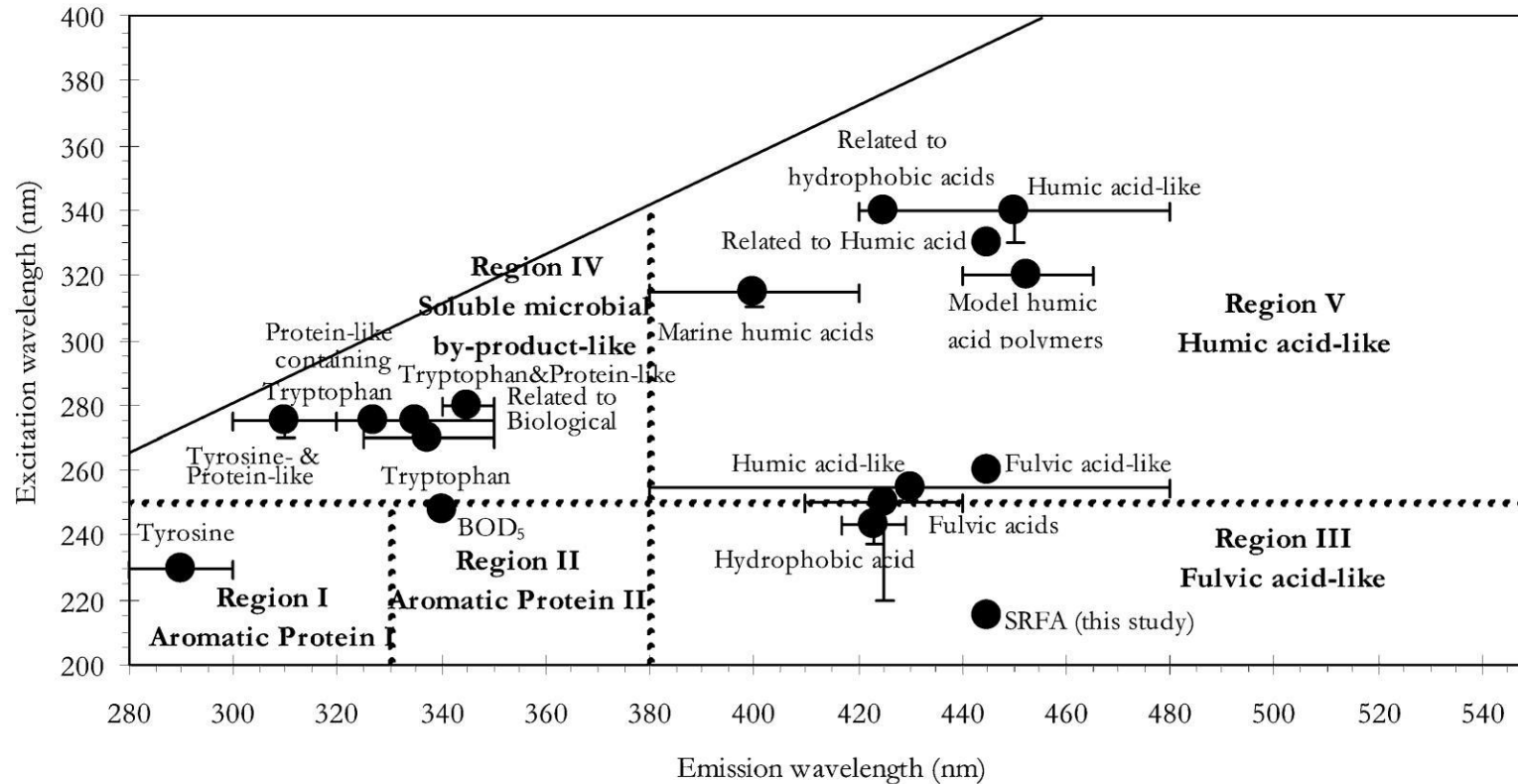
- a BIX értékének növekedése a mikrobiális eredetű szerves anyag relatív mennyiségének növekedésével áll kapcsolatban
- > 1 → biológiai eredetű (autochthonous)
- $< 0,5$ → terasztriális eredetű (allochthonous)

3D fluoreszcens spektrumok

- Excitation-Emission Matrix (EEM)
- Total Luminescence Spectroscopy (TLS)



