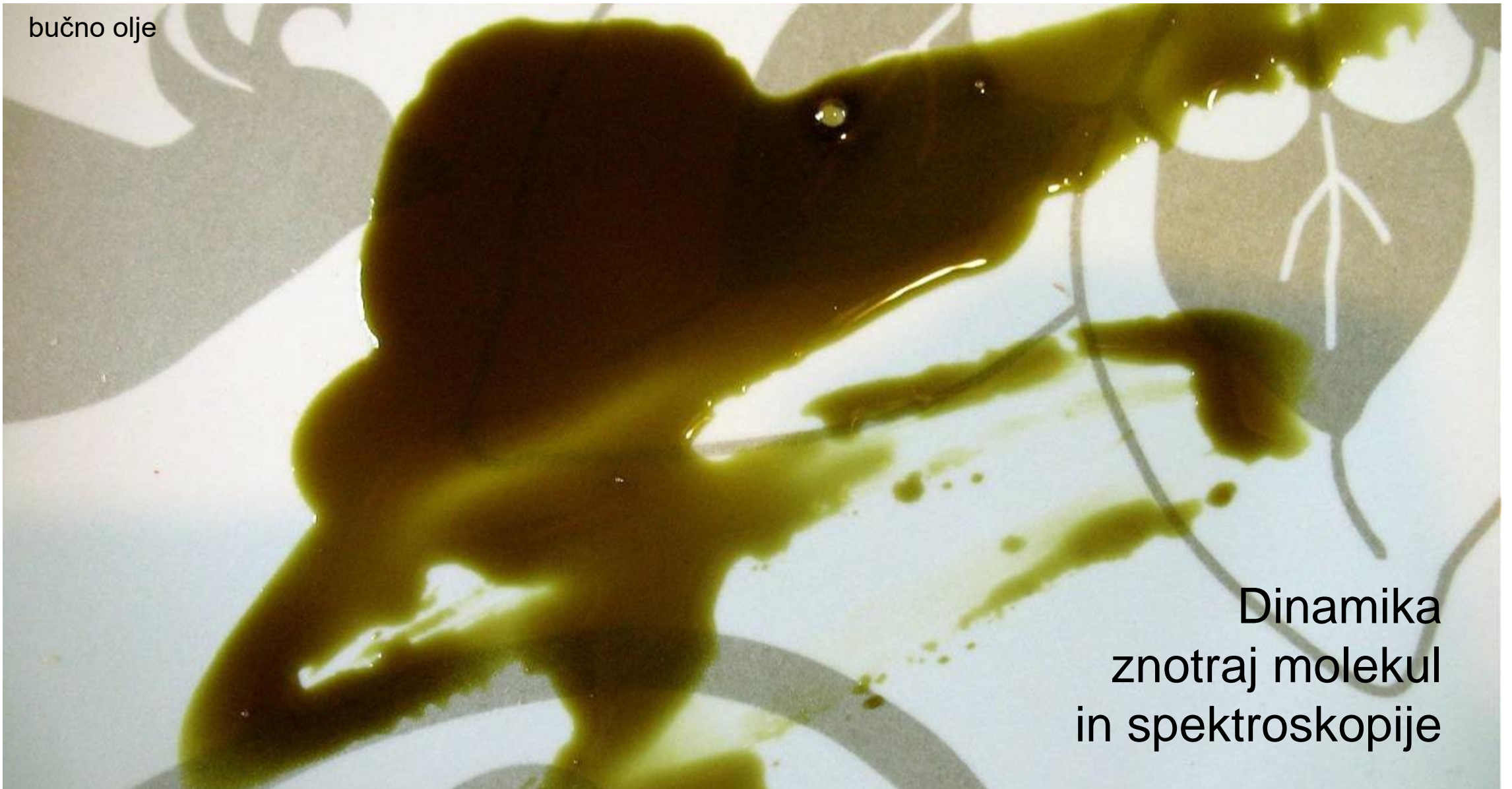


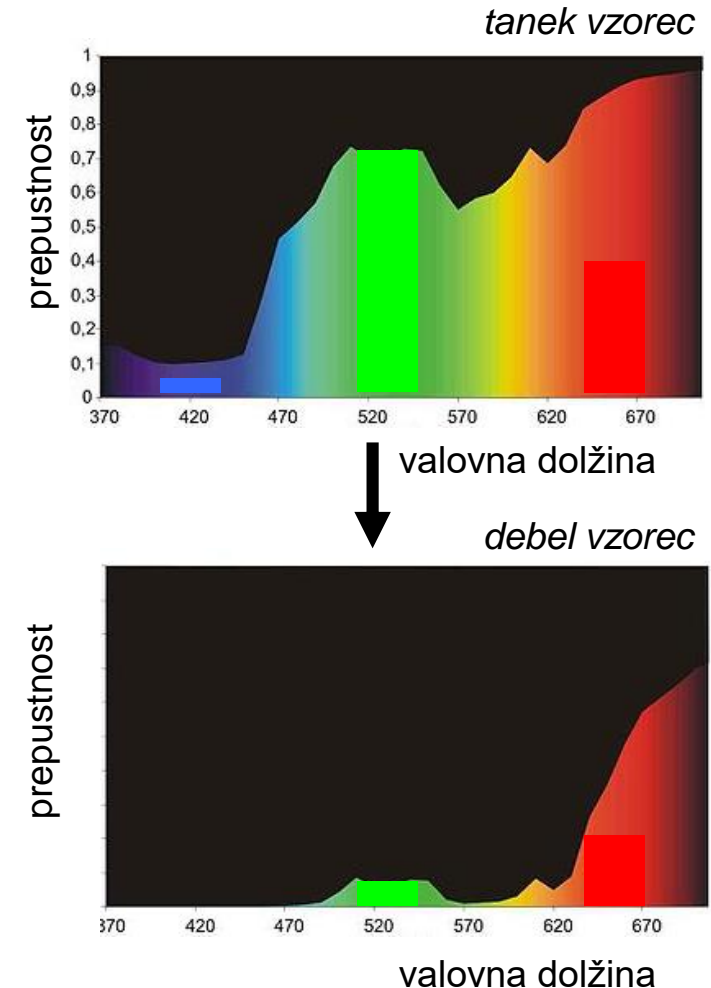
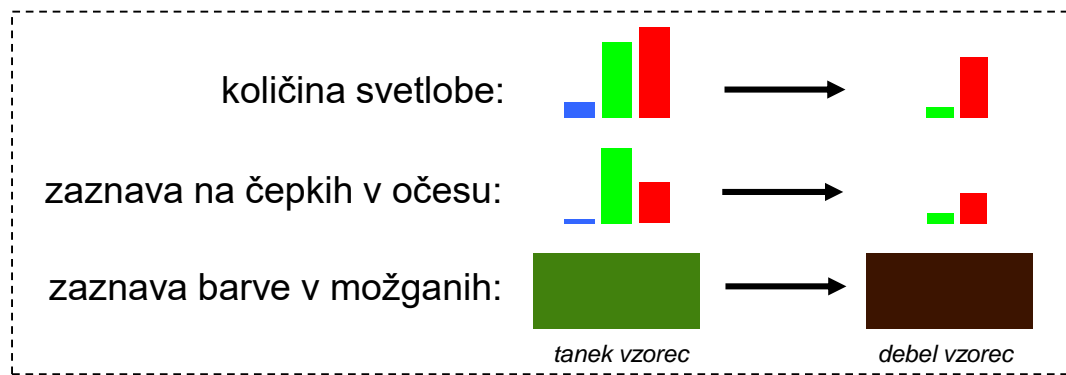
bučno olje



Dinamika
znotraj molekul
in spektroskopije

Od kod barva?

- **Prepustnost** eksponentno pada z debelino vzorca!
- Pri debelih vzorcih se zato razmerja med prepustnostmi pasov **absorpcijskega spektra** spreminjajo!
- Zaradi različne **občutljivosti čepkov** se zaznava barve različno debelih vzorcev še dodatno spremeni!

