

## МЕТОДЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В АНАЛИЗЕ

Камнев А.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов Российской академии наук, Саратов

[aakamnev@ibppm.ru](mailto:aakamnev@ibppm.ru), [a.a.kamnev@mail.ru](mailto:a.a.kamnev@mail.ru)

DOI: 10.26902/ASFE-11\_11

Использование различных методов молекулярной спектроскопии в анализе в широком смысле позволяет не только решать задачи обнаружения и идентификации соединений, но также изучать особенности молекулярной структуры (и фиксировать ее изменения), в том числе в сложных надмолекулярных системах – вплоть до клеток микроорганизмов и образцов тканей высших организмов. В данной лекции будут обсуждены примеры анализов, в основном проводившихся в нашей научной группе, с помощью методов колебательной спектроскопии (ИК-фурье-спектроскопии (ИКФС; в различных режимах измерений); спектроскопии комбинационного рассеяния, СКР) [1–4] и мессбауэровской спектроскопии (ядерный гамма-резонанс, ЯГР) [4–6].

Методы ИКФС и СКР позволяют получить из экспериментальных спектров информацию о характерных колебаниях присутствующих в образце функциональных групп; при этом интенсивности всех колебаний пропорциональны содержанию этих групп. Заметим, что при изучении сложных (био)органических систем методом ИКФС для получения качественных спектров и их адекватной интерпретации необходимо учитывать ряд методологических особенностей [1, 2, 7]. Хотя селективность ИКФС и СКР относительно невысока (т.к. однотипные функциональные группы дают сходные полосы колебаний в различных соединениях), это вполне компенсируется высокой информативностью спектров. Так, помимо наличия нескольких видов колебаний у сложных групп (дающих обычно несколько полос в разных областях частот), энергия колебаний зависит от межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействий, что проявляется на спектрах в виде характерных сдвигов полос или их расщепления.

Спектроскопия ЯГР основана на резонансном поглощении  $\gamma$ -излучения ядрами определенных изотопов; самым распространенным является  $^{57}\text{Fe}$  (его содержание в природном железе ~2.2%). Этот метод (по сути, ядерно-химический) дает уникальную информацию о химическом состоянии атома (катиона; например,  $^{57}\text{Fe}$ ), а также о его непосредственном молекулярном окружении; именно поэтому он занимает достойное место среди методов молекулярной спектроскопии [5]. Хотя его история насчитывает всего 6 десятилетий, он уже давно применяется во всех областях материаловедения – от анализа металлов и сплавов до Fe-содержащих белков, включая ферменты [5, 6].

Следует отметить, что во многих случаях методы молекулярной спектроскопии позволяют проводить неразрушающий анализ образцов *in situ* и даже *in vivo* [1, 2, 4–7].

**Список литературы**

1. Tugarova A.V., Dyatlova Yu.A., Kenzhegulov O.A., Kamnev A.A. Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc. **252** (2021) 119458.
2. Kamnev A.A., Dyatlova Yu.A., Kenzhegulov O.A., Vladimirova A.A., Mamchenkova P.V., Tugarova A.V. Molecules **26** (2021) 1146.
3. Tugarova A.V., Mamchenkova P.V., Khanadeev V.A., Kamnev A.A. New Biotechnol. **58** (2020) 17-24.
4. Kamnev A.A., Tugarova A.V., Shchelochkov A.V., Kovács K., Kuzmann E. Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc. **229** (2020) 117970.
5. Камнев А.А., Тугарова А.В. Успехи химии **90** (2021) <https://doi.org/10.1070/RCR5006>.
6. Kamnev A.A., Tugarova A.V. Talanta **174** (2017) 819-837.
7. Kamnev A.A., Tugarova A.V., Dyatlova Yu.A., Tarantilis P.A., Grigoryeva O.P., Fainleib A.M., De Luca S. Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc. **193** (2018) 558-564.

Исследования были поддержаны грантами РФФИ №№ 16-08-01302-а, 17-08-01696-а, 19-13-50160.