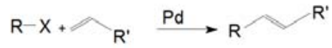
Az általuk kifejlesztett eljárásoknak a szintetikus szerves anyagok (gyógyszerek, színezékek, műanyagok) ipari előállításánál van jelentősége.

Az ú.n. Heck reakció segítségével aromás vegyületet tudnak könnyen kondenzálni vinil származékokkal szubsztituált aromás gyűrűkkel heterogén rendszerben palladiummkatalizátor jelenlétében:



Az eljárásnak színezék, gyógyszer és kozmetika iparban is jelentősége van.

A gyógyszeriparban különösen jelentősek azok a C-C keresztkötéseket megvalósító szintézisek, melyeket a másik két tudósról neveztek el. A Negishi-reakcióval a fémorganikus (főleg cink származékok) vegyületeken keresztül állíthatók elő a daganatelleni gyógyszerek (ilyen a Tamoxifén).

$$R_1 - BY_2 + R_2 - X \longrightarrow R_1 - R_2$$

A Suzuki-reakcióban bór-organikus vegyületek, boronsavak és származékaik segítségével állíthatók elő amelyekből (ezek nem mérgezők a szervezetre) vérnyomás csökkentő és daganatellenes szereket tudnak gyártani.

Számítógépes grafika

XIII. rész

Fénytan, megvilágítás és árnyékolás

A fény homogén és izotróp közegben egyenes vonalban terjed. Mérések szerint a fény légüres térben terjed a legnagyobb sebességgel, c = 299 792 458 m/s (*fénysebesség*).

*Fényforrás*nak nevezünk minden olyan entitást (természetest és mesterségest egyaránt), amely látható fény előállítására szolgál.

A fényforrásokat akkor látjuk, ha a róluk kiinduló fény a szemünkbe érkezik. A nem világító testeket akkor látjuk, ha valamely fényforrás megvilágítja azokat, és a róluk visszaverődő fény a szemünkbe jut. Ezeket a testeket *másodlagos fényforrás*oknak nevezzük.

Az egyenes vonalban haladó keskeny fényt *fénysugár*nak nevezzük. Több, együttes fénysugár alkotja a *fénynyaláb*ot.

Ha egy fénysugár egy objektumra (tárgy, test stb.) esik, akkor a fényt alkotó elektromágneses sugárzás hullámhosszának függvényében az objektum átengedi vagy nem engedi át a fénysugarat, általában az objektumok a rájuk eső fény egy részét elnyelik, más részét átengedik, illetve visszaverik.

A fény visszaverődése (*reflexió*) a tárgy felületétől függ.

Egy felületről visszavert fény jellemző tulajdonságai függnek a beeső fény intenzitásától, a fényforrás mértani alakjától és helyzetétől, valamint a felület anyagának a tulajdonságaitól.

Egy felületről visszavert fény két komponensből tevődik össze:

- egy *diffúz (szórt, terjedő)* komponensből és
- egy *spekuláris (tükrözött)* komponensből.

A diffúz visszaverődés

Egy felület által visszavert fény minden irányban terjed és az intenzitás nem függ a megfigyelő helyzetétől. Lambert-törvénye megadja egy pontszerű fényforrástól származó, tökéletesen diffúz felület által visszavert fény intenzitását. Ennek lapján egy tökéletesen diffúz felület által visszavert fény intenzitása egy *P* pontban, egyenesen arányos a beeső fény irányítása és a felületre a *P* pontban állított *normális*sal *(normálvektor)* bezárt szög koszinuszával.

$$I_d = I_i \cdot k_d \cdot \cos i,\ 0 \le i \le \pi/2$$

ahol:

I_i – a beeső fény intenzitása

k_d – a beeső fény diffúziós együtthatója $0 \le k_d \le 1$

i – a normálvektorral bezárt szög.

Egy felület valamely pontjában vett *normális*án azt az egységnyi hosszúságú vektort értjük, amely az adott pontban merőleges a felületre, vagyis a felület érintősíkjára. Az $s(u, v)$paraméteres formában adott felület (u_0, v_0) pontjában vett normálisa a

$$\frac{\partial}{\partial u} s(u_0, v_0) \times \frac{\partial}{\partial v} s(u_0, v_0)$$

vektor, az $F(x, y, z) = 0$ implicit formában adotté pedig a

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} F, \frac{\partial}{\partial y} F, \frac{\partial}{\partial z} F \right).$$

Minden normális három komponensből áll (x, y, z), és egységnyi hosszúságú, ezért

$$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = 1$$

Egy sík felület esetén, a merőleges irány a felület összes pontjára ugyanaz, de egy nem egyenletes felület esetén a normális a felület minden pontján más és más lehet.

