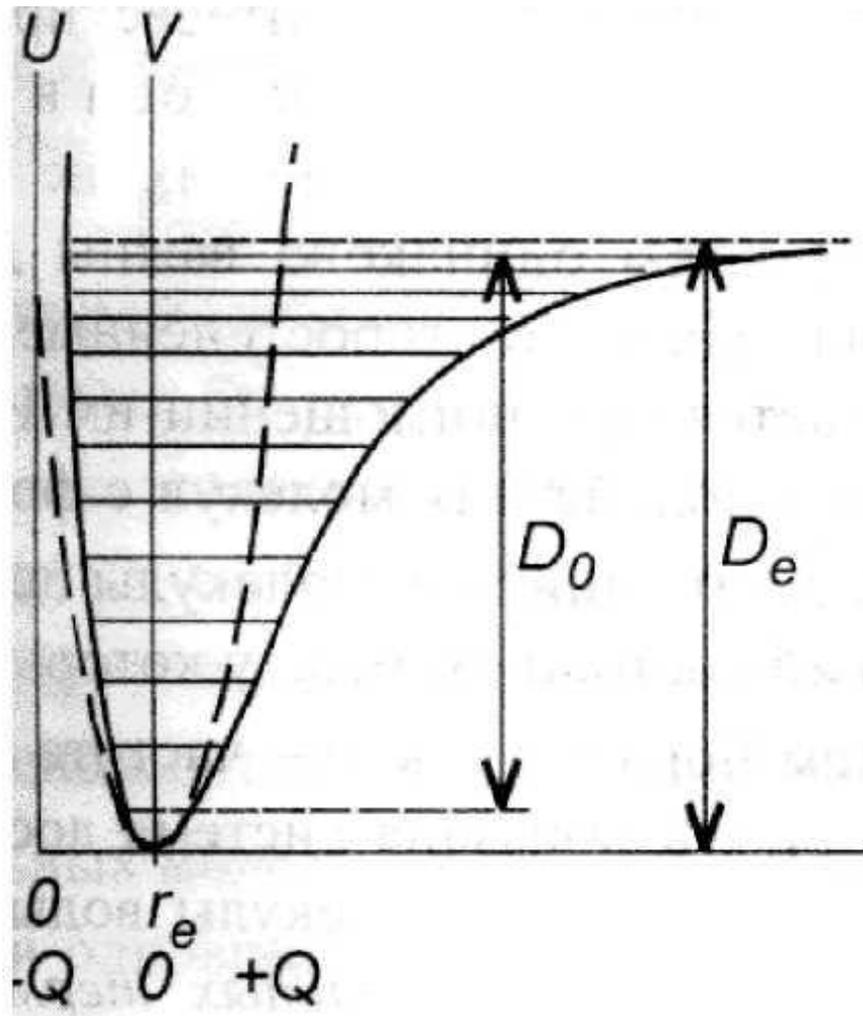


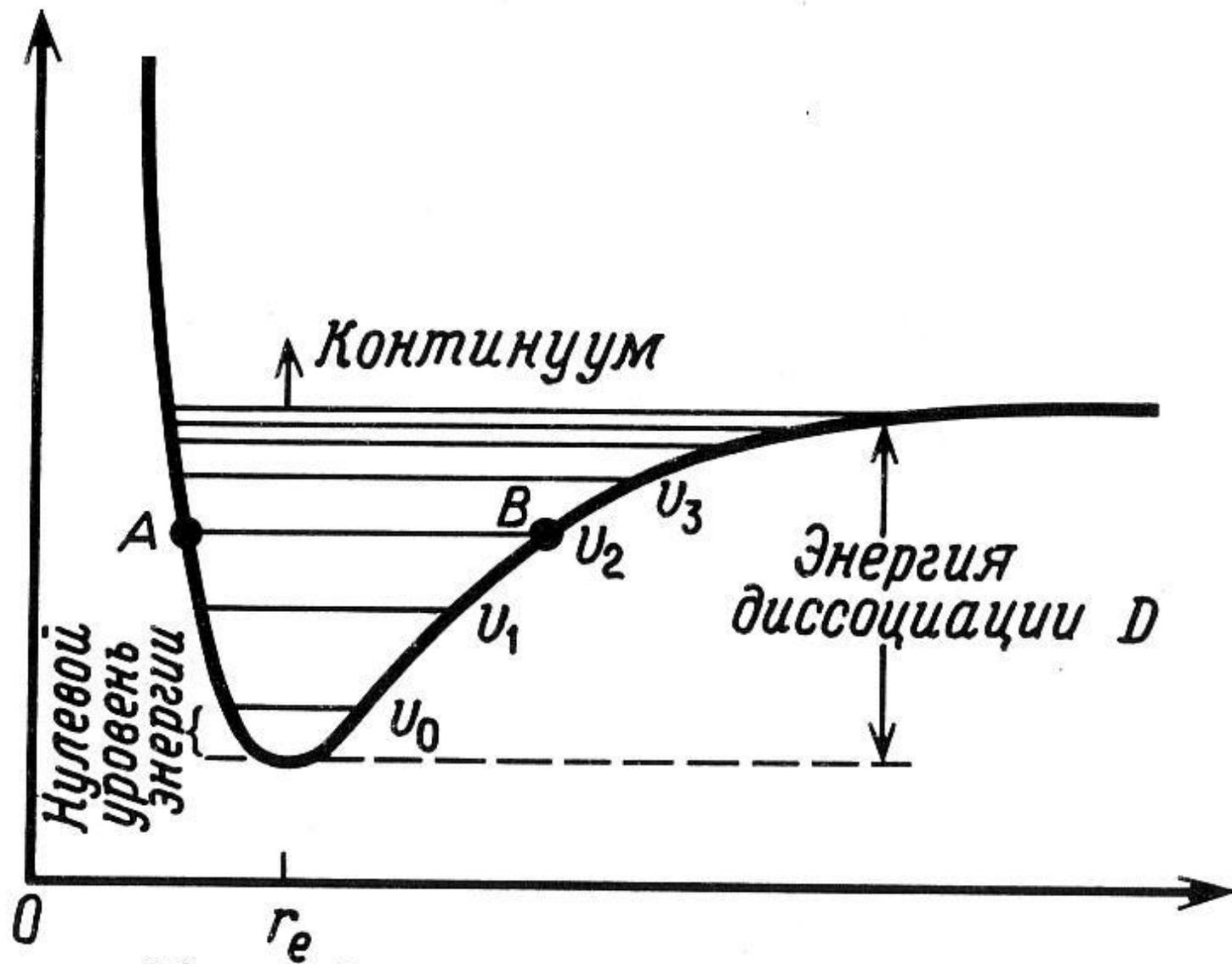
Колебательная ИК спектроскопия

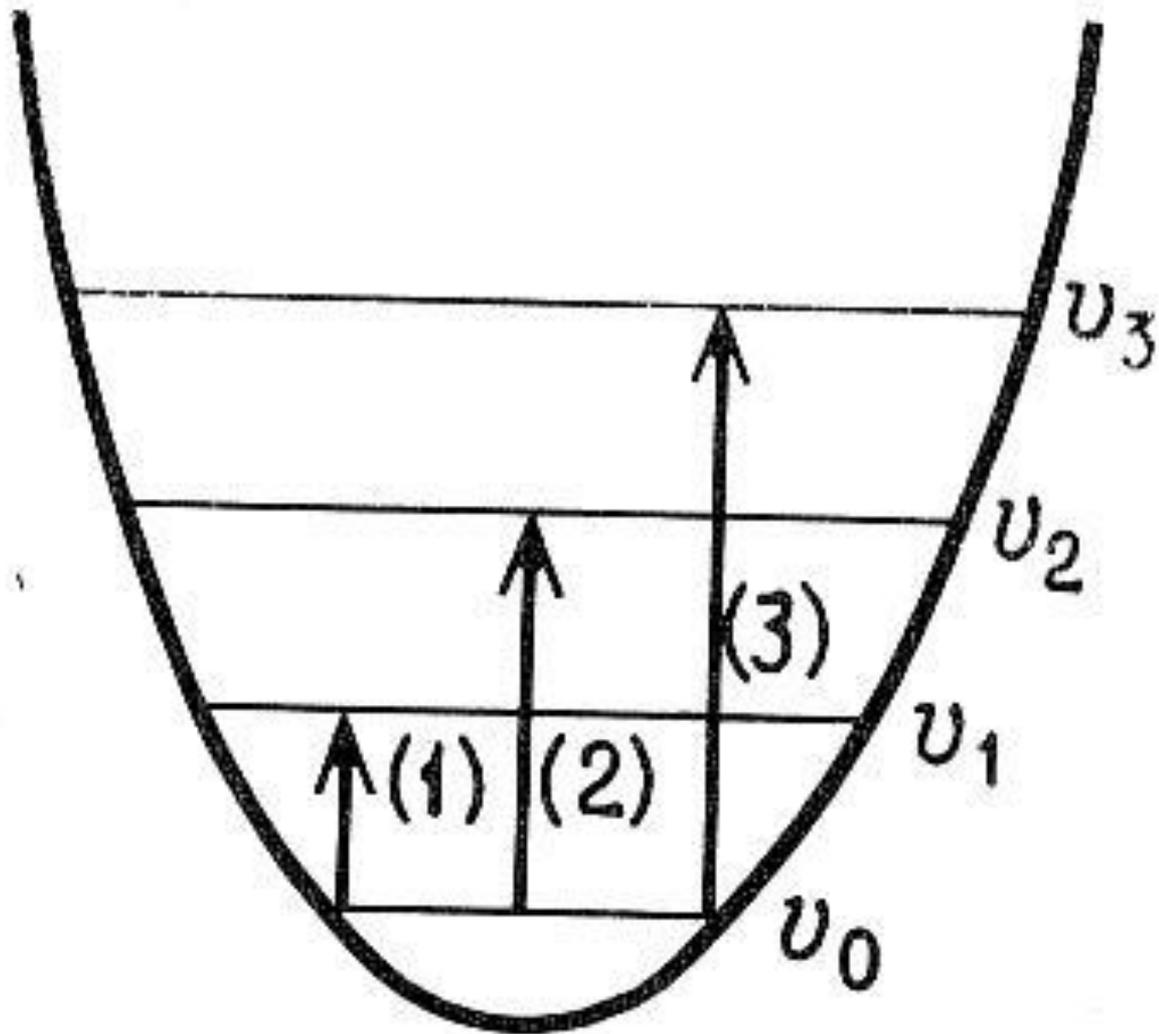
Квантовый гармонический осциллятор

