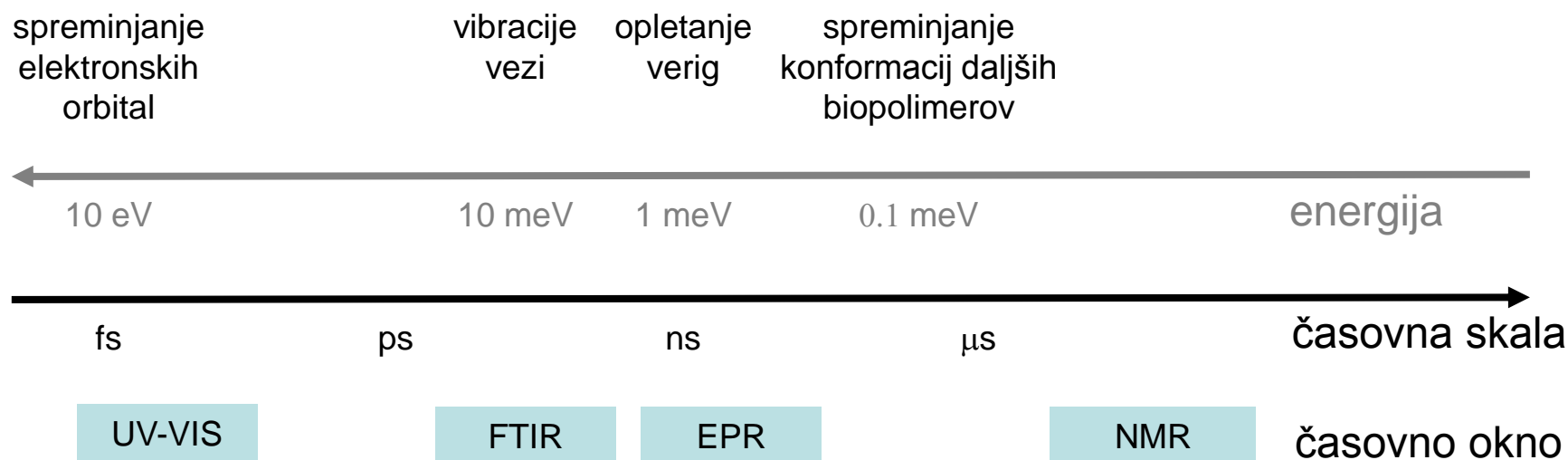


Časovna okna spektroskopij

Povprečujejo gibanja,
ki so hitrejša od okna

Superponirajo stanja,
ki se spreminjajo
počasneje od okna

Ujemimo časovno dinamiko v okna spektroskopij



Za **UV-VIS** so skoraj vsi pojavi počasni, zato vedno meri superpozicijo vseh stanj!

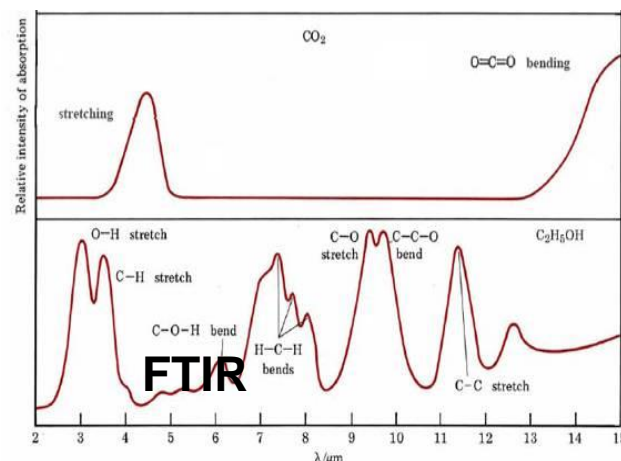
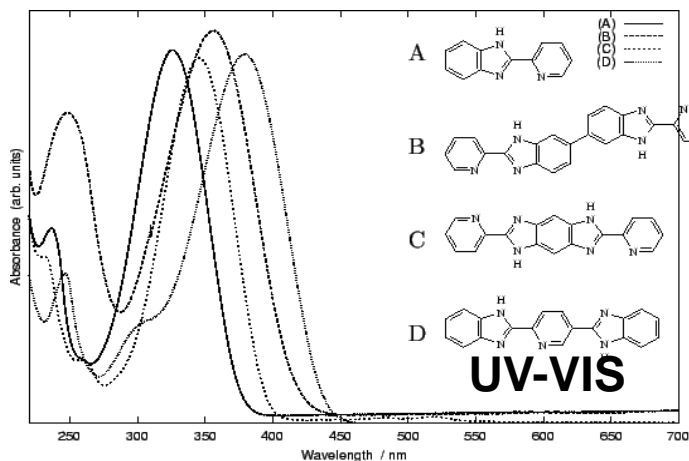
Za **FTIR** so elektronski pojavi prehitri, med vibriranjem vezi **FTIR** zazna zgolj povprečno stanje orbital! Spremembe konformacij pa so za **FTIR** prepočasne, zato jih zazna kot superpozicijo konformacij!

