

ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ БИОФИЗИКИ

**КВАНТОВАЯ БИОФИЗИКА
РАССМАТРИВАЕТ НА
МОЛЕКУЛЯРНОМ УРОВНЕ
ПРОЦЕССЫ,
ПРОТЕКАЮЩИЕ
В ЖИВЫХ ОРГАНИЗМАХ
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ
С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ
ИЗЛУЧЕНИЕМ.**

**ЕЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ –
В ОСНОВЕ
СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ
МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ.**

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
ОСНОВА КВАНТОВОЙ
БИОФИЗИКИ -
КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА,
НАУКА О ДВИЖЕНИИ
МИКРОЧАСТИЦ.**



Квантовая механика

НАЧАЛО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКИ -
ИДЕЯ ПЛАНКА (1900 Г.)
О ПРЕРЫВИСТОСТИ
ИЗЛУЧЕНИЯ И
РАСПРОСТРАНЕНИЯ
СВЕТА.

РАЗВИТИЕ ЭТОЙ ИДЕИ -
ПОСТУЛАТЫ БОРА,

ФУНДАМЕНТ
СОВРЕМЕННОЙ
КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКИ.

Первая лекция раздела

Лекция

ИЗЛУЧЕНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА АТОМАМИ И МОЛЕКУЛАМИ

1. КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ.
2. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ АТОМА.
КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА.
3. СИСТЕМА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ МОЛЕКУЛЫ.
4. ВИДЫ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ.
5. СПОСОБЫ РАСХОДАВАНИЯ МОЛЕКУЛОЙ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ.
6. СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ.

1. КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ

**ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ
АТОМА И МОЛЕКУЛЫ
ДИСКРЕТНА, или
КВАНТУЕТСЯ:**

**ОНА МОЖЕТ
ПРИНИМАТЬ ЛИШЬ
ОПРЕДЕЛЕННЫЕ
ЗНАЧЕНИЯ,
или УРОВНИ.**



- **ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ УРОВЕНЬ С НАИМЕНЬШЕЙ ЭНЕРГИЕЙ - ОСНОВНОЙ.**
- **ОСТАЛЬНЫЕ - ВОЗБУЖДЕННЫЕ.**

Постулаты Бора

- КАЖДОМУ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМУ УРОВНЮ СООТВЕТСТВУЕТ ОПРЕДЕЛЕННОЕ СТАЦИОНАРНОЕ СОСТОЯНИЕ ЧАСТИЦЫ.

- В СТАЦИОНАРНОМ СОСТОЯНИИ ЧАСТИЦЫ ЕЕ ЭНЕРГИЯ НЕ МЕНЯЕТСЯ.

||
ПЕРВЫЙ ПОСТУЛАТ БОРА.

- ПРИ ПЕРЕХОДЕ ИЗ ОДНОГО СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ В ДРУГОЕ (В СИСТЕМЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ) ЭНЕРГИЯ ЧАСТИЦЫ ИЗМЕНЯЕТСЯ НА СТРОГО ОПРЕДЕЛЕННУЮ ВЕЛИЧИНУ -

КВАНТ:

Постулаты Бора

$$\varepsilon = h\nu$$

$$\nu = c / \lambda$$

$$\varepsilon = hc / \lambda.$$

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с} -$$

ПОСТОЯННАЯ
ПЛАНКА

(УНИВЕРСАЛЬНАЯ
ПОСТОЯННАЯ
ИЗЛУЧЕНИЯ).