Ha i nagyobb mint $\pi/2$, akkor a felület nem kap fényt a fényforrástól, más szóval a fényforrás a felület mögött van.

A diffúziós együttható függ a felület anyagának tulajdonságaitól és a beeső fény hullámhosszától. Ezt az együtthatót általában konstansnak szokták tekinteni egy felület minden pontjában.

Az objektumok nem csak a fényforrásoktól kapnak fényt, hanem a környező objektumok által visszavert vagy átengedett fény is eljut hozzájuk. A lokális megvilágítási modellekben, a más objektumok által visszavert vagy átengedett fényt *ambiens (környezeti)* fénynek nevezzük, és úgy ábrázoljuk mint egy egyenletesen eloszlott fényforrást a térben.

A megvilágítási modell a következőképpen alakul:

$$I_d = I_a \cdot k_a + I_i \cdot k_d \cdot \cos i,\ 0 \le i \le \pi/2$$

ahol:

I_a – az ambiens fény intenzitása

k_a – az ambiens fény diffúziós együtthatója, amely függ a felület anyagától.

Ha a fényforrás pontszerű és nagyon távol van az objektumoktól, a fényforrást *egyenes fényforrás*nak nevezzük.

A fény intenzitása fordítottan arányos a fényforrás és objektum közötti távolság négyzetével. Tehát, a fényforrástól távolabb eső objektumok gyengébben lesznek megvilágítva. Ezt figyelembe véve, a modell megváltozik:

$$I_d = I_a \cdot k_a + f_{att} \cdot I_i \cdot k_d \cdot \cos i,\ 0 \le i \le \pi/2$$

ahol $f_{att} = 1/d^2$ egy tompító függvény, *d* a távolság a fényforrás és az objektum között.

Ha a fényforrás nagyon közel van, az intenzitás túl nagy lesz, ezért a f_{att}-ot ez esetben másképp írjuk fel:

$$f_{att} = \min\left(\frac{1}{c_1 + c_2 \cdot d + c_3 \cdot d_2}, 1\right)$$

ahol c_1, c_2, c_3 a fényforráshoz rendelt konstansok, c_1-et úgy választjuk meg, hogy a nevező ne legyen túl kicsi, ha a távolság kicsi. Ahhoz, hogy a tompítás megtörténjen, 1-el határoltuk el a függvényt.

Mivel általában a fény nem monokromatikus és a felület amire esik úgyszintén színes is lehet, a fenti képletet átírhatjuk a fénynek minden komponensére. Ha például a használt fénymodell az RGB modell, akkor a piros komponensre a képlet a következőképpen néz ki:

$$I_{dR} = I_{aR} \cdot k_a + f_{att} \cdot I_{iR} \cdot k_d \cdot \cos i,\ 0 \le i \le \pi/2$$

és hasonlóan felírhatjuk az I_{dG}-t és I_{dB}-t.

Általánosan:

$$I_{d\lambda} = I_{a\lambda} \cdot k_a + f_{att} \cdot I_{i\lambda} \cdot k_d \cdot \cos i,\ 0 \le i \le \pi/2$$

Ez bármilyen hullámhosszú fényre és bármilyen megvilágítási modellre igaz.

A spekuláris visszaverődés

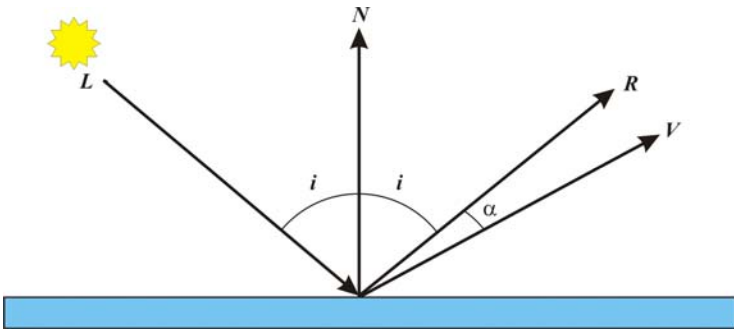
Ha a fénysugarak egy nagyon fényes és egyenletes, sima felületre esnek, akkor *tükrös visszaverődés*ről beszélhetünk.

