

ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України

Електронні видання



С.Г. СТЕПАНЬЯН

**МОЛЕКУЛЯРНА ФІЗИКА:
АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ
ТА НОВІ ПІДХОДИ**

ЧАСТИНА 3.



ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР
ім. Б.І. ВЕРКІНА
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

СТЕПАНЬЯН С.Г.

**МОЛЕКУЛЯРНА ФІЗИКА:
АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ТА НОВІ
ПІДХОДИ**

Частина 3

КУРС ЛЕКЦІЙ

Харків
ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України
2024

УДК 538.9
С 79

Степаньян С.Г. **Молекулярна фізика: актуальні проблеми та нові підходи.**
Частина 3. Курс лекцій. — Харків: ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, 2024. —
125 с.

ISBN 9978-617-95455-8-0

У посібнику розглянуті сучасні методи дослідження структури біомолекул в ізольованому стані.

Наведена інформація про експериментальне обладнання для реєстрації ІЧ-спектрів молекул, ізольованих в низькотемпературних матрицях інертних газів. Розглянута загальна процедура встановлення структури ізольованих молекул. Обговорюються методи розрахунку коливальних спектрів та моделювання матриць інертних газів. Розглянуті методи вичерпного аналізу поверхні потенційної енергії конформаційно-лабільних молекул та вплив водневих зв'язків на структуру.

Для студентів старших курсів фізичних спеціальностей, аспірантів і науковців, що спеціалізуються в галузі молекулярної фізики.

Рецензенти:

О.Ю. Гламазда, доктор фіз.-мат. наук, ст. досл., ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України

Рекомендовано до друку Вченою радою
Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної
академії наук України
(протокол № 4 від 10.07.2024 р.)

Видавництво ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України

ISBN 978-617-95455-7-0

© С.Г. Степаньян, 2 024
© О.М. Калиненко, Р.М. Баснукаєва,
художнє оформлення, 2024
© ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України, 2024

ЗМІСТ

ВСТУП	3
1. Дослідження структури конформаційно лабільних багатоатомних молекул у ізольованому стані.....	5
1.1. Методи дослідження ізольованих молекул.	5
1.2. Низькотемпературна ІЧ-спектроскопія в матрицях інертних газів.....	12
1.3. Дослідження амінокислот ізольованих в матрицях інертних газів.....	19
1.4. Квантово-механічні розрахунки структури і ІЧ-спектрів амінокислот.	22
2. Особливості комбінованого експериментально-розрахункового методу досліджень структури конформаційно-лабільних молекул	30
2.1. Процедура встановлення структури ізольованих молекул	30
2.2. Реєстрація ІЧ-спектрів молекул ізольованих в матрицях інертних газів	37
2.3. Поділ обертальних ступенів свободи молекул амінокислот для вичерпного аналізу поверхні потенційної енергії.....	40
2.4. Методи розрахунку коливальних спектрів. Урахування ангармонізму	47
2.5. Моделювання матриць інертних газів	48
3. Конформаційна структура амінокислот: роль внутрішньо-молекулярних водневих зв'язків.....	53
3.1. Особливості конформаційної структури найпростіших амінокислот - гліцину і α -аланіну	55

3.3. Особливості структури конформаційно лабільних циклічних молекул: пролін	98
3.4. Структура проліновмісного циклодекапептида антаманіда: відповідність конформацій пролінових фрагментів пептидів і матрично-ізольованого проліну	110
3.5. Внутрішньомолекулярні водневі зв'язки: ІЧ-спектральні прояви і вплив на структуру молекул..	115
ВИСНОВКИ	118
Перелік використаних джерел	122