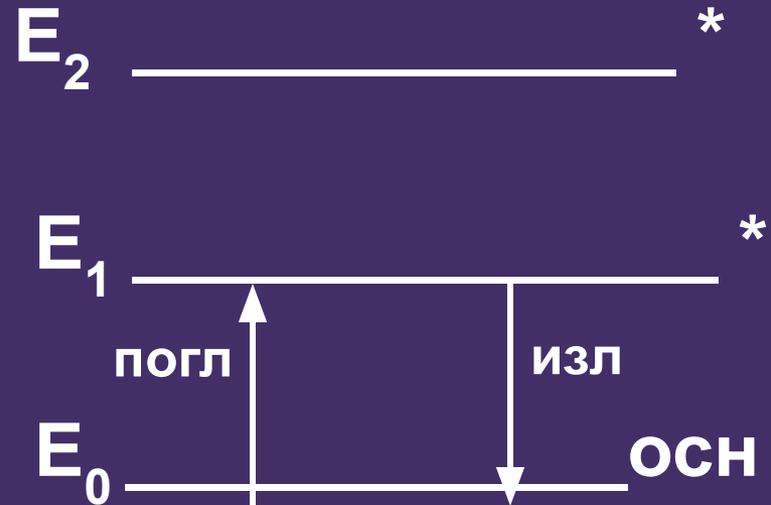
Постулаты Бора

КВАНТ СООТВЕТСТВУЕТ
РАЗНОСТИ ЭНЕРГИЙ
УРОВНЕЙ, МЕЖДУ
КОТОРЫМИ
СОВЕРШАЕТСЯ
ПЕРЕХОД:

$$\xi = E_1 - E_0.$$

||

ВТОРОЙ ПОСТУЛАТ БОРА.



2. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ АТОМА. КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА

Энергетическое состояние атома

определяется состоянием его электронов.

**ЭЛЕКТРОН -
ДВИЖУЩАЯСЯ
ЗАРЯЖЕННАЯ ЧАСТИЦА**

⇒ ЧЕТЫРЕ ВЕЛИЧИНЫ:

- **ДВА МЕХАНИЧЕСКИХ
МОМЕНТА ИМПУЛЬСА,**
- **ДВА МАГНИТНЫХ
МОМЕНТА.**

- **ОРБИТАЛЬНЫЙ
МОМЕНТ ИМПУЛЬСА**
и
- **ОРБИТАЛЬНЫЙ
МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ**

**ОБУСЛОВЛЕННЫ
ВРАЩЕНИЕМ
ЭЛЕКТРОНА ВОКРУГ
ЯДРА.**

Квантовые числа

- СОБСТВЕННЫЙ МЕХ. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА, ИЛИ *СПИН*,
 - И
 - СПИНОВЫЙ МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ
-
- ВРАЩЕНИЕМ ЭЛЕКТРОНА ВОКРУГ СОБСТВЕННОЙ ОСИ.

С МОМЕНТАМИ СВЯЗАНЫ КВАНТОВЫЕ ЧИСЛА. –

ЧЕТЫРЕ КВАНТОВЫХ ЧИСЛА:

$n, l, m_l, m_s.$

Главное квантовое число

n - *главное*

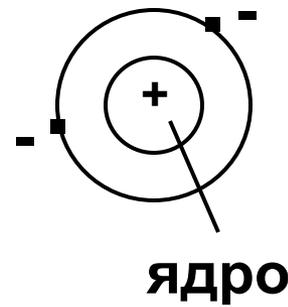
квантовое число.

- $n = 1, 2, 3, \dots$

(числа натурального ряда)

- Характеризует местонахождение электрона в атоме, его удаленность от ядра.

В модели
РЕЗЕРФОРДА-БОРА
определяет радиусы
круговых орбит
вращения электронов
вокруг ядра.



Условие квантования

Радиусы орбит
должны удовлетворять
УСЛОВИЮ
КВАНТОВАНИЯ:

$$m v_n r_n = n \cdot h / 2\pi = n \hbar$$

**ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ
ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОНА
КРАТЕН ПОСТОЯННОЙ
ПЛАНКА \hbar .**

m – масса электрона,
 v_n – скорость его на данной
орбите,
 r_n – радиус орбиты.