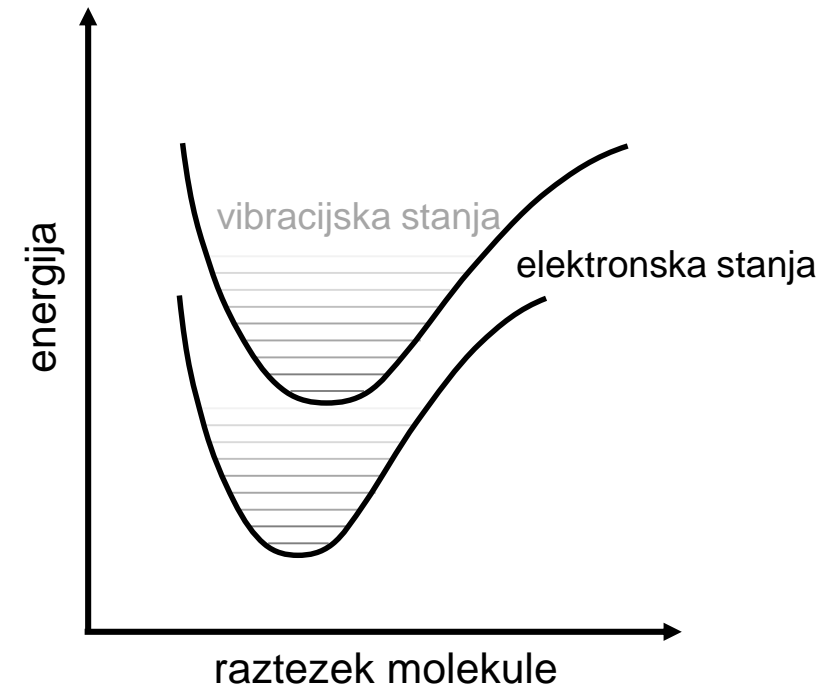


Od kod absorpcijski spekter?

Absorpcija svetlobe pri prehodih med

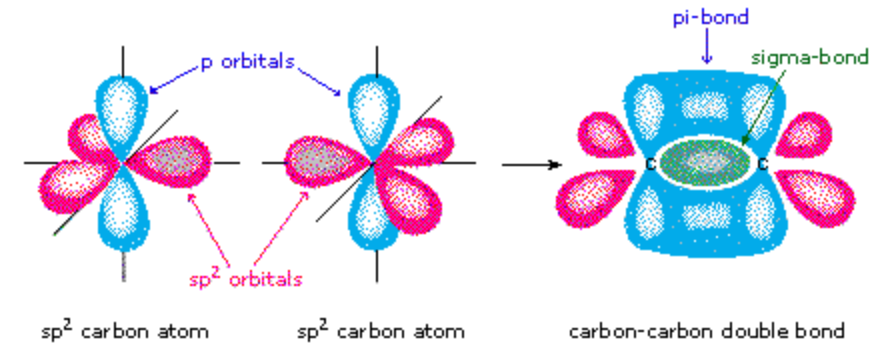
- elektronskimi stanji
- vibracijskimi stanji
- magnetnimi in polarizacijskimi stanji

znotraj molekul!

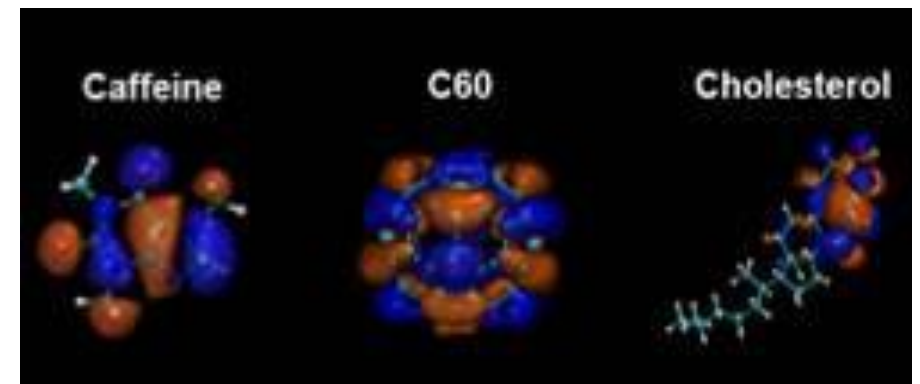


Dinamika znotraj molekul - *gibanje elektronov*

- **Elektronske orbitale** so območja okoli jeder, kjer se nahaja elektron ali par elektronov z določeno energijo.
- Atomske orbitale se sestavljajo v molekularne.
- **Elektroni** po absorpciji energije prehajajo med elektronskimi orbitalami na časovni skali femtosekund.
- Elektronske prehode raziskujemo z UV-VIS spektroskopijo.