3D fluoreszcens spektrumok



3D fluoreszcens spektrumok

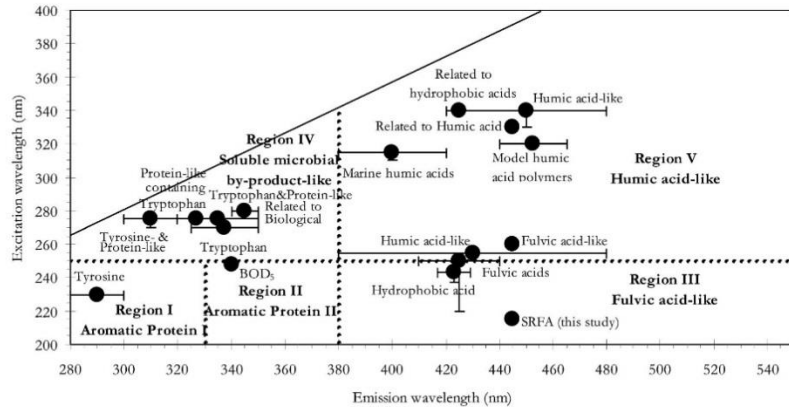


Table 2.1. Commonly referenced peak and region locations for components of excitation–emission matrices (EEMs) obtained for aquatic humic substances and dissolved organic matter

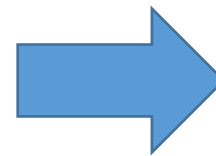
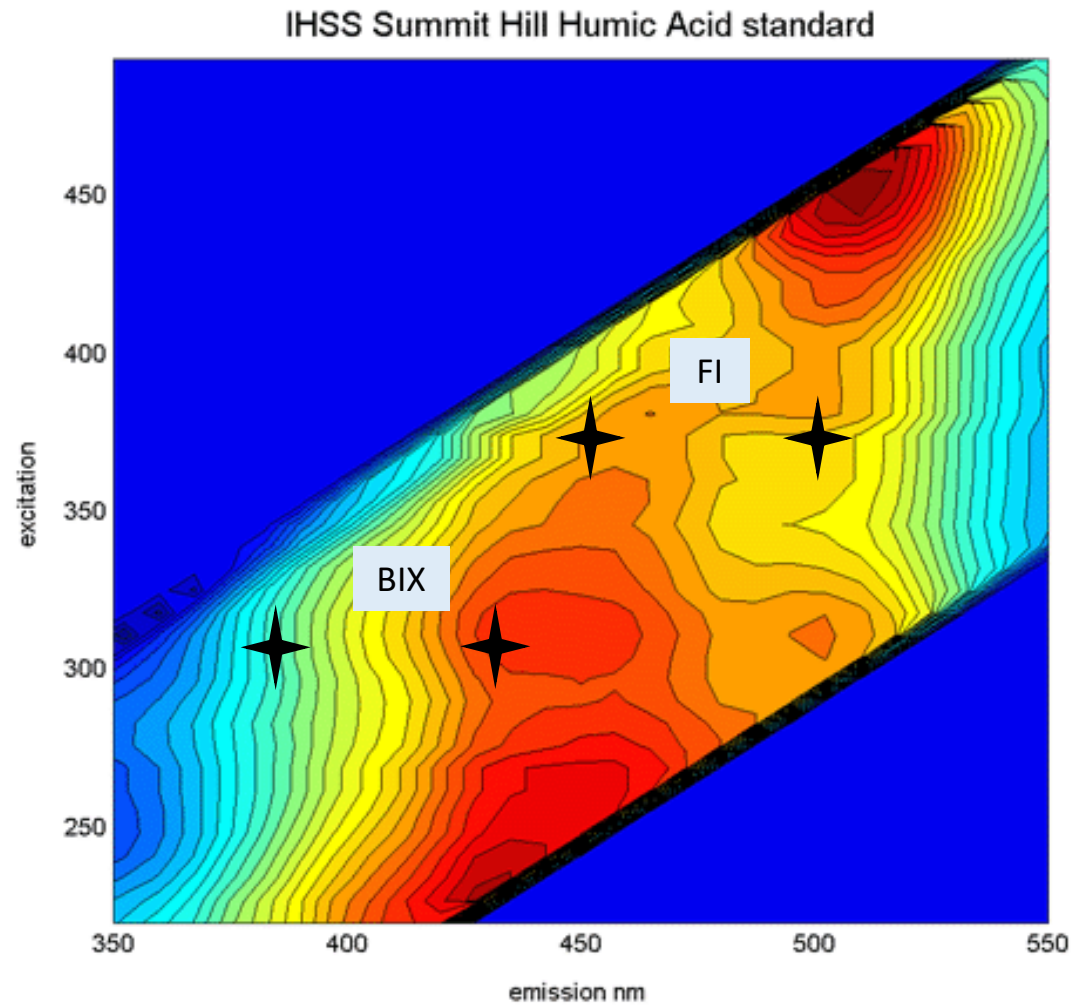
Peak label	Excitation maximum (nm)	Emission maximum (nm)	Description of fluorophores
B	275	305	Tyrosine-like, protein-like ^a
T	275	340	Tryptophan-like, protein-like ^a
A	260	400–460	Humic-like ^a
M	290–310	370–410	Marine humic-like ^a
C	320–360	420–460	Humic-like ^a
D	390	509	Soil fulvic acid ^b
E	455	521	Soil fulvic acid ^b
N	280	370	Plankton derived ^b