**ЧЕМ БОЛЬШЕ n ,
ТЕМ ДАЛЬШЕ ОТ ЯДРА
ОРБИТА,
БОЛЬШЕ СКОРОСТЬ И
ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОНА НА
ЭТОЙ ОРБИТЕ
И ЭНЕРГИЯ АТОМА В ЦЕЛОМ.**

Современная коррекция

**БОРОВСКАЯ МОДЕЛЬ
АТОМА –
УДОБНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ.**

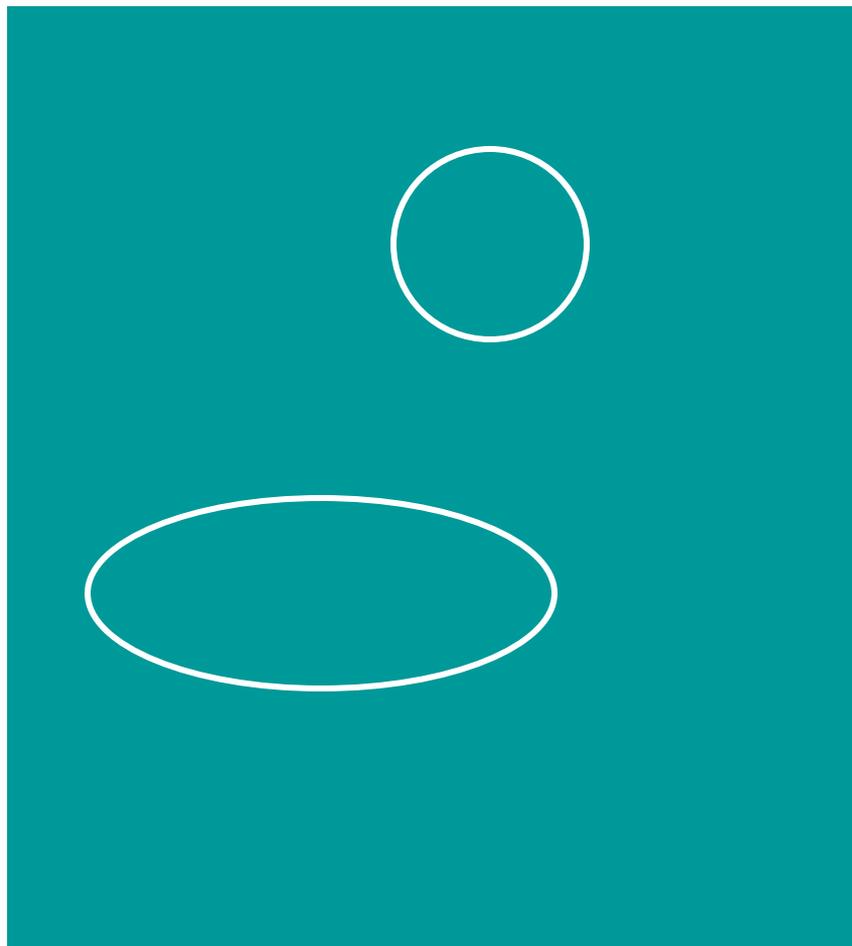
**НЕВОЗМОЖНО ТОЧНО
УКАЗАТЬ
ОДНОВРЕМЕННО ЭНЕРГИЮ
ЭЛЕКТРОНА
И ЕГО МЕСТОНАХОЖДЕНИЕ.**

- **ЭЛЕКТРОННАЯ ОРБИТА –
НАИБОЛЕЕ ВЕРОЯТНАЯ
ОБЛАСТЬ ЛОКАЛИЗАЦИИ
ЭЛЕКТРОНА В АТОМЕ.**
- **СОВОКУПНОСТЬ ВСЕХ
ЭЛЕКТРОНОВ С ОДИНАКО-
ВЫМ КВАНТОВЫМ
ЧИСЛОМ «n» -
ЭЛЕКТРОННЫЙ СЛОЙ.**
- **ИЗМЕНЕНИЕ «n» –
ПЕРЕХОД ИЗ ОДНОГО
ЭЛЕКТРОННОГО СЛОЯ В
ДРУГОЙ.**

Орбитальное квантовое число

l - орбитальное
квантовое число.

- $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$
(целые числа от «0» по «n-1»)
- В рамках Боровской модели характеризует ФОРМУ электронной орбиты.



