

O B S A H

1. ÚVOD DO OPTICKÉ MOLEKULÁRNÍ SPEKTROSKOPIE .....	9
1.1 Předmět "Optická molekulární spektroskopie biologicky zajímavých molekul a struktur .....	9
1.2 Energetické hladiny molekuly a přechody mezi nimi / absorpční, emisní a rozptylová spektra / .....	12
1.3 Druhy pohybů v molekule a typy optických molekulárních spekter .....	15
1.4 Závislost elektronové energie molekuly na vzdálenosti mezi jádry .....	20
1.4.1 Dvouatomové molekuly .....	21
1.4.2 Mnohoatomové molekuly .....	24
1.5 Poznámky z kvantově-mechanické teorie molekul .....	27
2. ZÁKLADY TEORIE FREKVENCÍ VE VIBRAČNÍCH SPEKTRECH / MECHANIKA VIBRACÍ / .....	32
2.1 Harmonické vibrace molekul. Normální souřadnice a normální vibrace .....	32
2.2 Anharmonické vibrace molekul .....	40
2.3 Ramanův rozptyl .....	48
2.4 Symetrie a druhy vibrací molekul .....	54
3. ZÁKLADY TEORIE INTENZIT VE VIBRAČNÍCH SPEKTRECH / ELEKTROOPTIKA VIBRACÍ / .....	62
3.1 Úvod .....	62
3.2 Pravděpodobnosti vibračních přechodů .....	63
3.2.1 Infračervená spektra .....	63
3.2.2 Ramanova spektra .....	67
3.3 Výběrová pravidla ve vibračních spektrech .....	68
3.4 Intenzity pásů ve vibračních spektrech .....	73
3.4.1 Infračervená spektra .....	73
3.4.2 Ramanova spektra .....	74
3.5 Polarizace vibračních spekter. Depolarizace Ramanova rozptylu .....	80



<b>4. EXPERIMENTÁLNÍ METODY INFRAČERVENÉ SPEKTROSKOPIE</b> .....	85
<b>4.1 Infračervené disperzní spektrofotometry</b> .....	85
4.1.1 Obecné schéma .....	85
4.1.2 Zdroje záření .....	88
4.1.3 Monochromátory .....	90
4.1.4 Detekce záření .....	95
<b>4.2 Infračervené Fourierovské spektrofotometry</b> .....	98
4.2.1 Úvod do Fourierovské transformační infračervené spektroskopie .....	98
4.2.2 Výhody infračervených Fourierovských spektrofotometrů .....	104
4.2.3 Konstrukce a funkce .....	108
<b>4.3 Experimentální metodika infračervené spektroskopie</b> .	114
4.3.1 Kalibrace spektrofotometru .....	114
4.3.2 Příprava vzorků .....	117
4.3.3 Měření propustnosti .....	124
4.3.4 Měření v polarizovaném světle .....	129
4.3.5 Reflexní spektroskopie .....	132
4.3.6 Některé speciální metodiky .....	138
<b>5. EXPERIMENTÁLNÍ METODY RAMANOVY SPEKTROSKOPIE</b> .....	144
<b>5.1 Ramanovské spektrofotometry</b> .....	144
5.1.1 Obecné schéma .....	144
5.1.2 Lasery jako zdroje monochromatického záření ..	145
5.1.3 Monochromátory .....	148
5.1.4 Detekce Ramanova rozptylu .....	149
<b>5.2 Experimentální metodika Ramanovy spektroskopie</b> .....	155
5.2.1 Vzorky a jejich osvětlení .....	155
5.2.2 Redukce posadí rozptýleného záření .....	159
5.2.3 Měření Ramanových spekter a depolarizačního poměru .....	160
5.2.4 Resonanční Ramanův rozptyl .....	163
5.2.5 Ramanovská optická aktivita .....	165
5.2.6 Nelineární Ramanovské rozptyly .....	166



<b>6. UŽITÍ ŘÍDÍCÍCH MIKROPOČÍTAČŮ A MINIPOČÍTAČŮ VĚ VIBRAČNÍ SPEKTROSKOPII .....</b>	<b>170</b>
6.1 Úvod .....	170
6.2 Vestavěné řídicí mikropočítače a minipočítače .....	172
6.3 Stolní řídicí mikropočítače pro infračervené spektrofotometry .....	176
6.4 Mikropočítačové řídicí systémy vhodné pro spektroskopii .....	180
6.5 Minipočítačové řídicí systémy pro vibrační spektroskopii .....	181
6.6 Užití počítačů pro identifikaci látek .....	185
<b>7. POUŽITÍ VIBRAČNÍ SPEKTROSKOPIE V BIOFYZICE .....</b>	<b>188</b>
7.1 Úvod .....	188
7.2 Použití vibrační spektroskopie ke strukturální analýze biofyzikálně zajímavých molekul .....	190
7.2.1 Úvodní poznámky .....	190
7.2.2 Vibrační spektra molekul : uracil .....	193
7.2.3 Ramanova spektra biopolymerů : DNK a RNK ....	197
7.3 Vibrační spektroskopie a konformace biopolymerů ...	199
7.3.1 Konformace polypeptidů a bílkovin .....	199
7.3.2 Konformace nukleových kyselin .....	207
7.4 Další příklady užití infračervené a Ramanovské spektroskopie .....	213
<b>8. DOPLŇKY .....</b>	<b>220</b>
8.1 Rovnovážná konfigurace molekuly .....	220
8.2 Teorie grup a spektroskopie / základní pojmy / ....	224
8.2.1 Prvky symetrie a operace symetrie .....	224
8.2.2 Grupy symetrie .....	224
8.2.3 Representace grup .....	227
8.2.4 Charaktery representací grup a tabulky charakterů ireducibilních representací .....	229
8.2.5 Použití teorie grup ve spektroskopii .....	232
8.3 Srovnání infračervených a Ramanovských experimentálních metod vibrační spektroskopie .....	235