Egy tökéletes visszaverő anyag (pl. egy tükör) a fényt csak egy irányba veri vissza.

A tükörnek azt a pontját, ahol a beeső fénysugár eléri a tükröt, és visszavert fénysugárrá változik, *beesési pont*nak nevezzük. A beesési pontban a tükörre állított merőleges a *beesési merőleges*. A beeső fénysugár és a beesési merőleges által bezárt szög a *beesési szög*, a visszavert fénysugár és a beesési merőleges által bezárt szög a *visszaverődési szög*.

A fényvisszaverődés törvényei:

- A visszaverődési szög mindig ugyanakkora, mint a beesési szög.
- A beeső sugár, a beesési merőleges és a visszavert sugár egy síkban vannak.
- Azok a fénysugarak, amelyek merőlegesen esnek a felületre, önmagukban verődnek vissza.
- Ha a beeső fénysugarak párhuzamosak, akkor a visszavert fénysugarak is párhuzamosak.



1. ábra
A fényvisszaverődés

Mivel R és L szimmetrikus az N normálishoz viszonyítva, a visszavert fényt csak akkor veszi észre a megfigyelő, ha épp a megfelelő irányításon nézi.

A nem tökéletesen visszaverő felületeknél a megfigyelőhöz jutott fénymennyiség függ a spekulárisan visszavert fény eloszlásától. A sima felületeknél az eloszlás egyenletes, a durvább felületeknél viszont szétszóródik. Általában a visszavert fénynek ugyanolyan jellemzői vannak, mint a beeső fénynek.

A nem tökéletesen visszaverő felületeknél a hirtelen intenzitás-csökkenést, amikor a beesési szög nő, $\cos^n \alpha$ -val lehet megközelíteni, ahol n a spekuláris visszaverési hatványa a felület anyagának.

Így a spekuláris fény intenzitása:

$$I_s = I_i \cdot w(i, \lambda) \cdot \cos^n \alpha$$

ahol:

I_i – a beeső fény intenzitása
$w(i, \lambda)$ – a visszaverődési függvény
i – a normálvektorral bezárt szög
λ – a beeső fény hullámhossza.

Az n-et az anyag típusától függően kell megválasztani. A nagy n értékek a fémekre és más fényes anyagokra jellemzők, a kis n értékek pedig a nemfémes anyagokra, mint például a papír.

Mivel a visszaverési függvény eléggé komplex, ezért a gyakorlatban egy konstanssal lehet helyettesíteni, amit *spekuláris visszaverődési konstans*nak nevezünk.

Így a felületek megvilágítási modellje a következőképpen alakul:

$$I_\lambda = I_{a\lambda} \cdot k_a + f_{att} \cdot I_{i\lambda} \cdot \left(k_d \cdot \cos i + k_s \cdot \cos^n \alpha\right)$$

Felhasználva, hogy:

$$\cos i = \frac{L \cdot N}{|L||N|} = L_u \cdot N_u$$

$$\cos \alpha = \frac{R \cdot V}{|R||V|} = R_u \cdot V_u$$

a képletet így írhatjuk át:

$$I_\lambda = I_{a\lambda} \cdot k_a + f_{att} \cdot I_{i\lambda} \cdot \left(k_d \cdot (L_u \cdot N_u) + k_s \cdot (R_u \cdot V_u)^n\right)$$

Általában nem csak egy fényforrás világítja meg az objektumokat, s mindegyik hozzájárul a visszavert fény intenzitásához. Feltételezve, hogy az objektumot *m* fényforrás világítja meg, a képlet így alakul:

$$I_\lambda = I_{a\lambda} \cdot k_a + \sum_{j=1}^{m} f_{att\,j} \cdot I_{i\lambda\,j} \cdot \left(k_d \cdot \left(L_{u_j} \cdot N_u\right) + k_s \cdot \left(R_{u_j} \cdot V_u\right)^n\right)$$

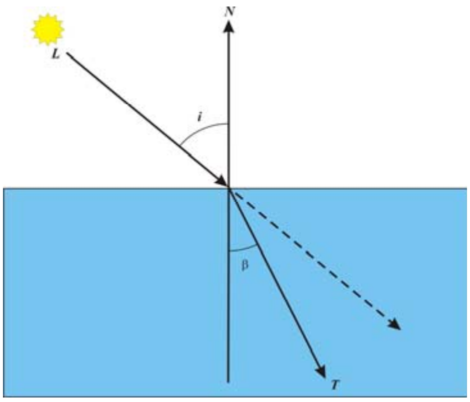
A fénytörés, áttetszőség és átlátszóság

Két közeg határfelületére érve a beeső fény egy része visszaverődik, a többi megtörik és a másik közegben halad tovább. Ha a két közeg átlátszó anyagból van, akkor a fénysugár az egyik átlátszó anyagból egy másik átlátszó anyagba hatol, egy kis része verődik csak vissza, és a nagyobbik része a fénysugárnak megváltoztatott iránnyal halad tovább.