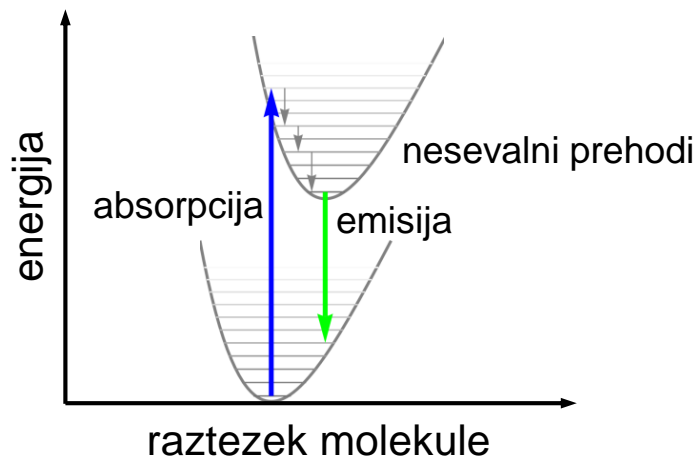
B Formation of σ - and π -molecular orbitals from two sp^2 hybridized carbon atoms



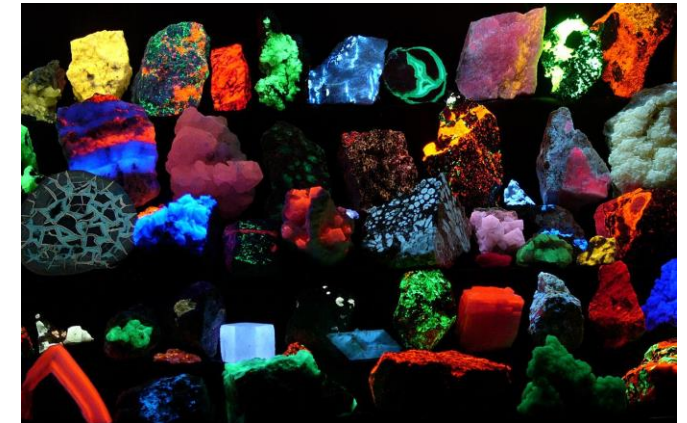
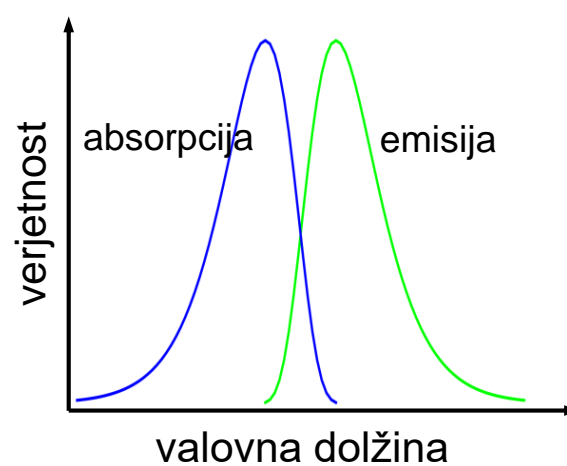
Dinamika znotraj molekul - *gibanje elektronov*

- Včasih molekule absorbirano svetlobo oddajo nazaj – pojav imenujemo *fluorescenca*

Energijski prehodi elektrona:



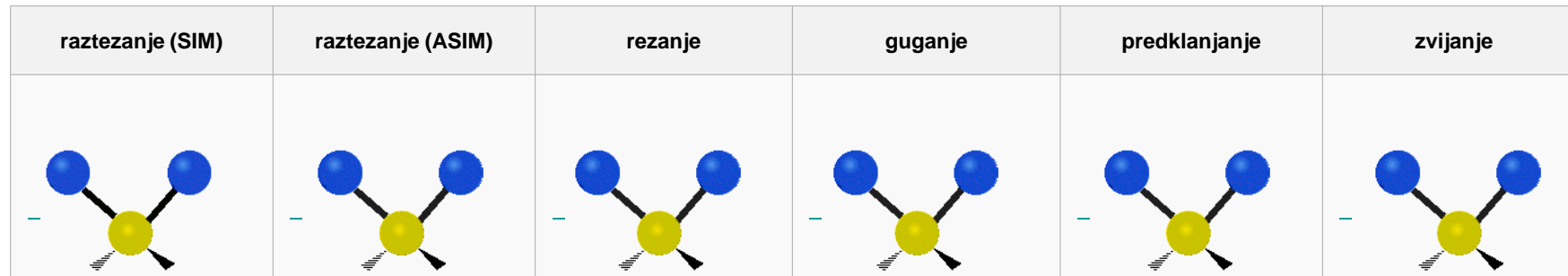
Spekter svetlobe:



- Izjemno uporabno za raziskovanje molekularnega sveta!

Dinamika znotraj molekul - *vibracije vezi*

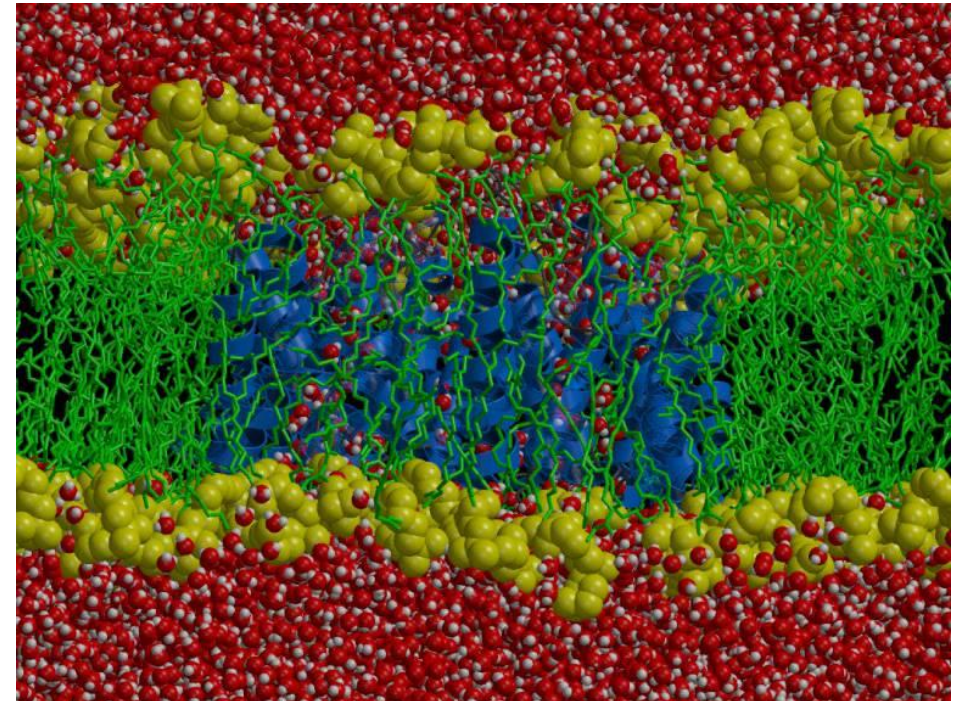
- Jedra se gibljejo. Ker pa so vezana drug na drugega, izgleda, kakor da bi **vezi vibrirale!**



- Vibracijska gibanja se dogajajo na pikosekundni časovni skali!
- Prehode med vibracijskimi stanji spremljamo z infrardečo spektroskopijo (FTIR).

Dinamika znotraj molekul – *opletanje verig*

- Ko se v verigo povezana jedra gibljejo, izgleda, kot da veriga **opleta**!
- Opletanje se dogaja na nanosekundni časovni skali, zato jih lahko detektiramo z EPR spektroskopijo!
- Opletanje opazimo pri vseh verigah, npr. pri
 - alkilnih verigah v lipidih,
 - stranskih verigah aminokislin v proteinih,
 - krajših verigah polimerov.