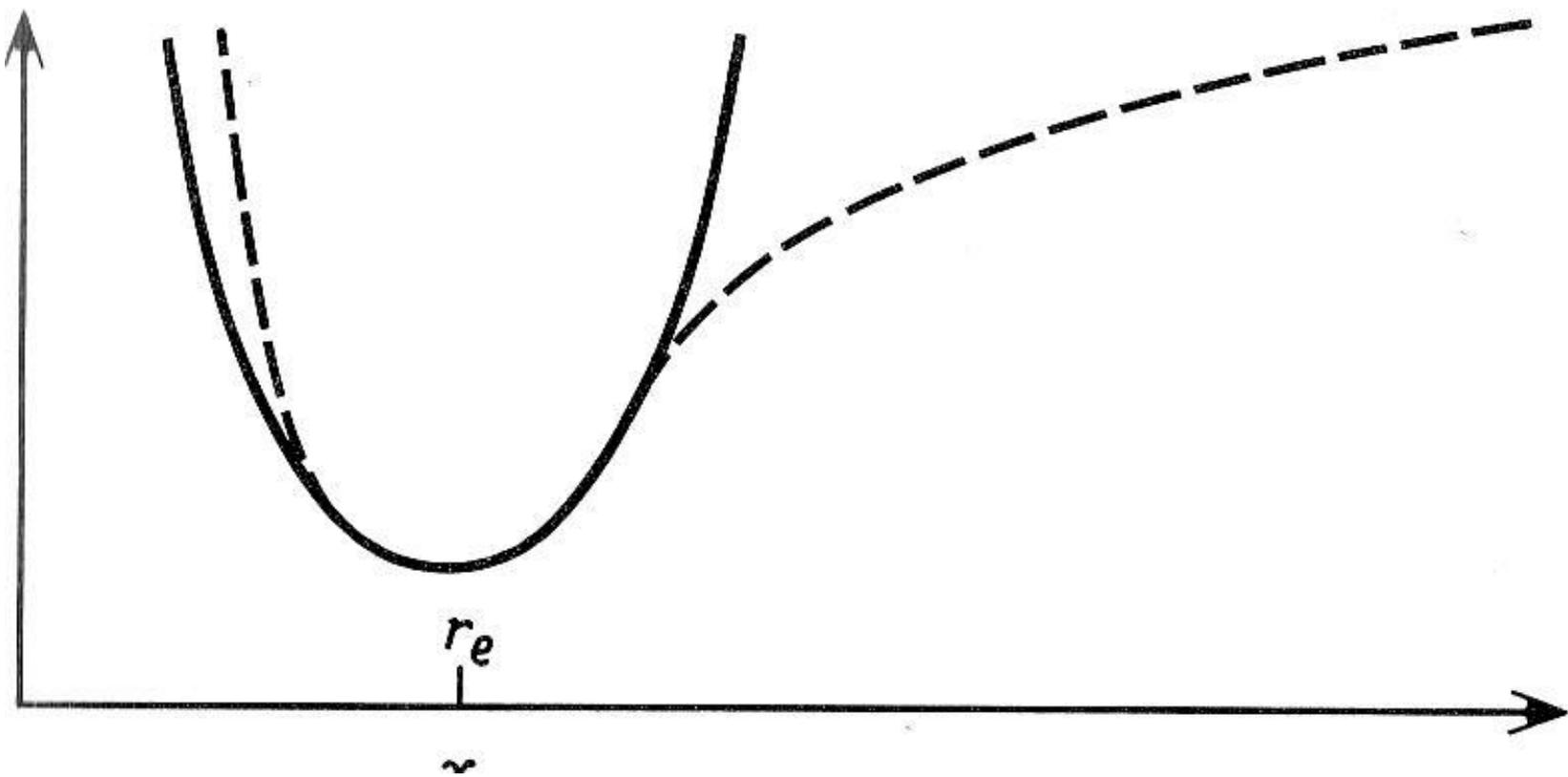
$$E_k(\mathbf{v}_k) = \hbar \nu_{ek} \left(\mathbf{v}_k + \frac{1}{2} \right)$$

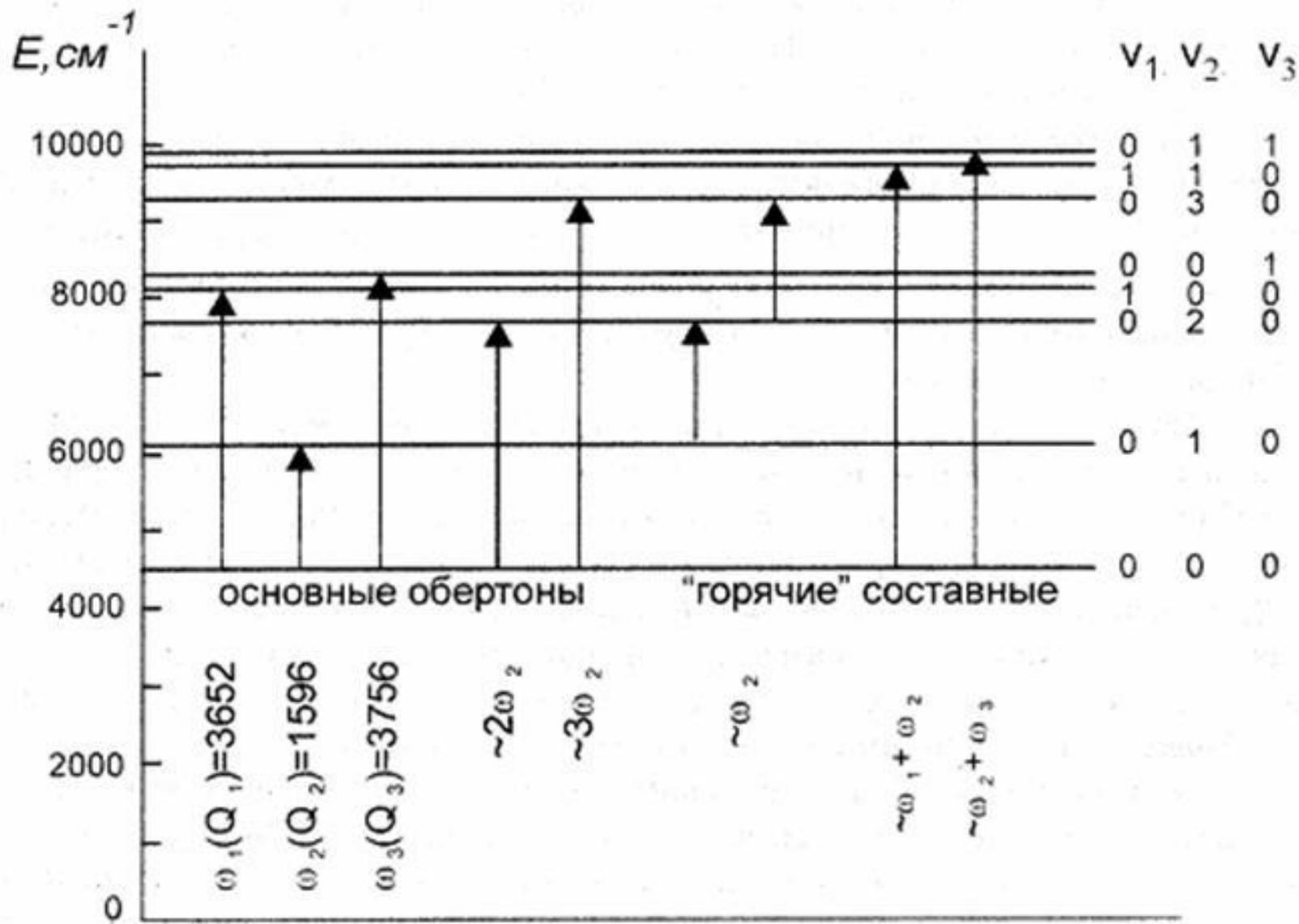
$$U(r) = D_e \left(1 - e^{-\beta(r-r_e)} \right)^2$$