Ezt a jelenséget *fénytörés*nek (*refrakció*) nevezzük.

A fénytörés törvényei:

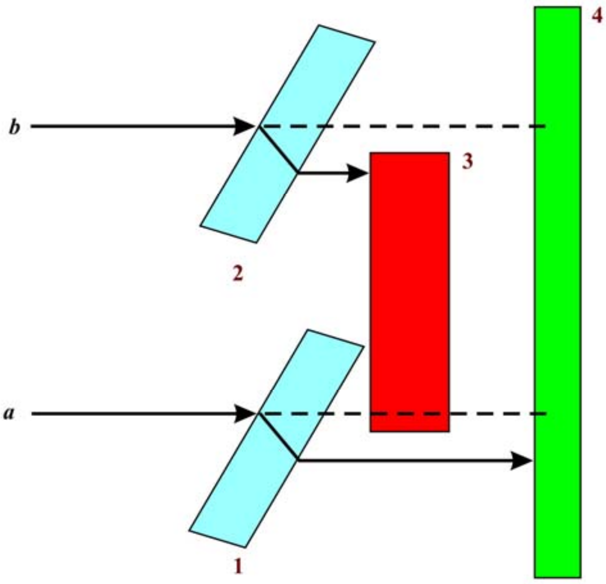
- A beeső fénysugár, a megtört fénysugár és a beesési merőleges egy síkban van.
- A beesési szög szinusza egyenesen arányos a törési szög szinuszával (Snellius-törvény, 1620): $\sin i = n_{2,1} \cdot \sin \beta$. A megtört fénysugár és a beesési merőleges által bezárt szöget *törési szög*nek nevezzük. Az $n_{2,1}$ arányossági tényező a második közegnek az első közegre vonatkozó *relatív törésmutató*ja, amelynek értéke a két közegben mért fénysebességeknek a hányadosa: $n_{2,1} = c_1 / c_2$.
- A beesési szög és a törési szög szinuszának hányadosa ugyanarra a két közegre állandó, ez a relatív törésmutató.
- Ha az első közeg légüres tér, akkor a másodi közegre vonatkoztatott törésmutatót *abszolút törésmutató*nak nevezzük.
- Ha a beeső fénysugár merőleges a felületre, akkor a fény irányváltoztatás nélkül halad tovább.
- Ha a fénysugár párhuzamos oldalú (*planparalell*) lemezen haladva keresztül kettős törést szenved, a fény iránya nem változik, csak eltolódik az eredeti iránytól.
- Ha a fény prizmán keresztül halad át, akkor is kétszeres törést szenved, de a fény iránya megváltozik.



2. ábra
A fénytörés

Az egyes objektumok *átlátszó*k vagy *áttetsző*k lehetnek. A fény terjedése az átlátszó objektumokon keresztül spekuláris, míg az áttetszőkön keresztül diffúz.

A 3. ábrán a 3-as és 4-es objektum átlátszatlan, az 1-es és 2-es pedig átlátszó, ugyanazzal a törésmutatóval. Ha nem vesszük figyelembe a fénytörést, az *a* fénysugár a 3-as objektummal találkozna. A valóságban, a törés miatt a 4-es objektumot metszi, amely emiatt megvilágított objektum lesz. Hasonlóan, a fénytörés figyelembevétele nélkül, a *b* fénysugár a 4-es objektumot metszené a 3-as helyett.



3. ábra
A fénytörés szerepe

A fénytörés torzítja is az objektumokat a perspektivikus vetítéshez hasonlóan. A valósághűség érdekében számolni kell ezzel is.