^aCoble, 2007; ^bStedmon et al., 2003.

Coble PG 2007. Characterization of marine and terrestrial DOM in seawater using excitation-emission matrix spectroscopy. Chem. Rev., 107: 402–418.

Stedmon C A et al. 2003. Tracing dissolved organic matter in aquatic environments using a new approach to fluorescence spectroscopy. Mar. Chem., 82: 239–254.

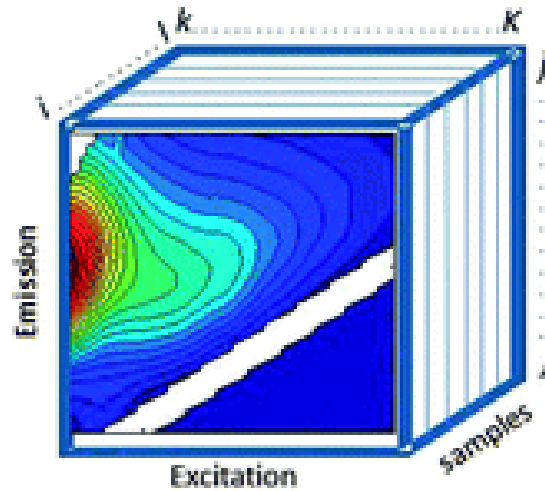
3D fluoreszcens spektrumok – kemometriai megközelítés



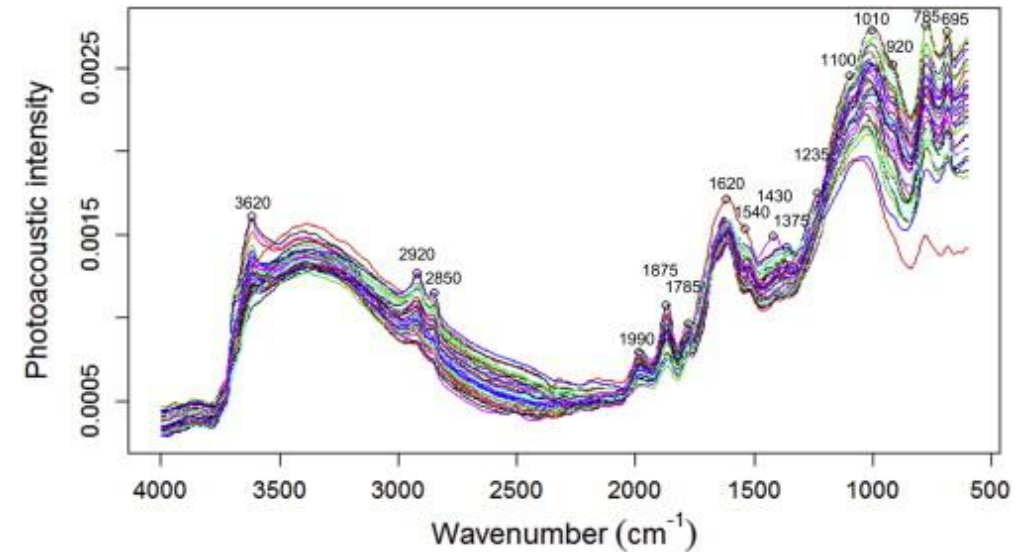
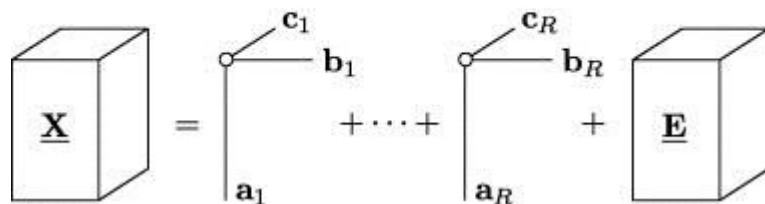
PARAFAC