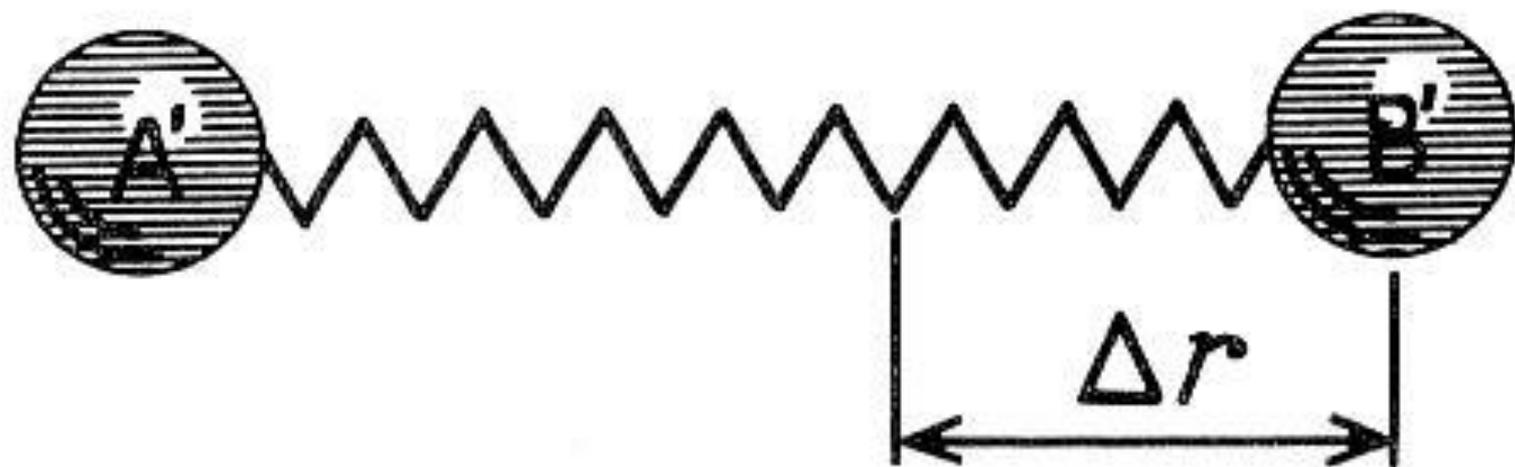




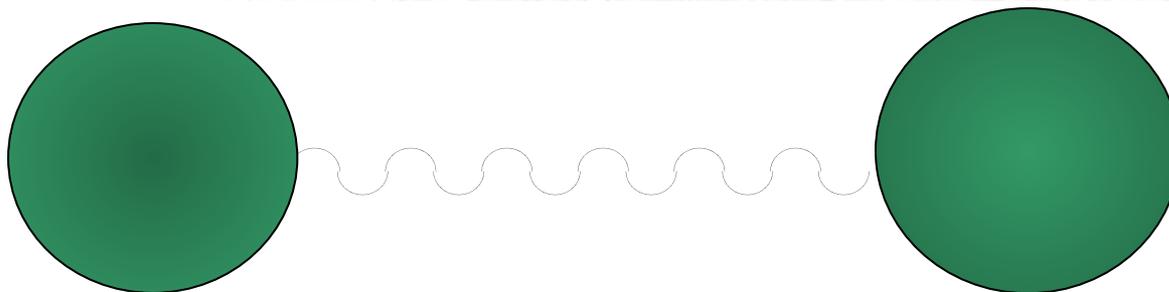
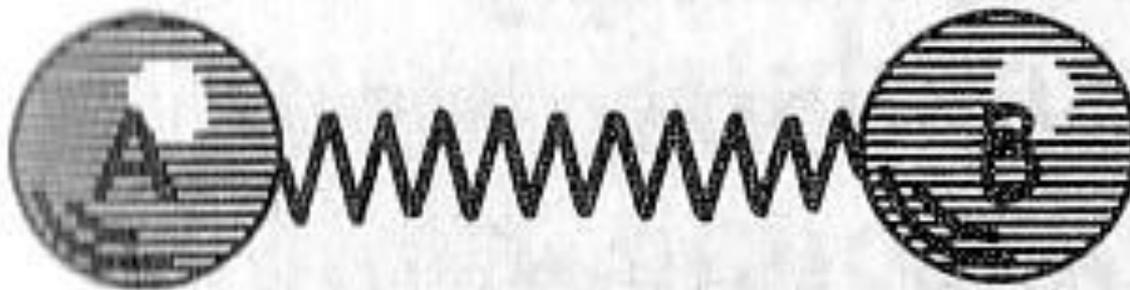


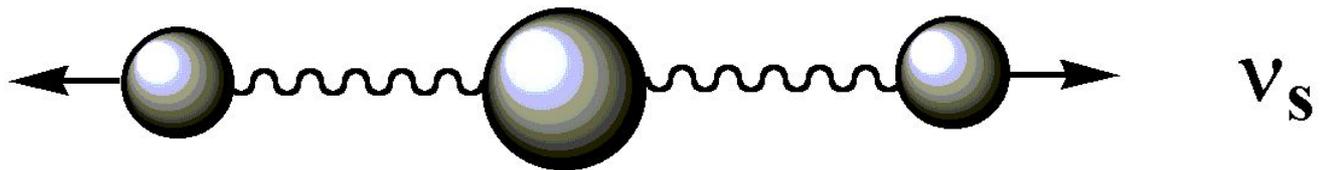
**Полная колебательная энергия молекулы как
сумма энергий осцилляторов**

$$E_v(v_1, v_2, v_3, \dots, v_n) = \sum_{k=1}^n h\nu_{ek} \left(v_k + \frac{d_k}{2} \right)$$