Ha egy látható felület átlátszó, a színét a látható felület színének és a rögtön utána található felület színének az összetevéséből kapjuk meg, a következő interpolálási képletet használva:

$$I_\lambda = \left(1-k_{t_1}\right)\cdot I_{\lambda_1} + k_{t_1}\cdot I_{\lambda_2}, \quad 0 \le k_{t_1} \le 1$$

ahol k_{t_1} a látható felület átlátszhatóságát méri az adott pontban. Ha k_{t_1} = 0, akkor a felület átlátszatlan, ezért a pont színe a felület színe lesz. Ha k_{t_1} = l, a felület tökéletesen átlátszó, és a színe nem járul hozzá a pont színéhez. Ha k_{t_1} = l és a hátul levő felület szintén átlátszó, a számításokat rekurzívan folytatjuk mindaddig amíg egy átlátszatlan felületet kapunk vagy a háttérhez értünk.

Az átlátszóság eme megközelítése nem ad jó eredményt a görbe felületeknél, azért, mert a felület körvonalához közeledve az anyag vastagsága megváltoztatja az átlátszóságot. Ebben az esetben a következő egyszerű nemlineáris megközelítést használjuk:

$$k_t = k_{t_{\min}} + \left(k_{t_{\max}} - k_{t_{\min}}\right)\left[1-\left(1-N_z\right)^m\right]$$

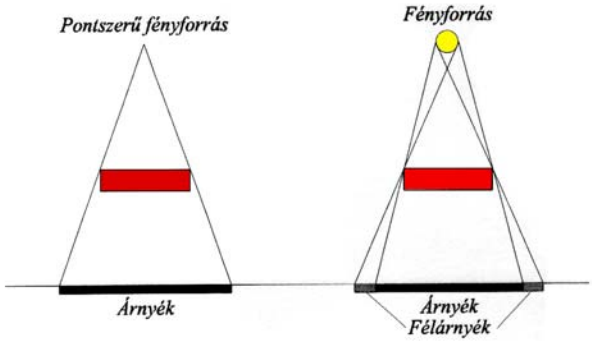
ahol $k_{t_{\min}}$ és $k_{t_{\max}}$ az objektum minimális illetve maximális fénytörését jellemzi, N_z a pontba húzott normálvektor *z* komponense és *m* egy hatvány, amely az átlátszhatóságot jellemzi (a használt értékek általában 2 és 3).

Ez a képlet meghatározza a felület áttetszési együtthatóját.

Árnyékolás

Ha a megfigyelő egy fényforrás által megvilágított színtér objektumait nézi, a fényforrás pozíciójától különböző pozícióból, az objektumok által létrehozott árnyékokat is megfigyelheti.

Egy árnyék két részből áll: a *valódi árnyék*ból és a *félárnyék*ból. A valódi árnyék sűrű, fekete és jól elkülöníthető határa van. A félárnyék körülveszi a valódi árnyékot. A félárnyékban levő objektumok egy kis fényt kapnak a fényforrástól. A pontszerű fényforrások csak valódi árnyékot hoznak létre.



4. ábra
Árnyék és félárnyék

Az árnyékok meghatározása hasonló feladat, mint az objektumok láthatóságának a meghatározása (lásd *A sugárkövetési algoritmus* című fejezetet). Ezért egy árnyékolt kép létrehozása, a látható felületek kétszeri meghatározását jelenti: egyszer a fényforrások pozíciójából, majd a megfigyelő pozíciójából figyelve a színteret.

Két típusú árnyék létezik: *sajátos* és *nem sajátos árnyék*ok. A sajátos árnyékot az objektum hozza létre úgy, hogy az fény nem jut el az egyik oldalához. A nem sajátos árnyék egy másik objektum által létrehozott árnyék.

A nem sajátos árnyékot meg lehet határozni úgy, hogy a fényforrás pozíciójából levetítjük azokat az oldalakat, amelyek nincsenek sajátos árnyékokkal árnyékolva. Az így kapott sokszögek megadják a nem sajátos árnyékot.

Egy jobb módszer az, ha az objektum körvonalát vetítjük le a fényforrás pozíciójából. Egy felület pontja, amely látható a megfigyelő pozíciójából de a fényforráséból nem, az árnyékolási intenzitással vagy más objektumoktól származó intenzitással lesz megjelenítve.

Egy felület P pontjában a fény intenzitásának a kiszámítása a következőképpen alakul:

$$I_{\lambda} = I_{a\lambda} \cdot k_a + \sum_{j=1}^{m} S_j \cdot f_{att\,j} \cdot I_{i\lambda\,j} \cdot \left(k_d \cdot \left(L_{u\,j} \cdot N_u\right) + k_s \cdot \left(R_{u\,j} \cdot V_u\right)^n\right)$$

ahol $S_j = 0$, ha a fény a j fényforrásból nem ér el a P pontba, és $S_j = 1$, ha a fény a j fényforrásból elér a P pontba.