3D fluoreszcens spektrumok – PARAFAC

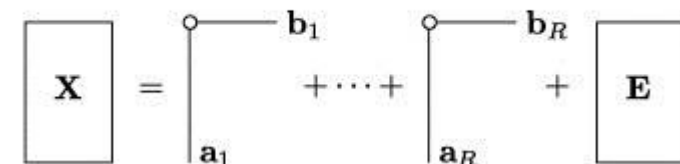
- PARAFAC: párhuzamos faktor analízis (**Parallel Factor Analysis**)
- trilineáris modell (a PCA bilineáris)



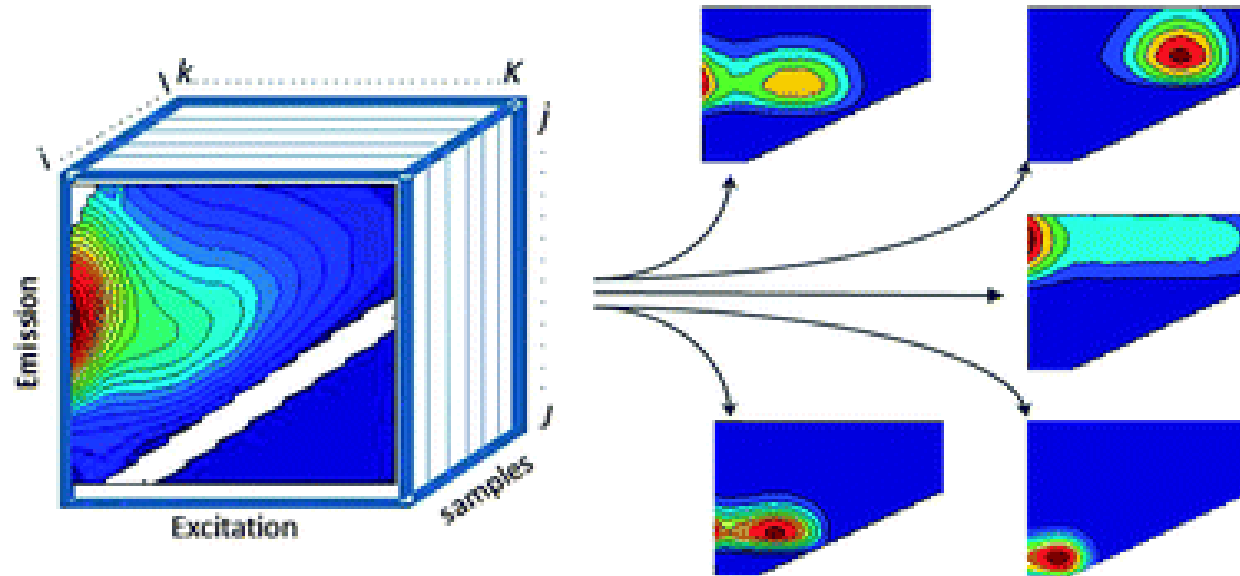
$$\text{Parafac: } \underline{\mathbf{X}} = \sum_{r=1}^R \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r \circ \mathbf{c}_r + \underline{\mathbf{E}}$$