Магнитное квантовое число

m_l - магнитное квантовое число.

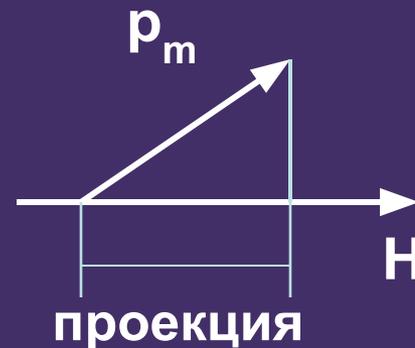
- $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

- Характеризует ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПОЛОЖЕНИЕ

орбиты.



Определяет проекцию орбитального магнитного момента электрона на вектор напряженности внешнего магнитного поля.



Спиновое число

m_s – спиновое число.

- $m_s = \pm 1/2$
- Определяет проекцию **СПИНОВОГО** магнитного момента электрона на вектор напряженности внешнего магнитного поля.

ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ЛЮБОГО ИЗ ЧЕТЫРЕХ КВАНТОВЫХ ЧИСЕЛ МЕНЯЕТСЯ

ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ

КАК ЭЛЕКТРОНА, ТАК И АТОМА В ЦЕЛОМ.

Система энергетических уровней (электронных) атома



3. СИСТЕМА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ И ПОДУРОВНЕЙ МОЛЕКУЛЫ

Внутренняя энергия молекулы включает следующие составляющие:

- А) ЭНЕРГИЯ ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ;
- Б) ЭНЕРГИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ В МОЛЕКУЛЕ;

- В) ЭНЕРГИЯ ВРАЩАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ САМОЙ МОЛЕКУЛЫ КАК ЦЕЛОГО.

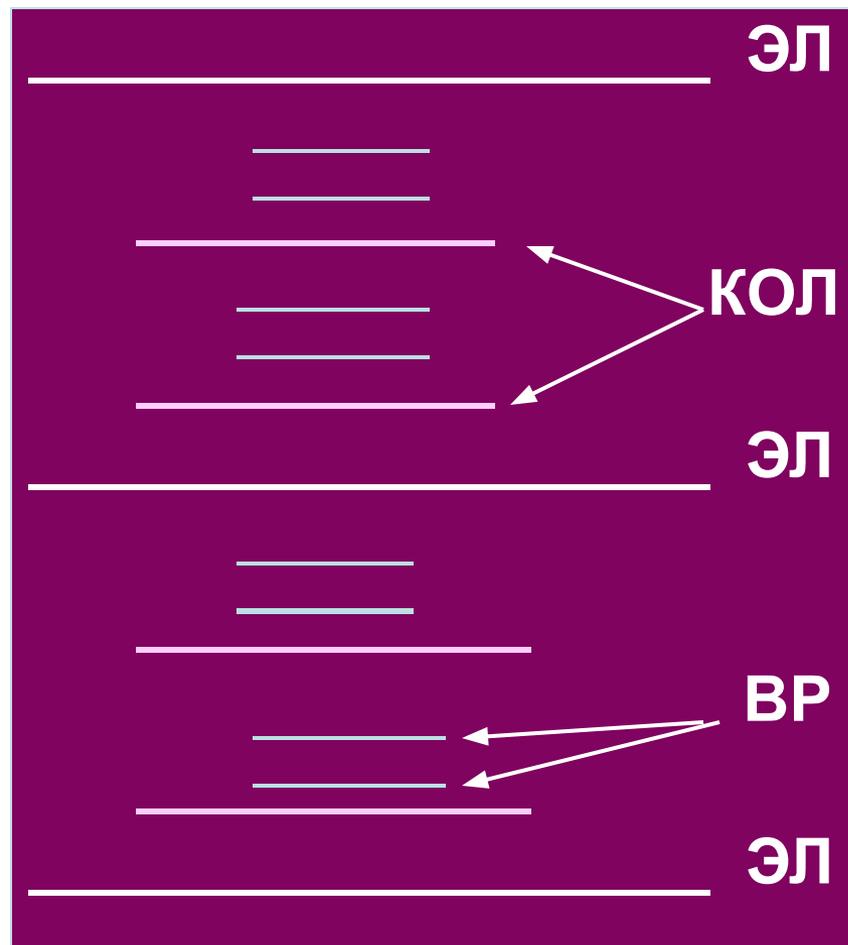
$$E_M = E_{\text{эл}} + E_{\text{кол}} + E_{\text{вр}}$$

