

# FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ METODY

## Obsah

### 1. Stanovení struktury látek rentgenovou difrakcí

1.1. Úvod .....	1
1.2. Princip metody, její výhody, nevýhody a omezení .....	2
1.3. Požadavky na vzorek .....	4
1.3.1. Způsoby přípravy monokrystalů .....	4
1.3.2. Předběžné posouzení kvality .....	9
1.3.3. Nestálé vzorky .....	10
1.4. Krystalografický výstup .....	10
1.4.1. Datové soubory .....	11
1.4.2. Grafika .....	14
1.4.3. Odvozená data .....	15
1.4.4. Absolutní konfigurace .....	16
1.5. Prezentace výsledků .....	17
1.6. Krystalografické databáze .....	18
1.7. Makromolekulární struktury .....	23
1.8. Slabiny .....	24
1.9. Perspektivy .....	27

### 2. Elektronová spektroskopie

2.1. Úvod .....	29
2.2. Základní pojmy, používané jednotky .....	30
2.3. Časová stupnice elektronové spektroskopie. Franck-Condonův princip .....	34
2.4. Luminiscence .....	36
2.5. Výběrová pravidla .....	37
2.6. Základní klasifikace elektronových přechodů .....	44
2.7. Efekty v elektronových spektrech .....	46
2.8. Měření absorpčních a fluorescenčních spekter .....	46
2.9. Analytické užití elektronové spektroskopie .....	55
2.10. Teoretické výpočty elektronových spekter .....	60
2.11. Doporučená literatura .....	65



### 3. Vibračně-rotační spektroskopie

3.1. Úvod .....	67
3.2. Základní pojmy .....	67
3.2.1. Infračervená absorpční spektroskopie .....	68
3.2.2. Ramanova spektroskopie .....	69
3.3. Klasický harmonický model molekulárních vibrací.....	71
3.4. Rozdělení molekulárních vibrací .....	74
3.5. Vibrační problém ve vnitřních souřadnicích .....	75
3.6. Měření vibračních spekter .....	77
3.6.1. Infračervená absorpční spektra .....	77
3.6.2. Ramanova spektra .....	84
3.6.3. Příprava vzorku, provádění experimentů .....	85
3.7. Využití vibračních spekter .....	91
3.7.1. Strukturní analýza .....	91
3.7.1.1. Oblast 3100-4000 $\text{cm}^{-1}$ .....	91
3.7.1.2. Valenční vibrace C-H (oblast 2700-3300 $\text{cm}^{-1}$ ).....	93
3.7.1.3. Charakteristické vibrace v oblasti 2000-2700 $\text{cm}^{-1}$ .....	94
3.7.1.4. Vibrace karbonylu (1600-1900 $\text{cm}^{-1}$ ) .....	94
3.7.1.5. Oblast otisku palce (900-1400 $\text{cm}^{-1}$ ), identifikace sloučenin .....	95
3.7.1.6. Oblast nižších vlnočtů .....	95
3.7.2. Konfigurace, konformace .....	96
3.7.3. Spektra izotopicky značených sloučenin .....	96
3.7.4. Vibrační spektroskopie biopolymerů .....	97
3.8. Ab initio výpočty silových konstant .....	99
3.9. Doporučená literatura .....	103

### 4. Optická aktivita, cirkulární dichroismus

4.1. Úvod .....	105
4.2. Lineárně a cirkulárně polarizované světlo .....	105
4.3. Základní pojmy a jednotky .....	108
4.4. Optická rotační síla .....	111
4.5. Rozdělení chiroptických metod .....	113
4.6. Strukturní podmínky pro vznik optické aktivity, výběrová pravidla.....	116
4.7. Měření chiroptických vlastností .....	117
4.7.1. Polarizace světla, polarizační prvky .....	117



4.7.2. Optická otáčivost a optická rotační disperze (ORD) .....	122
4.7.3. Církulární dichroismus .....	123
4.7.4. Optická aktivita měřená v Ramanově rozptylu (ROA) .....	128
4.8. Provádění chiroptických experimentů .....	129
4.9. Výpočty chiroptických vlastností .....	130
4.9.1. Výpočty elektronového církulárního dichroismu (ECD) .....	131
4.9.2. Výpočet vibračního církulárního dichroismu (VCD) .....	134
4.9.3. Modely vzniku optické aktivity .....	137
4.10. Zajímavé aplikace .....	141
4.10.1. Závislost na teplotě .....	141
4.10.2. Biopolymery .....	142
4.10.3. Vazebné studie, indukovaná optická aktivita .....	145
4.11. Speciální chiroptické experimenty .....	147
4.11.1. Církulární dichroismus ve vzdálené UV oblasti (VUVCD).....	147
4.11.2. Magnetický církulární dichroismus (MCD) .....	148
4.12. Doporučená literatura .....	150