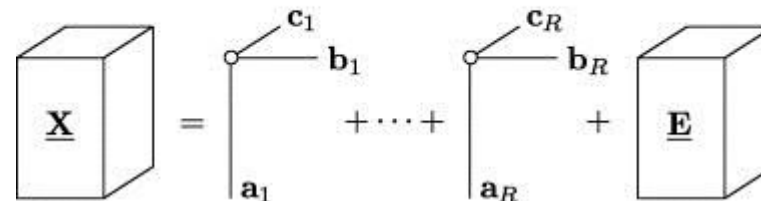
$$\text{PCA: } \mathbf{X} = \sum_{r=1}^R \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r + \mathbf{E}$$



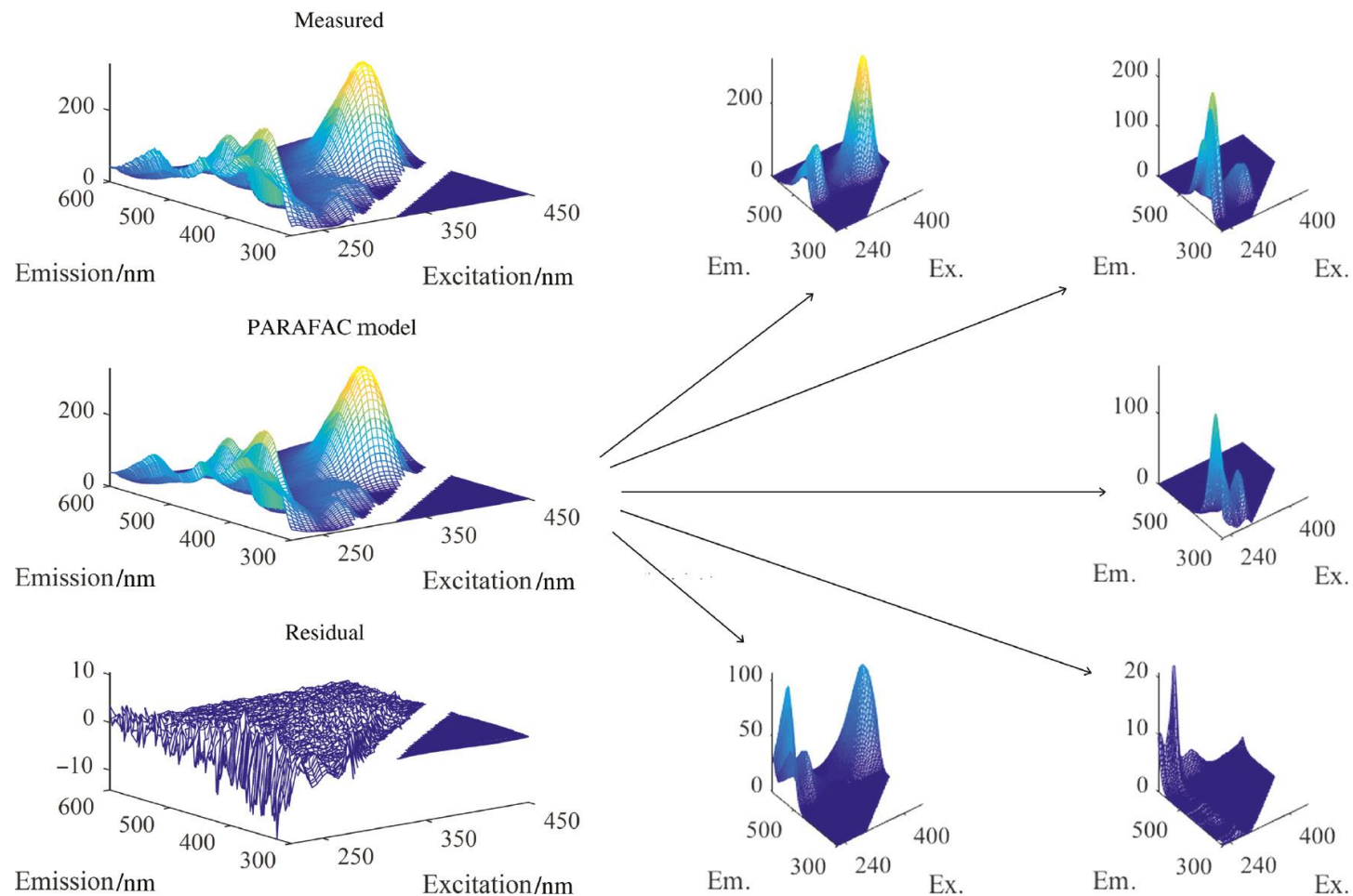
3D fluoreszcens spektrumok – PARAFAC



$$\text{Parafac: } \underline{\mathbf{X}} = \sum_{r=1}^R \mathbf{a}_r \circ \mathbf{b}_r \circ \mathbf{c}_r + \underline{\mathbf{E}}$$