Árnyalás

Raszteres (pixeles) megjelenítőkön a látható felületek színének és fényerősségének helyes megválasztásával elősegíthetjük a tárgyak alakjának és tömörségének érzékeltetését. Ezt nevezzük *árnyalás*nak.

A háromdimenziós színtér raszterképének valósághűsége az árnyalást előidéző fizikai jelenségek sikeres szimulációjától függ. Árnyalási modellt használunk a felület megjelenítésekor a fényerősség és a szín kiszámításához.

Generatív számítógépes grafikában a következő árnyalási modellek terjedtek el:

- drótvázas modell
- árnyalási poliéder használata
- Gouraud-módszer
- Phong-módszer
- Pontok független árnyalása

Drótvázas modell (wireframe) esetén a geometriai modell három- és négyszögekből áll, csak az élvonalak látszanak.

Árnyalási poliéder használata (flat) esetén a megjelenítés a lapok független árnyalásával történik.

A *Gouraud-módszer* folytonos árnyalást állít elő. Mindegyik lap csúcspontjaiban meghatározza a normálisokat, majd ezekből a csúcsok színét. A lapon belüli árnyalást a csúcsponti értékekből interpolálja. A Gouraud-módszer akkor jó, ha a lapon belül a szín valóban közelítőleg lineárisan változik. Ez igaz a diffúz visszaverődésű objektumokra, de elfogadhatatlan tükrös illetve spekuláris visszaverődésű felületekre. A lineáris interpoláció ilyen esetben egyszerűen kihagyhatja vagy szétkenheti a fényforrás tükröződő foltját.

5. ábra
Gömb képe drótvázas, poliéderes, Gouraud,
Phong és pontonkénti árnyalással

A *Phong-módszer* is folytonos árnyalást állít elő, alapelve, hogy nem a színeket, hanem a normálvektorokat interpolálja és ebből számítja ki minden pixel színét. Több számítást igényel, de valósághűbb eredményt ad. A Phong-módszer a színtérben nemlineáris interpolációnak felel meg, így nagyobb poligonokra is megbirkózik a tükrös felületek gyorsan változó radianciájával.

*Pontok független árnyalása*kor minden pontban egyenként meghatározzuk a normálvektort és ebből a pixel színét. A legpontosabb, de a leglassúbb számítási modell.

Kovács Lehel

A radioaktivitásról

II. rész

A radioaktív sugárzás az atomok magjában történő átalakulások eredménye. Az anyag által kibocsátott sugárzás mennyisége egyenesen arányos az adott anyagmennyiségben lezajló átalakulások számával Az időegység alatt lezajló magátalakulások száma osztva az időtartammal, jellemzi az anyag aktivitását. A radioaktív anyag (sugárforrás) aktivitása időben csökken. Az aktivitás egysége a becquerel (jele Bq). Egy becquerel (1Bq) az aktivitása annak a sugárforrásnak, amelyben időegységenként egy magátalakulás történik. Ez gyakorlatilag nagyon kis mennyiség, ezért a kBq, MBq, GBq egységeket szokták használni.

A radioaktív bomlási folyamatok során a sugárzó atomnak megváltozhat a rendszáma és a tömegszáma is, tehát a rádioaktív bomlás során egy kémiai elemből (anyaelemből) egy új elem (leányelem) jön létre. Előfordulhat, hogy ez utóbbi is radioaktív, így újabb bomlás történik. Ez a folyamat addig tart, amíg egy stabil elemet nem eredményez az utolsó magátalakulás. Az ilyen atomátalakulási folyamatokat nevezik bomlási sornak. A radioaktív bomlás során a tömegszám vagy néggyel csökken (az alfa-bomlás esetében), vagy nem változik (a béta-bomlás és gamma-bomlás esetében). Ezért négy bomlási sor létezik attól függően, hogy a tömegszám négyes osztású maradéka 0, 1, 2 vagy 3. Ebből a négy bomlási sorból csak az a három maradt meg, amelyeknél a leghosszabb felezési idejű izotóp felezési ideje nagyságrendileg összemérhető a Föld életkorával (^{238}U, ^{235}U és a ^{232}Th anya-elemekkel kezdődő bomlási sorok). A negyedik (neptúnium) anyaelemének bomlási ideje csak kétmillió év, így ez már a bomlások során elfogyott, de mesterséges úton, laboratóriumban előállítható.