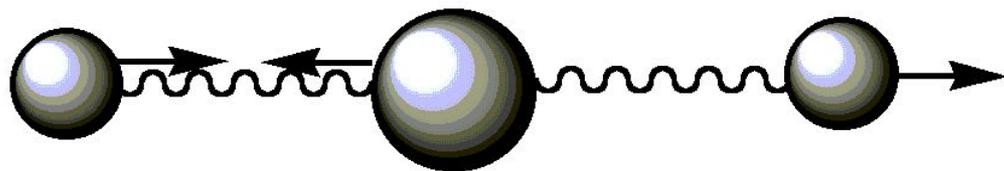


Модель линейного гармонического осциллятора

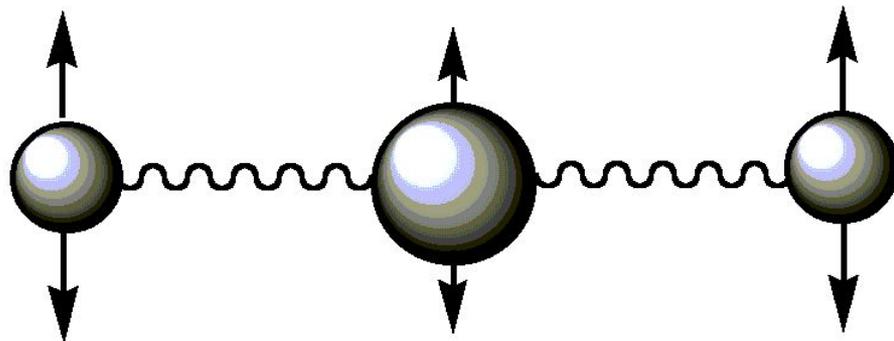




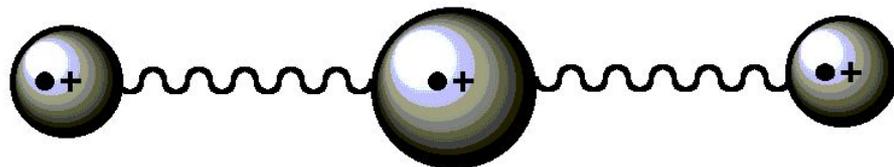
v_s

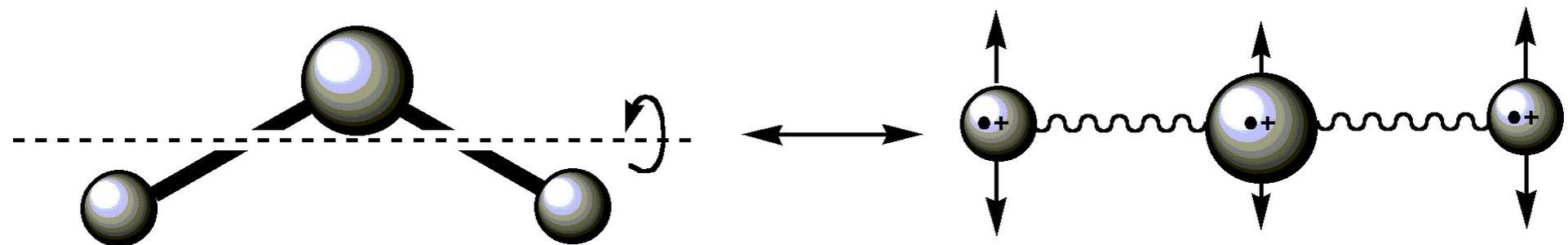


v_{as}

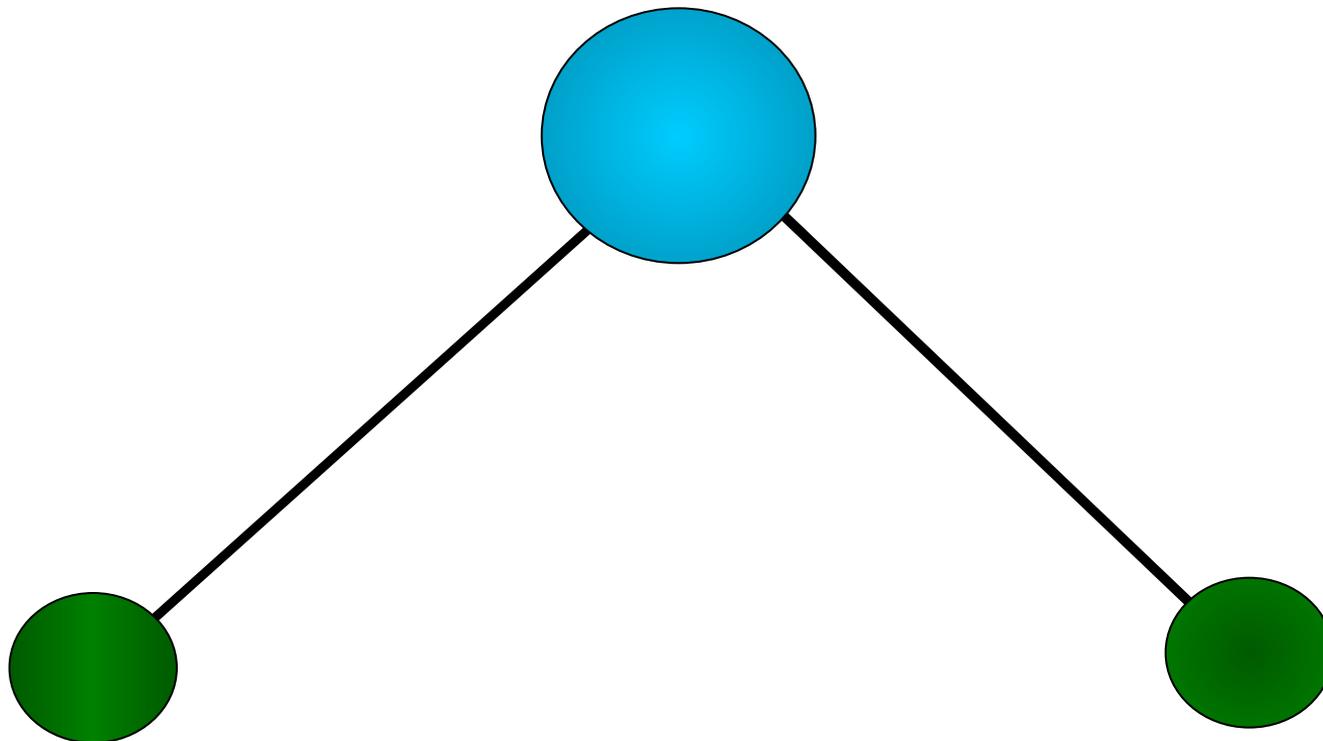


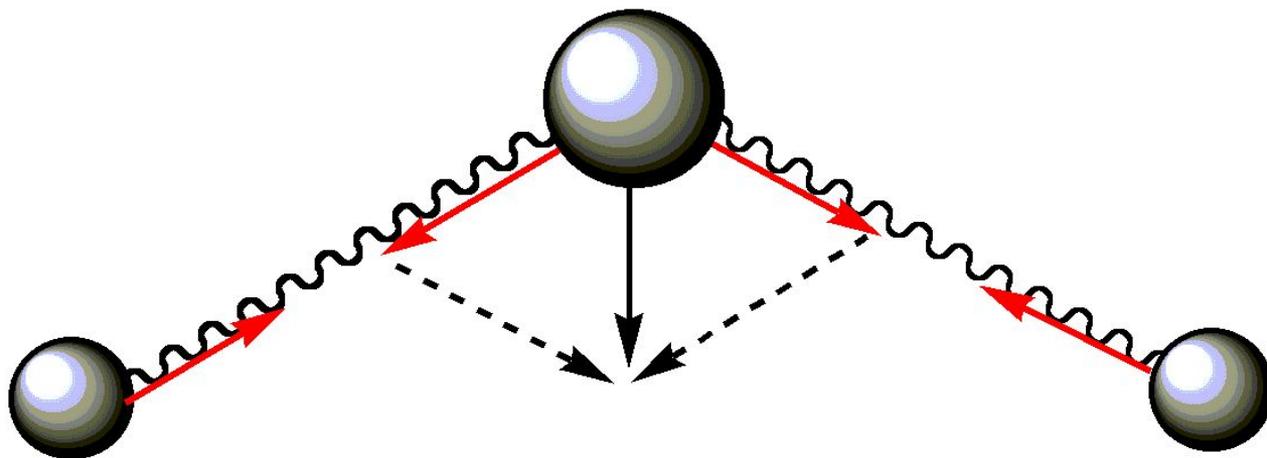
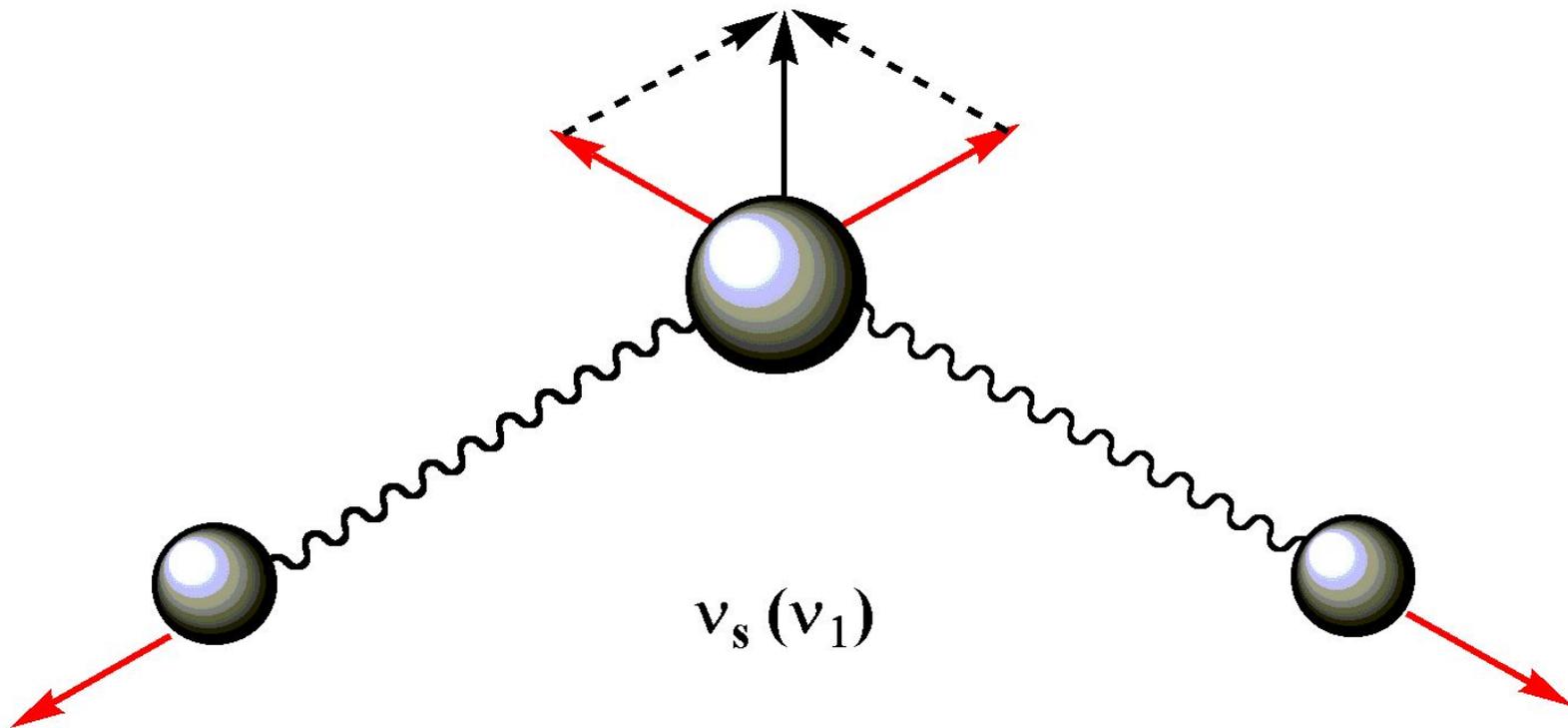
δ