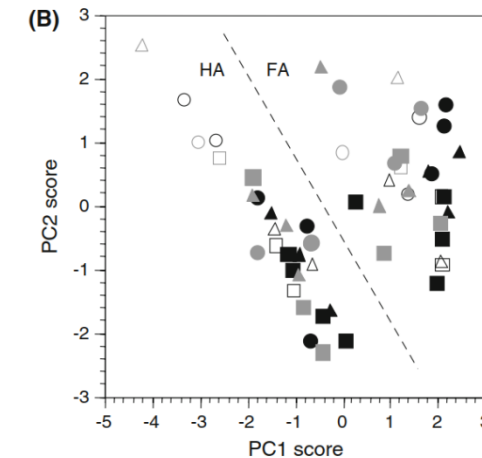
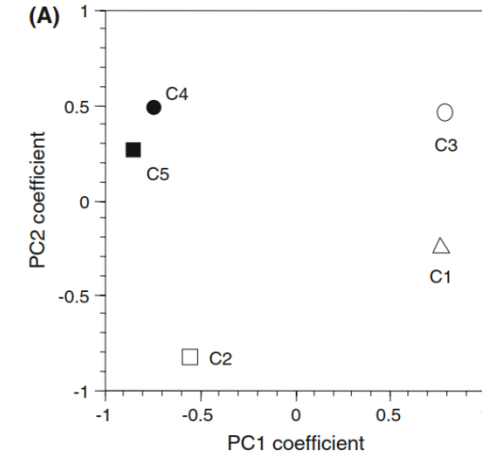
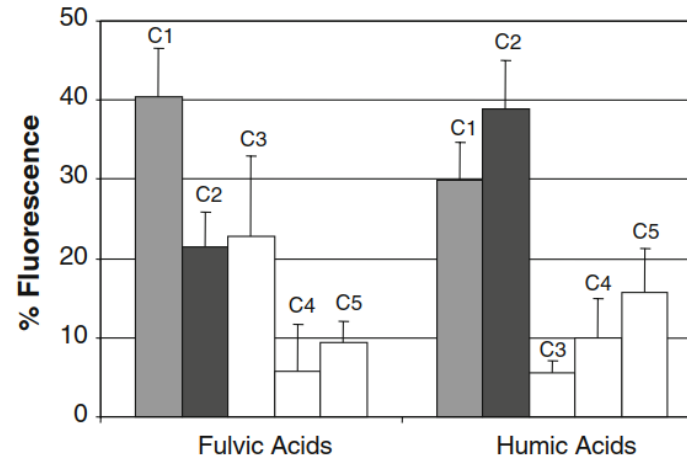
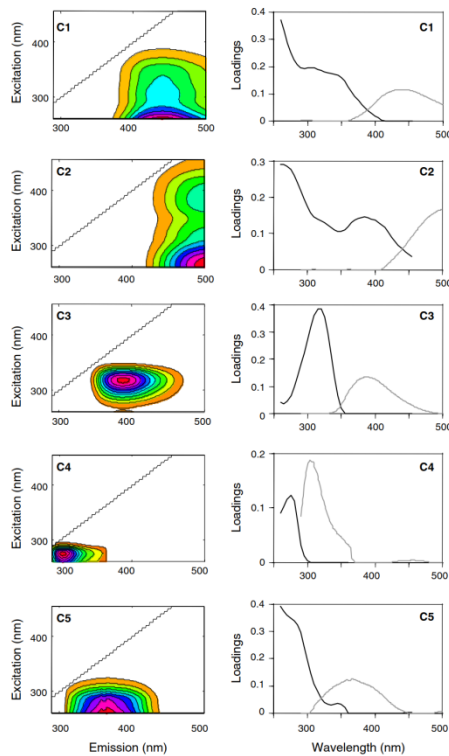