Za **EPR** so vse spremembe vezi prehitre, zato jih vidi povprečne! Spremembe konformacij kratkih verig so ravno v **EPR** časovnem oknu, zato je **EPR** tako občutljiv na anizotropijo njihovega opletnja! Spremembe konformacij daljših polimerov so za **EPR** prepočasne, zato jih zazna kot superpozicijo konformacij!

Za **NMR** je skoraj vsa dinamika znotraj krajših molekul prehitra, zato jo vidi povprečeno! Samo spremembe konformacijskih stanj dolgih biopolimerov so dovolj počasne, da jih **NMR** vidi kot superpozicijo stanj!

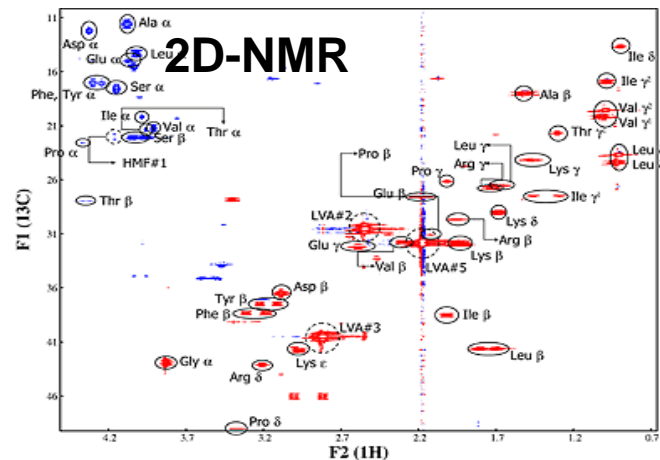
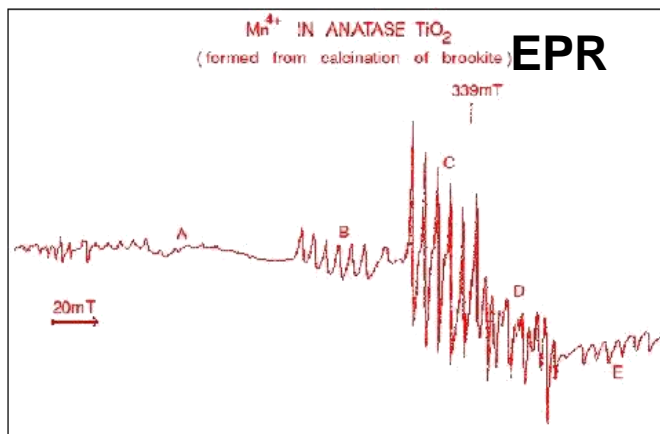
Spektroskopije – ključ do molekularnih informacij

elektronska
stanja



kemijska
zgraba

molekularna
dinamika in lokalna
kemijska struktura



3D struktura