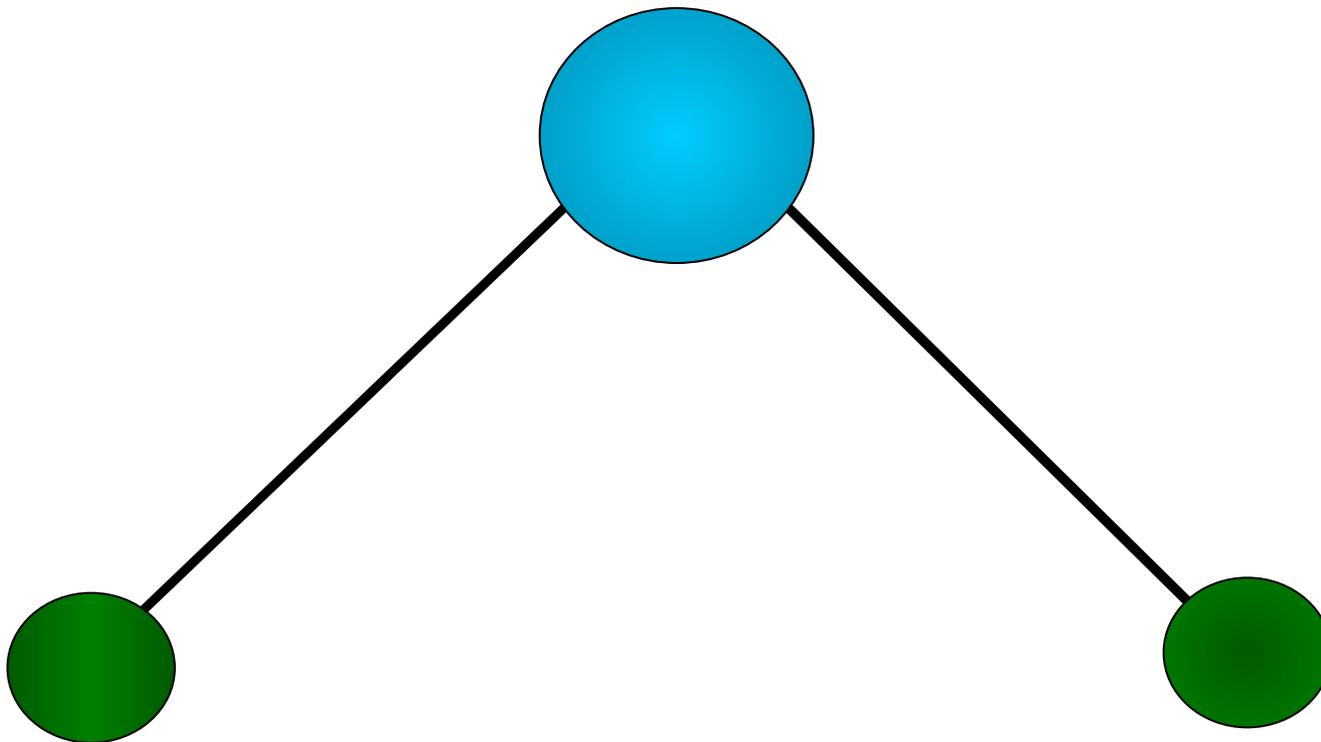


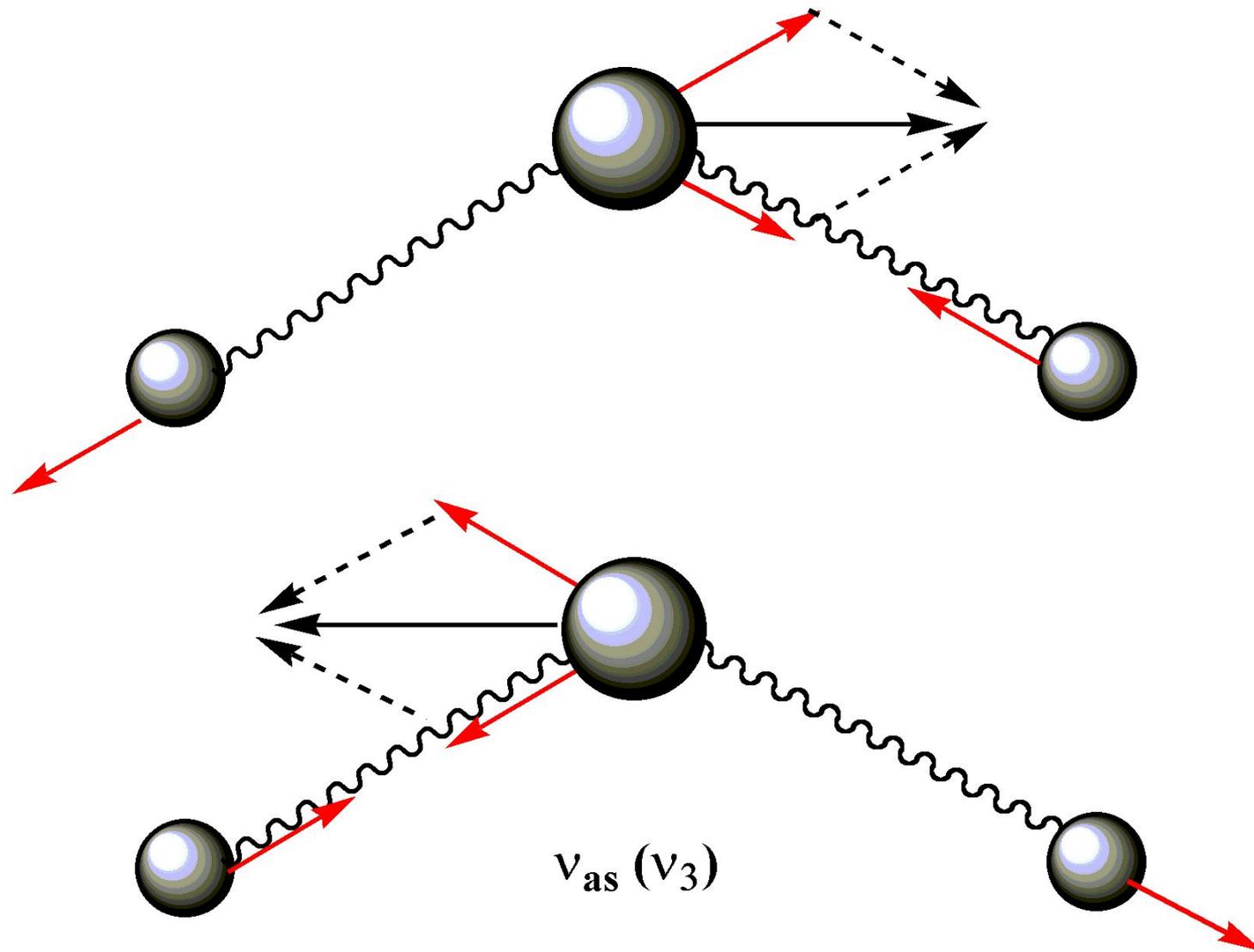
Симметричные валентные колебания

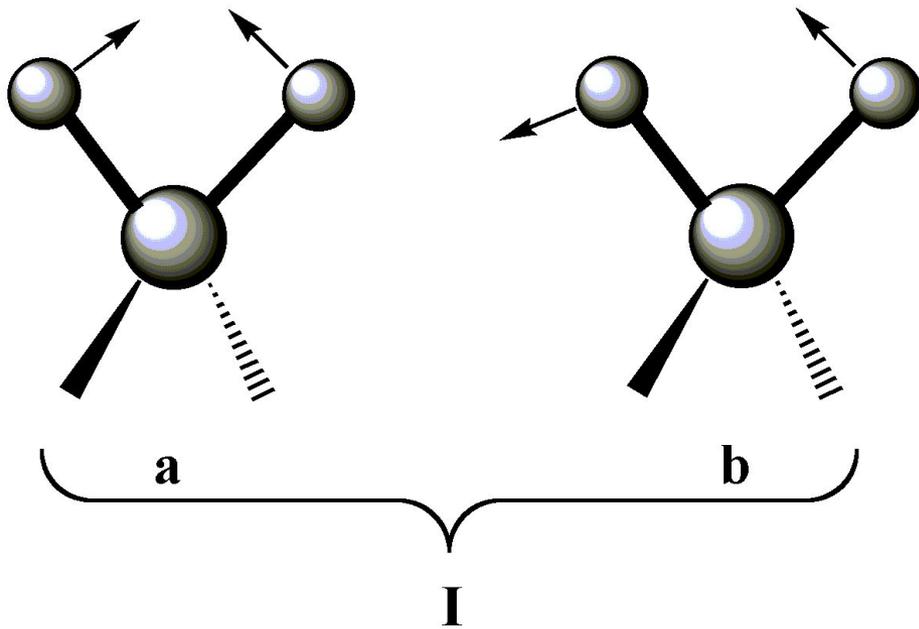




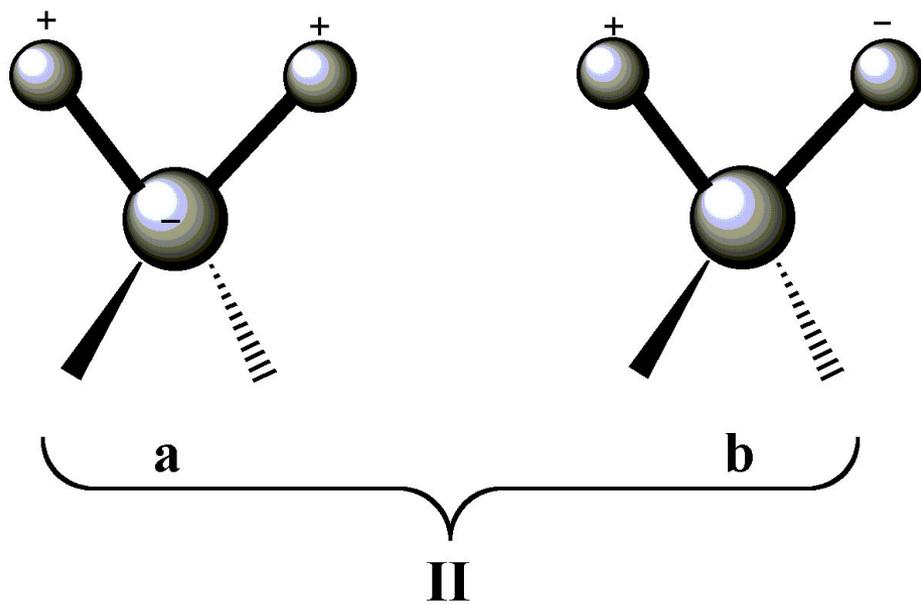
Ассиметричные валентные колебания





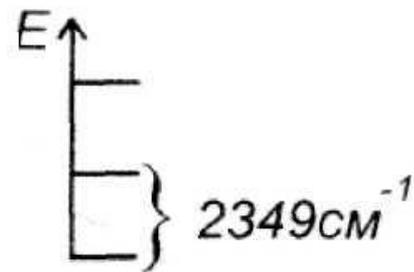