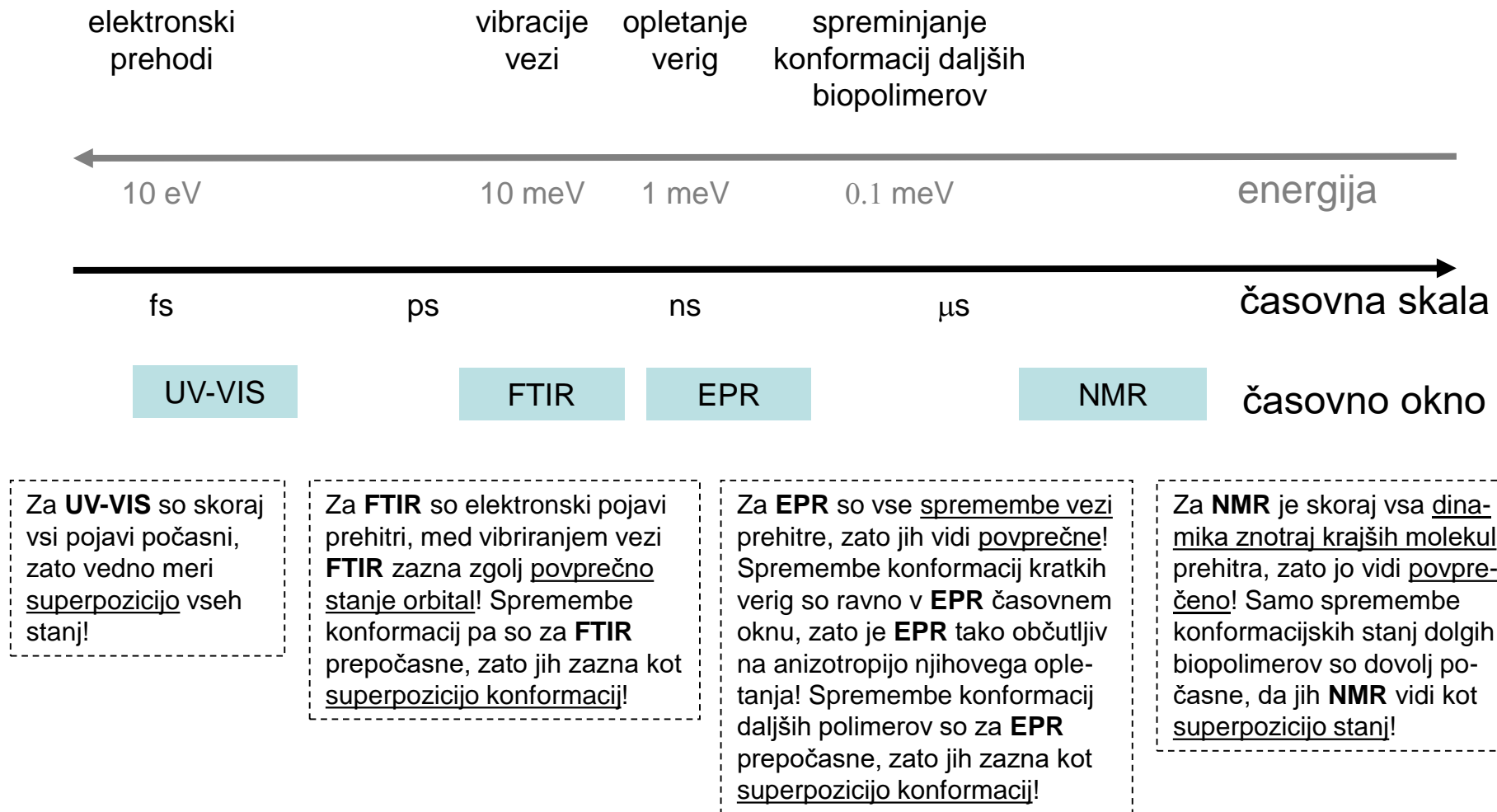
akvaporin v lipidni membrani

Časovna okna spektroskopij

Povprečujejo gibanja,
ki so hitrejša od okna

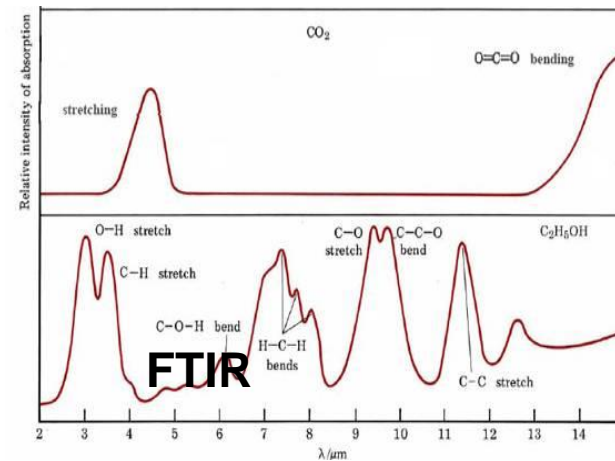
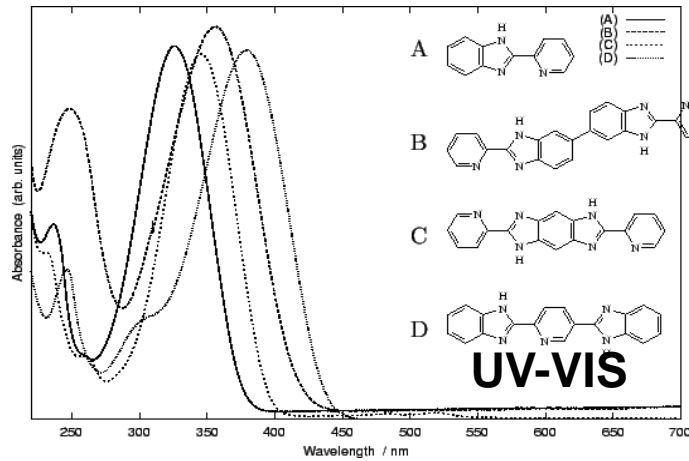
Superponirajo stanja,
ki se spreminjajo
počasneje od okna