3D fluoreszcens spektrumok – PARAFAC



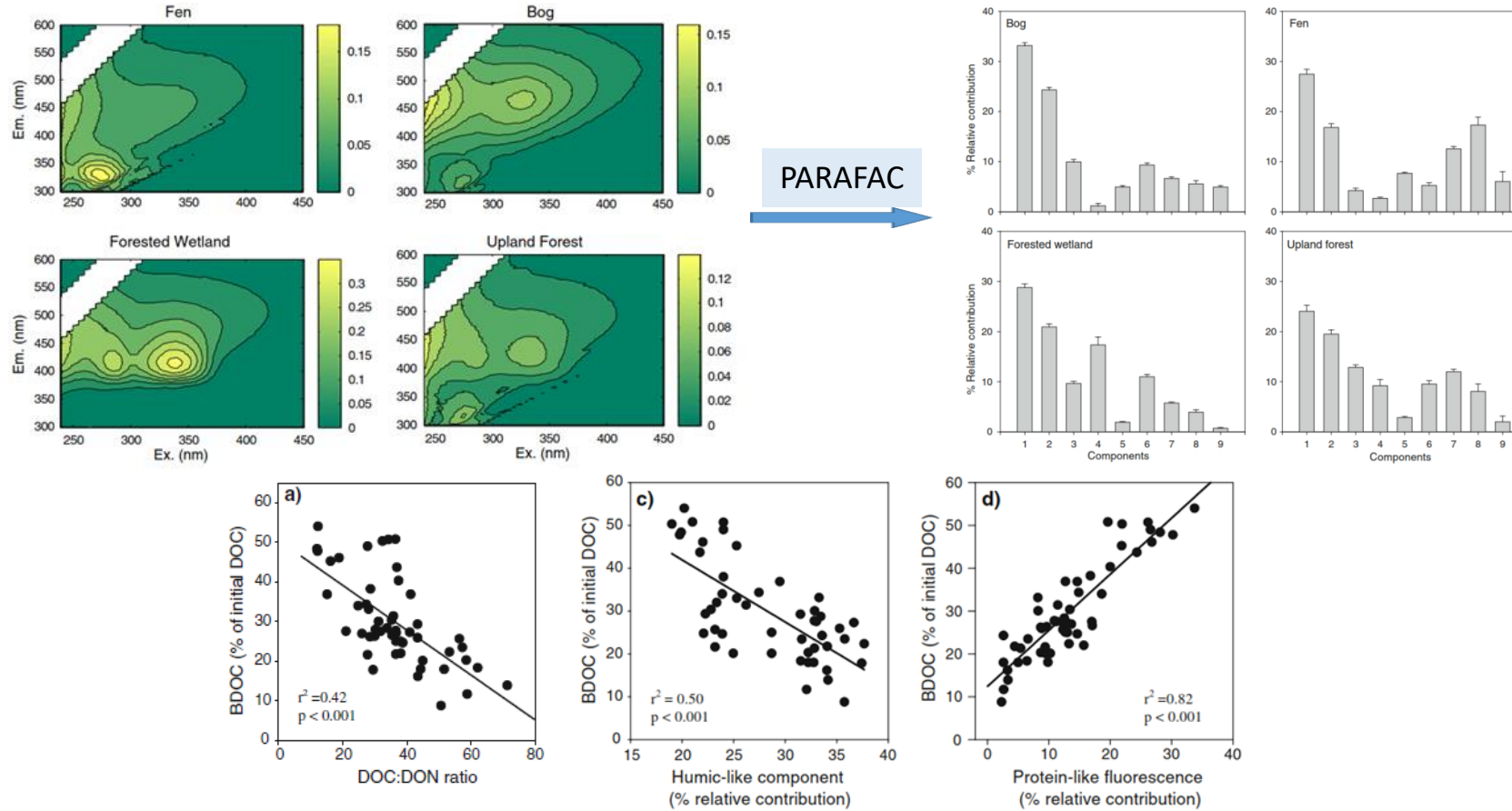
3D fluoreszcens spektrumok – PARAFAC (példák/1)

- a humuszanyagok különbözőségének értékelése



3D fluoreszcens spektrumok – PARAFAC (példák/2)

- a DOM frakció degradabilitása mennyiben függ annak kémiai szerkezetétől?



3D fluoreszcens spektrumok – PARAFAC (példák/3)

- szennyvíziszap szerves anyagának átalakulása anaerob körülmények között