Более сложная система энергетических уровней молекулы

КВАНТУЮТСЯ ВСЕ
ВИДЫ ЭНЕРГИИ:
ЭЛЕКТРОННАЯ,
КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ (атомов)
и ВРАЩАТЕЛЬНАЯ
(молекулы).



- У МОЛЕКУЛЫ
ПОЯВЛЯЮТСЯ
ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ
ПОДУРОВНИ:



Величина квантов

КВАНТЫ
УМЕНЬШАЮТСЯ
В РЯДУ

$$E_{\text{эл}} \rightarrow E_{\text{кол}} \rightarrow E_{\text{вр}}$$

ПОЭТОМУ

- РАДИОВОЛНЫ СВЧ-ДИАПАЗОНА И ДАЛЬНИЙ ИК-СВЕТ ВОЗБУЖДАЮТ ЛИШЬ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ УРОВНЯМИ.

- БЛИЗКИЙ ИК-СВЕТ - ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ КОЛЕБАТЕЛЬНЫМИ И ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ УРОВНЯМИ.
- В ОБЛАСТИ ВИДИМОГО И УФ-СВЕТА - ВСЕ ТРИ ВИДА ПЕРЕХОДОВ (МЕЖДУ ЭЛЕКТРОННЫМИ, КОЛЕБАТЕЛЬНЫМИ И ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ УРОВНЯМИ).

4. ВИДЫ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ

ОСНОВНОЕ

СИНГЛЕТНОЕ

ВОЗБУЖДЕННОЕ

ТРИПЛЕТНОЕ

Синглетное и триплетное состояния

- ЧАСТИЦА В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ, ЕСЛИ ОНА НЕ ПОДВЕРГАЕТСЯ ВНЕШНИМ ВОЗДЕЙСТВИЯМ.
- ЧАСТИЦА ПЕРЕХОДИТ В ВОЗБУЖДЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИ СООБЩЕНИИ ЕЙ ПОРЦИИ ЭНЕРГИИ.

- **СИНГЛЕТНОЕ (S) СОСТОЯНИЕ:**
ВСЕ ЭЛЕКТРОНЫ СПАРЕНЫ -
ИМЕЮТ ПОПАРНО
АНТИПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ
СПИНЫ.



- **ТРИПЛЕТНОЕ (T) СОСТОЯНИЕ:**
ИМЕЕТСЯ ДВА
НЕСПАРЕННЫХ ЭЛЕКТРОНА

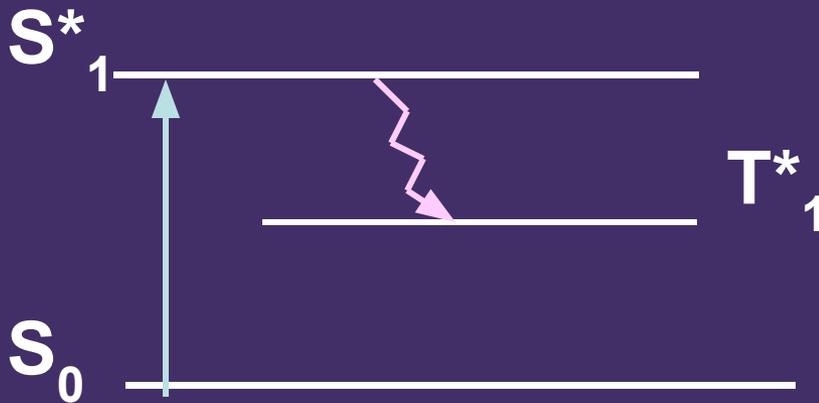
- С ПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ И
ОДНОНАПРАВЛЕННЫМИ
СПИНАМИ.



- ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ БОЛЬШИНСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ - СИНГЛЕТНОЕ.
- ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ - ПЕРЕХОД ТАКЖЕ НА СИНГЛЕТНЫЙ ВОЗБУЖДЕННЫЙ УРОВЕНЬ.

- ЗАСЕЛЕНИЕ ТРИПЛЕТНОГО ВОЗБУЖДЕННОГО УРОВНЯ - ПУТЕМ РАСТРАТЫ ЧАСТИ ЭНЕРГИИ СИНГЛЕТНОГО ВОЗБУЖДЕННОГО В ТЕПЛО.
- ↓
- Т-УРОВЕНЬ ВСЕГДА НИЖЕ СООТВЕТСТВУЮЩЕГО S-УРОВНЯ.

Переходы между S- и T-уровнями



ЛЮБЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ
S- И T-
УРОВНЯМИ СВЯЗАНЫ
С ПЕРЕМЕНОЙ
НАПРАВЛЕНИЯ
(ОБРАЩЕНИЕМ) СПИНА.

А ЭТО ПРОЦЕСС
ВОЗМОЖНЫЙ, НО
ОЧЕНЬ
МАЛОВЕРОЯТНЫЙ
(«ЗАПРЕЩЕН ПО
СПИНУ»).

$$C_T^* < C_S^*$$
$$T_T^* > T_S^*$$

5. СПОСОБЫ РАСХОДОВАНИЯ МОЛЕКУЛОЙ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Молекула в возбужденном состоянии неустойчива.

Она стремится растратить энергию возбуждения и перейти на нижний энергетический уровень.

**ПЕРЕХОДЫ
С ВЕРХНИХ УРОВНЕЙ НА
НИЖНИЕ -**

- ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ**
(растрата энергии в виде электромагнитного излучения)
- И**
- БЕЗИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ**
(растрата энергии другими способами).

Способы БЕЗИЗЛУЧАТЕЛЬНОГО перехода

А) РАСТРАТА ЭНЕРГИИ В ВИДЕ ТЕПЛА:



Именно так
растрачивается
энергия высших
возбужденных
уровней,
а также избыток
энергии при переходе
из S^* в T^* - состояние.

Б) ВСТУПЛЕНИЕ ВОЗБУЖДЕННОЙ МОЛЕКУЛЫ В ХИМИЧЕСКУЮ РЕАКЦИЮ:



В) ПЕРЕДАЧА ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ ОКРУЖАЮЩИМ МОЛЕКУЛАМ:



ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ переход

С ВЫСВЕЧИВАНИЕМ
КВАНТОВ ИЗЛУЧЕНИЯ -
ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ:



ВИДЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ:

- СПОНТАННАЯ ИЛИ ИНДУЦИРОВАННАЯ;
- ФОТО-, ЭЛЕКТРО-, ХЕМИ-, ...
- ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ ИЛИ ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ

КЛАССИФИКАЦИЯ –
ПО РАЗНЫМ ПРИЗНАКАМ:

- БЕЗ ВНЕШНЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА УЖЕ ВОЗБУЖДЕННУЮ ЧАСТИЦУ ИЛИ С ТАКОВЫМ;
- ПО СПОСОБУ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ;
- ПО МЕХАНИЗМУ ИЗЛУЧЕНИЯ.

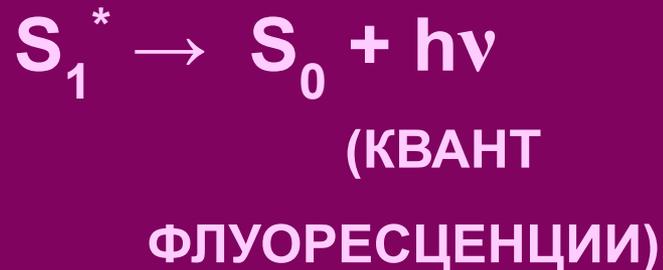
Определения

- **СПОНТАННАЯ** – самопроизвольная;
ИНДУЦИРОВАННАЯ, ВЫНУЖДЕННАЯ – при воздействии на уже возбужденную частицу нового фотона
(лежит в основе устройства лазеров).