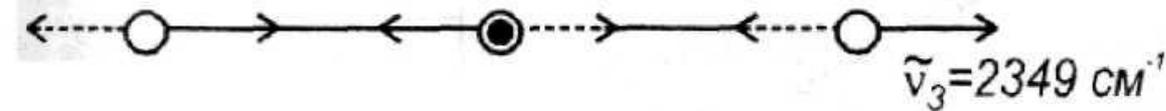
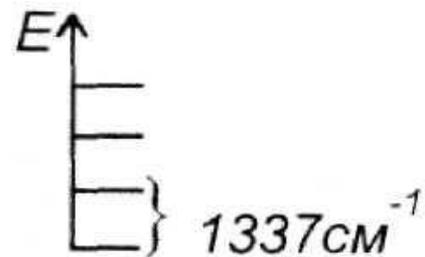


Плоскостные

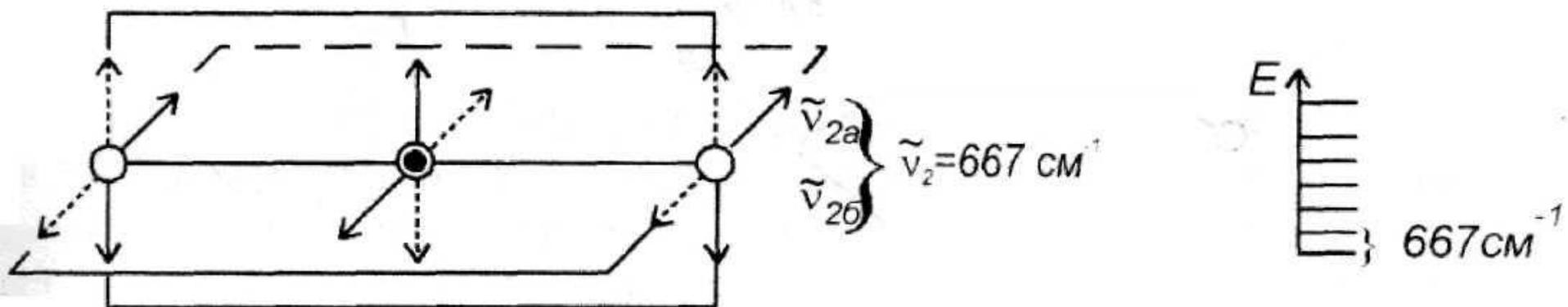


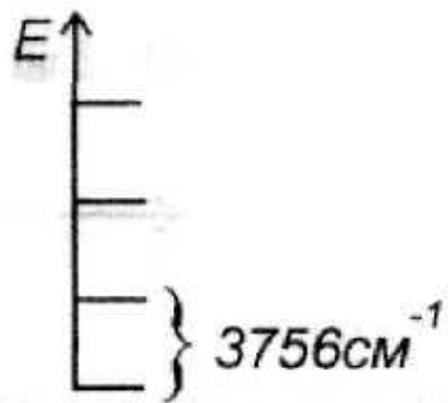
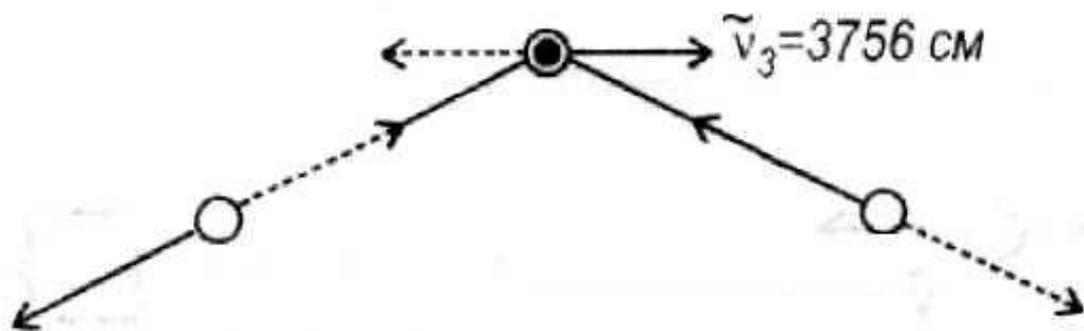
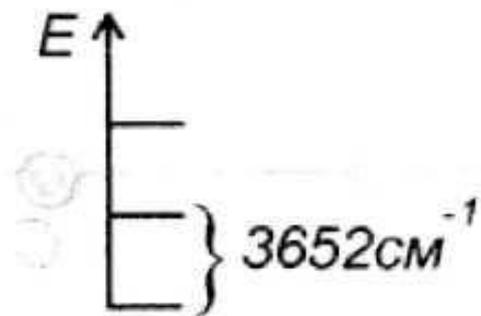
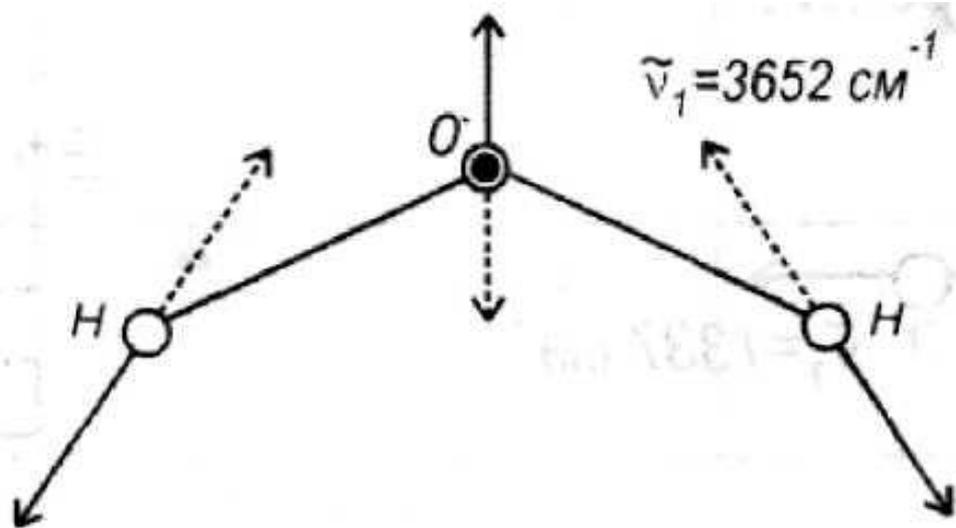
Внеплоскостные