Ujemimo časovno dinamiko v okna spektroskopij



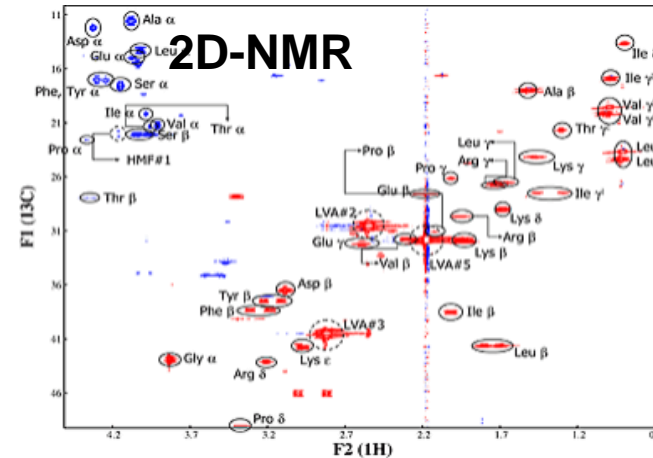
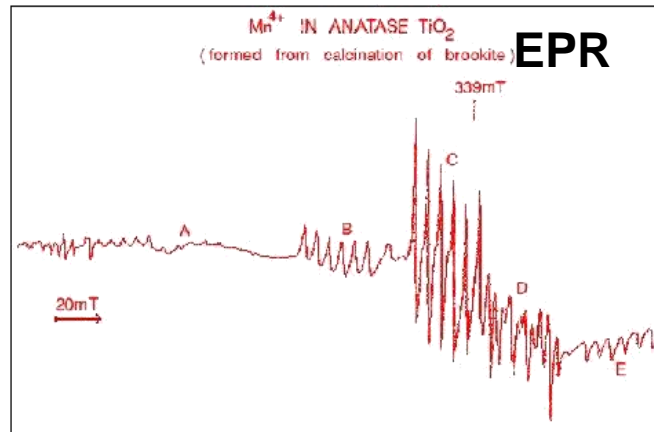
Spektroskopije – ključ do molekularnih informacij

elektronska stanja



kemijska zgraba

molekularna dinamika in lokalna kemijska struktura



3D struktura