- После перевода молекулы в возбужденное состояние светом – **ФОТО-**;
электрическим полем – **ЭЛЕКТРО-**;
за счет энергии экзергонической химической реакции – **ХЕМИ-** .

Флуоресценция и фосфоресценция

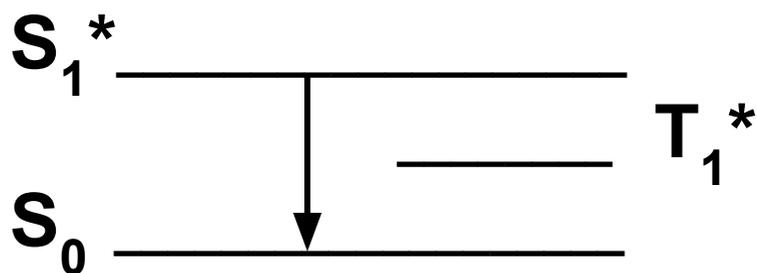
ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ -
испускание фотона
при переходе
С ПЕРВОГО
СИНГЛЕТНОГО
ВОЗБУЖДЕННОГО
УРОВНЯ
НА ОСНОВНОЙ:



ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ –
испускание фотона
при переходе
С ПЕРВОГО
ТРИПЛЕТНОГО
ВОЗБУЖДЕННОГО
УРОВНЯ
НА ОСНОВНОЙ:

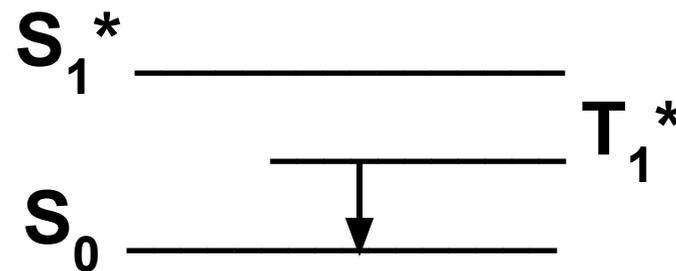


ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ



ОЧЕНЬ
МАЛАЯ ДЛИТЕЛЬНОСТЬ:
 $10^{-9} - 10^{-6}$ с

ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ



ЗАТУХАЕТ
ЗНАЧИТЕЛЬНО ДОЛЬШЕ:
 $10^{-3} - 10$ с

ПОСЛЕСВЕЧЕНИЕ

$$h\nu > h\nu'$$

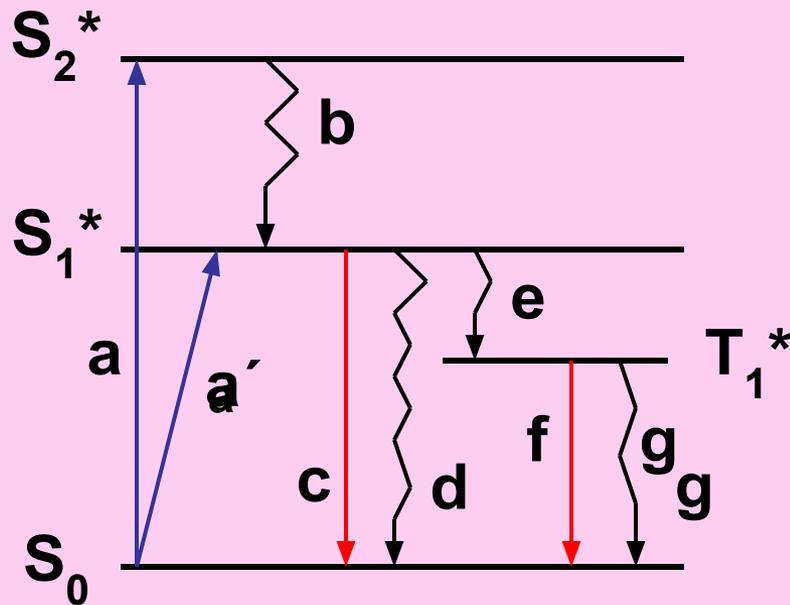
ДИАГРАММА СОСТОЯНИЙ

**ЭТО
СХЕМА, НА КОТОРОЙ
ПРЕДСТАВЛЕНЫ
ОСНОВНЫЕ ТИПЫ
ПЕРЕХОДОВ
МЕЖДУ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ
УРОВНЯМИ.**

**НА СХЕМЕ
ПРЯМЫЕ СТРЕЛКИ –
ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ
ПЕРЕХОДЫ,**

**ВОЛНИСТЫЕ
(ЗИГЗАГООБРАЗНЫЕ) –
БЕЗИЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ
ПЕРЕХОДЫ.**

ДИАГРАММА СОСТОЯНИЙ



a, a' - переходы
с поглощением
энергии

b, e - растрата энергии в
тепло

c - флуоресценция

f - фосфоресценция

d, g - все виды
безизлучательных
переходов

6. СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

У КАЖДОГО ВЕЩЕСТВА –
ХАРАКТЕРНАЯ СИСТЕМА
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ
УРОВНЕЙ.



ИЗЛУЧЕНИЯ РАЗНЫХ ДЛИН
ВОЛН
ИСПУСКАЮТСЯ И ПОГЛОЩА-
ЮТСЯ ПО-РАЗНОМУ.



СПЕКТРАЛЬНЫЙ СОСТАВ
ИСПУСКАЕМОГО И
ПОГЛОЩАЕМОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ –
ВАЖНЕЙШАЯ ХАРАКТЕРИ-
СТИКА ВЕЩЕСТВА.

СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ –
ГРАФИК ЗАВИСИМОСТИ
ОПТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТИ
ОБРАЗЦА

ОТ ДЛИНЫ ВОЛНЫ
ПАДАЮЩЕГО СВЕТА:

$$D = f(\lambda).$$

СПЕКТР ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ -
ГРАФИК ЗАВИСИМОСТИ
ИНТЕНСИВНОСТИ
ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ
ОТ ДЛИНЫ ВОЛНЫ
ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ:

$$I_{\lambda} = f(\lambda_{\lambda}).$$

Оптическая плотность

$$D = \lg (I_0 / I)$$

I_0 – интенсивность падающего света,
 I – интенсивность прошедшего
через систему света

ПРАВИЛО СТОКСА

Так как часть энергии высших возбужденных уровней растрачивается в виде тепла, ЭНЕРГИЯ КВАНТОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ МЕНЬШЕ ЭНЕРГИИ ПОГЛОЩЕННЫХ КВАНТОВ.

$$\downarrow \quad (\epsilon = hc/\lambda)$$

ДЛИНА ВОЛНЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ БОЛЬШЕ ДЛИНЫ ВОЛНЫ ПОГЛОЩЕННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ.

ПОЭТОМУ
ДЛЯ СПОНТАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ
СПРАВЕДЛИВО ПРАВИЛО СТОКСА:

«СПЕКТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ СДВИНУТЫ В СТОРОНУ БОЛЬШИХ ДЛИН ВОЛН ОТНОСИТЕЛЬНО СПЕКТРА ПОГЛОЩЕНИЯ ТОГО ЖЕ ВЕЩЕСТВА».

Иллюстрация правила Стокса

Триpletный уровень
расположен ниже
синглетного.



КВАНТЫ ФОСФОРЕСЦЕНЦИИ
МЕНЬШЕ КВАНТОВ
ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ,
А ДЛИНА ВОЛНЫ
ФОСФОРЕСЦЕНЦИИ
БОЛЬШЕ ДЛИНЫ ВОЛНЫ
ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ.