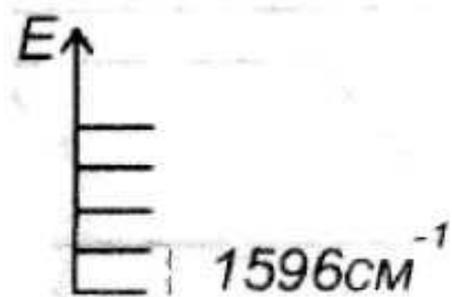
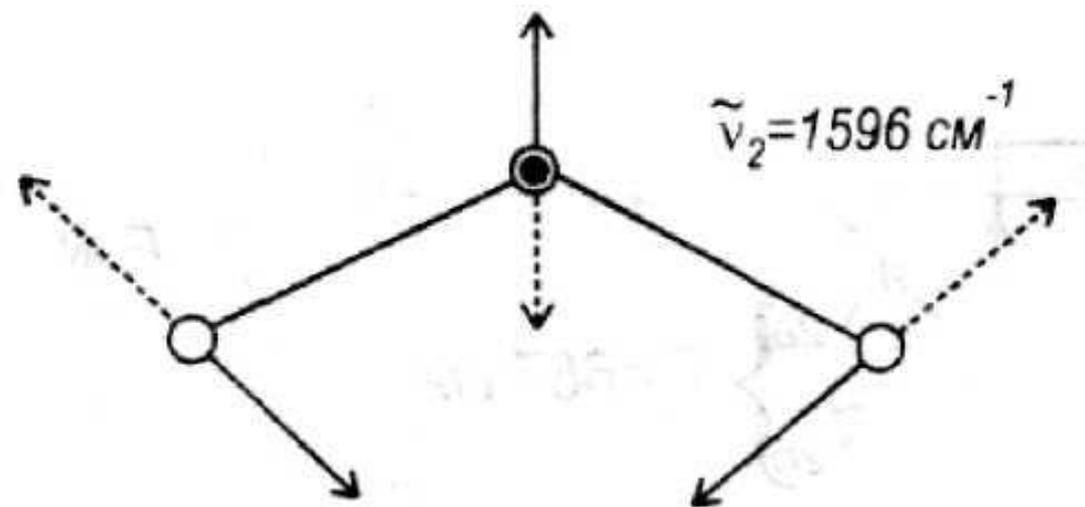
Симметричные и асимметричные колебания в молекуле CO₂



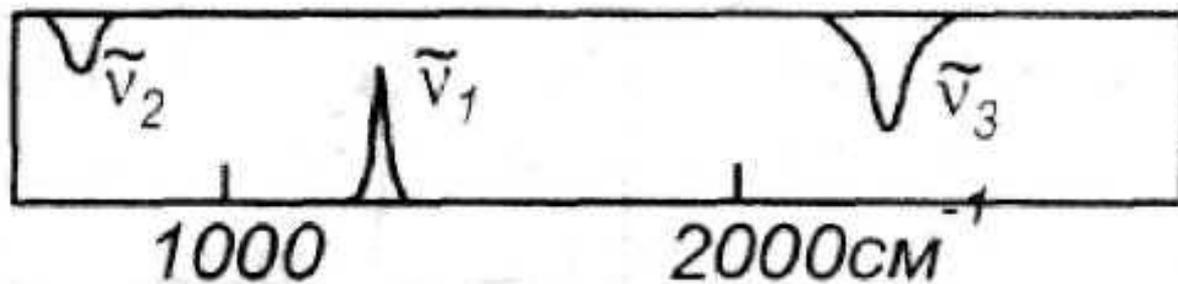
Двухкратно-вырожденные деформационные колебания в молекуле CO_2





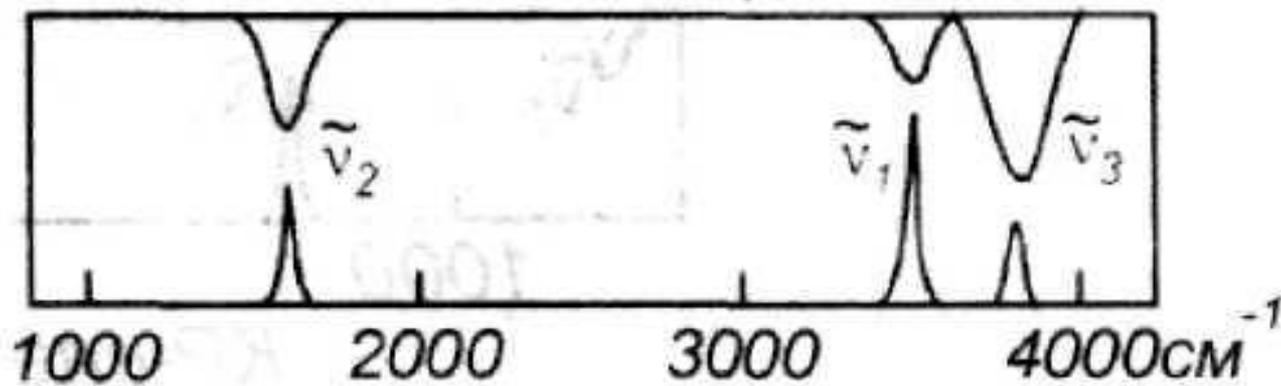


ИК-спектр

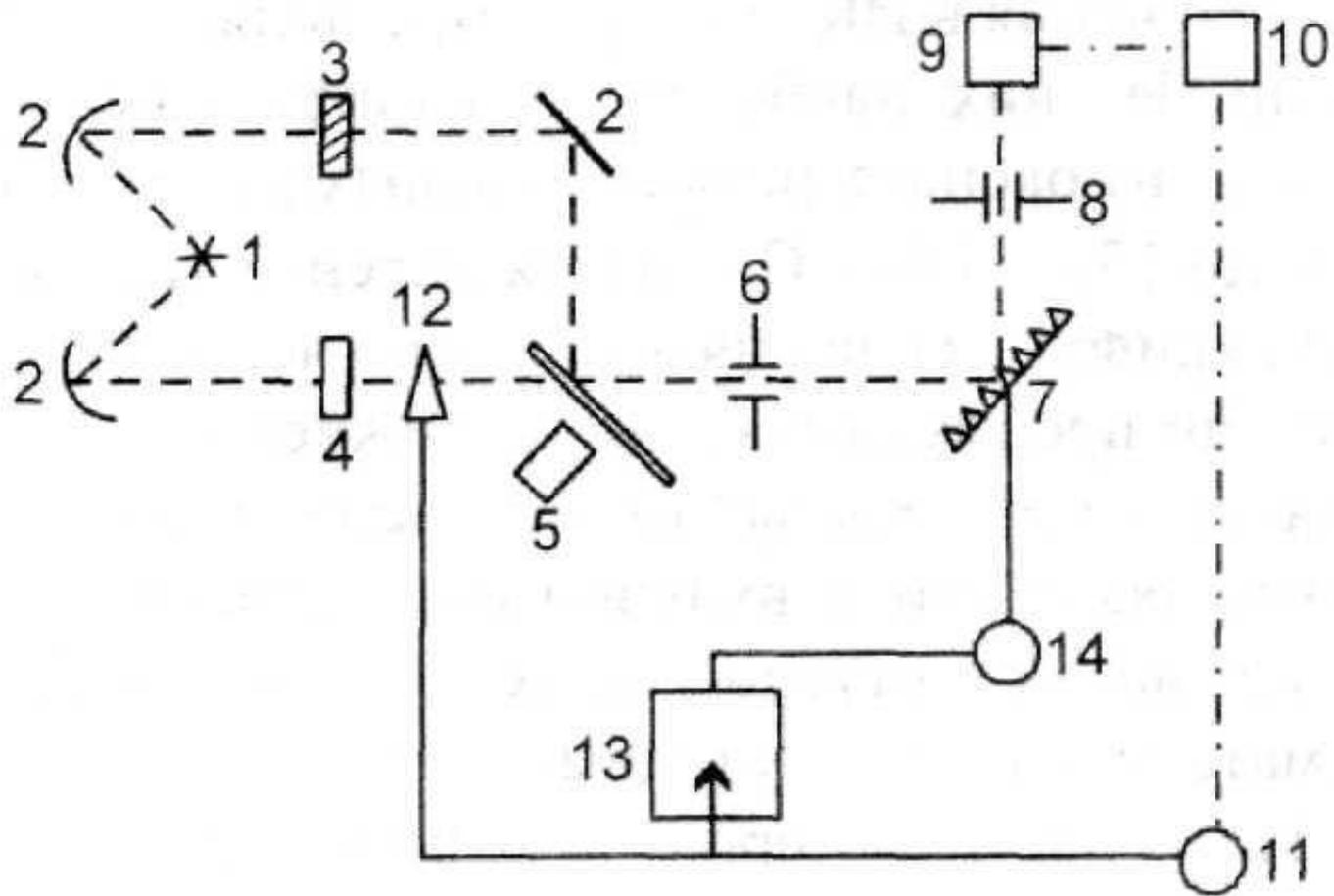


КР-спектр

ИК-спектр



КР-спектр



1 - источник ИК-излучения; 2 - система зеркал; 3 - рабочий пучок и образец; 4 пучок сравнения и компенсатор фона; 5 - прерыватель-модулятор; 6 - входная щель монохроматора; 7 - диспергирующий элемент (дифракционная решетка или призма), 8 - выходная щель монохроматора; 9 - приемник; 10 - усилитель; 11 - мотор отработки; 12-- фотометрический клин; 13—самописец; 14-- мотор развертки

ИК-спектрофотометр с Фурье-преобразованием



$$I(t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} S(\nu) \cdot \cos 2\pi\nu t \cdot d\nu$$

Очень полезным свойством этого уравнения является обратный переход к функции $S(\nu)$:

$$S(\nu) = 2\sqrt{2\pi} \int_0^{\infty} I(t) \cdot \cos 2\pi\nu t \cdot dt$$

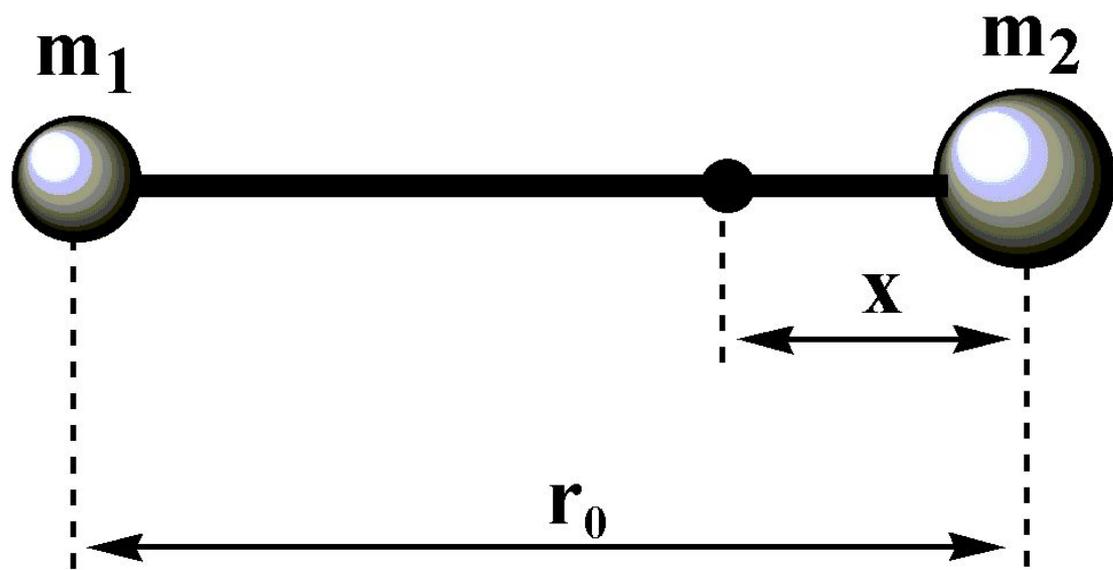
650 1300 1500 1800 2000 2300 2800 4000

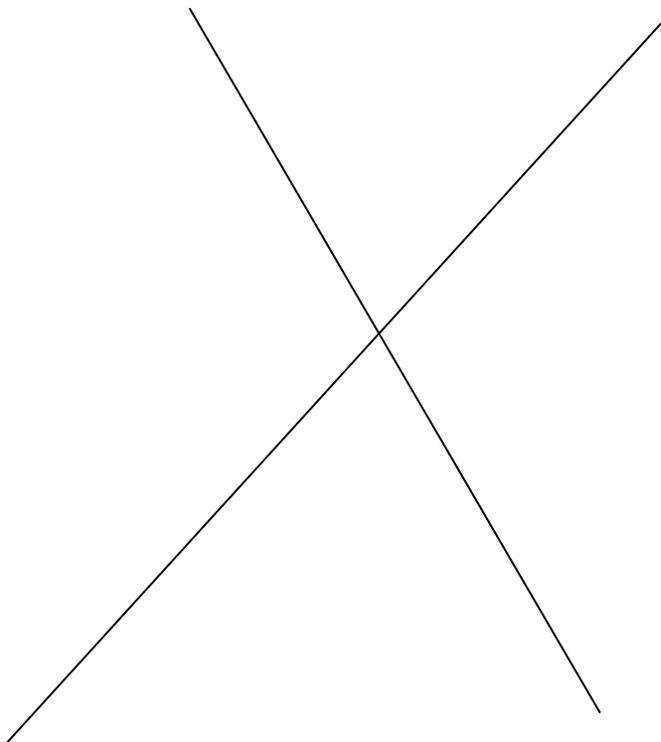
Деформационные колебания

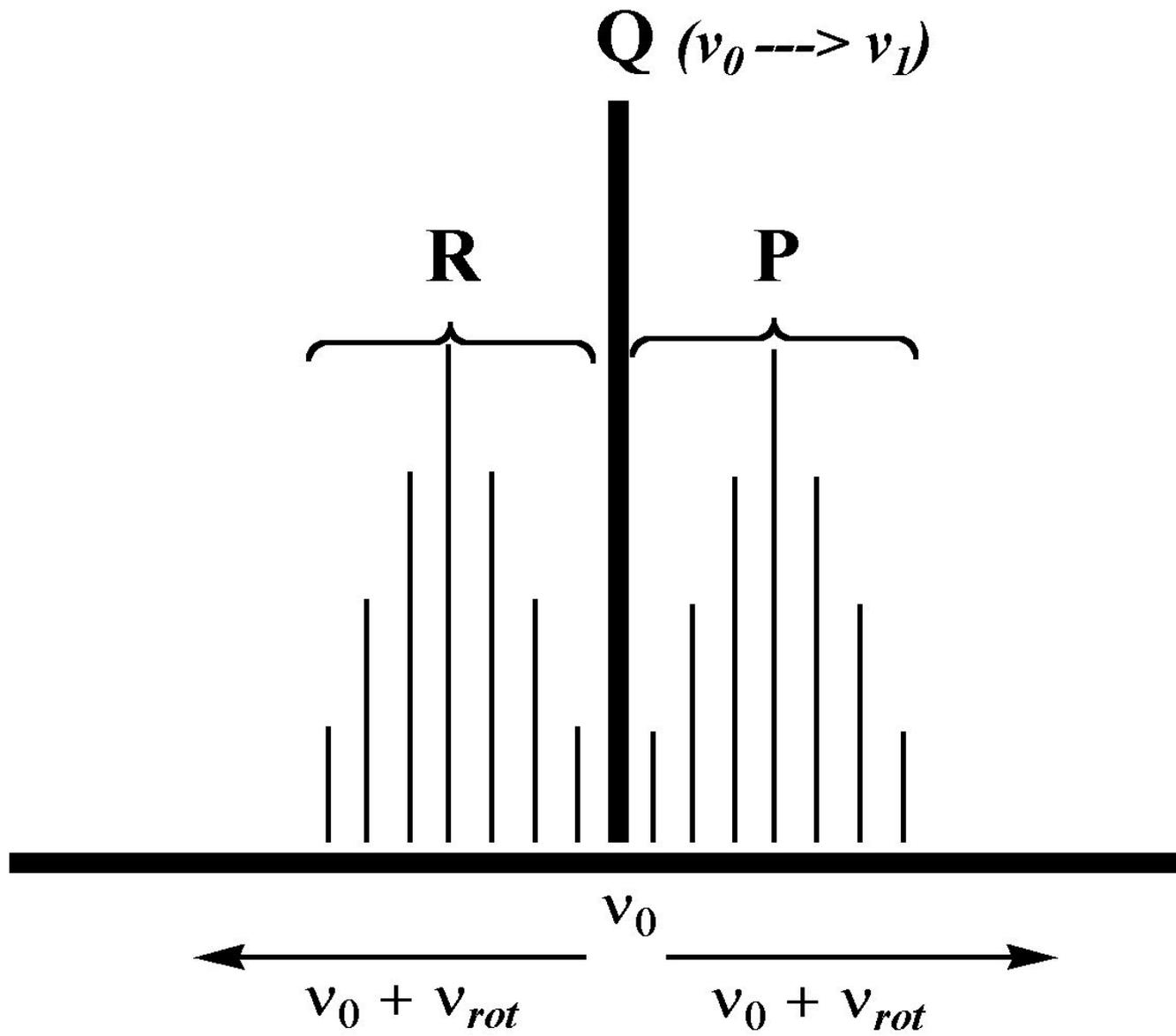
<p>Скелетн. Валентн. Колебания</p> <p>C-C, C-O, C-N,...</p>	<p>Колебания</p> <p>C=C, C=O, C=N,...</p>	<p>Колебания</p> <p>C≡C, C≡N,...</p>	<p>Колебания</p> <p>C-H, O-H, N-H,...</p>
--	--	---	--

← **Отпечатки пальцев**

← **Область колебаний функциональных групп** →







Флуоресцентные характеристики хромофоров белков и нуклеиновых кислот

Хромофор	длина волны в максимуме (нм)		чувствительность (отн. ед.)
	поглощение λ_{max}	флуоресценция λ_{max}	
Триптофан	280	348	11
Тирозин	274	303	2
Фенилаланин	257	282	0.08
Аденин	260	321	0.032
Гуанин	275	329	0.024
Цитозин	267	313	0.005
Урацил	260	308	0.004
У-основание в тРНК	320	460	0.91

