

Spis treści

| | |
|--|----|
| 1. Podstawy spektroskopii absorpcyjnej w zakresie podczerwieni (FT-IR) | 11 |
| <i>(Kamilla Małek, Emilia Staniszevska-Ślęzak, Kamila Kochan, Katarzyna Majzner)</i> | |
| 1.1. Kwantowy opis – model oscylatora harmonicznego i anharmonicznego | 12 |
| 1.2. Drgania normalne | 14 |
| 1.3. Budowa spektrometru FT-IR | 15 |
| 1.3.1. Źródło światła | 16 |
| 1.3.2. Interferometr | 16 |
| 1.3.3. Komora pomiarowa | 17 |
| 1.3.4. Detektor | 18 |
| Bibliografia | 18 |
| 2. Podstawy spektroskopii rozpraszania ramanowskiego | 19 |
| <i>(Kamilla Małek, Małgorzata Barańska, Kamila Kochan)</i> | |
| 2.1. Opis kwantowy zjawiska rozpraszania ramanowskiego | 20 |
| 2.2. Budowa spektrometru ramanowskiego | 22 |
| 2.2.1. Laser | 23 |
| 2.2.2. Komora pomiarowa | 24 |
| 2.2.3. Element rozdzielający wiązkę promieniowania elektromagnetycznego | 24 |
| 2.2.4. Detektor | 25 |
| 3. Techniki spektroskopii absorpcyjnej w zakresie podczerwieni | 26 |
| 3.1. Metody pomiarowe w spektroskopii FT-IR <i>(Paweł Miśkowiec)</i> | 26 |
| 3.1.1. Technika transmisyjna | 26 |
| 3.1.2. Techniki refleksyjne | 28 |
| 3.1.2.1. Technika całkowitego wewnętrznego odbicia (ATR) | 28 |
| 3.1.2.2. Metoda odbicia rozproszonego w zakresie środkowej podczerwieni (DRIFT) | 30 |
| 3.1.2.3. Refleksyjno-absorpcyjna spektroskopia w podczerwieni (IRRAS) | 32 |
| 3.1.3. Metoda spektroskopii fotoakustycznej (PAS) | 34 |
| 3.1.4. Spektroskopia emisyjna w podczerwieni (IRES) | 35 |
| 3.2. Mikroskopia i obrazowanie FT-IR <i>(Ewelina Wiercigroch, Kamilla Małek)</i> | 36 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 3.3. | Oscylacyjny dichroizm kołowy (<i>Piotr F.J. Lipiński</i>) | 40 |
| 3.3.1. | Chiralność | 40 |
| 3.3.2. | Co to jest oscylacyjny dichroizm kołowy? | 41 |
| 3.3.3. | Jak mierzy się VCD? | 41 |
| 3.3.4. | Zastosowania spektroskopii VCD | 43 |
| 3.3.5. | Obliczenia widm VCD i związane z nimi problemy | 44 |
| 3.3.6. | Bardzo krótkie podsumowanie najnowszych zagadnień | 45 |
| | Bibliografia | 45 |
| 4. | Techniki spektroskopii ramanowskiej | 47 |
| 4.1. | Spektroskopia rezonansowego rozpraszania ramanowskiego (<i>Katarzyna M. Marzec, Jakub Dybaś</i>) | 47 |
| 4.1.1. | Rezonansowy a normalny efekt ramanowski oraz fluorescencja. | 47 |
| 4.1.2. | Zjawisko rezonansowego efektu ramanowskiego | 40 |
| 4.1.3. | Zastosowanie i możliwości RRS | 50 |
| 4.1.4. | Aparatura | 51 |
| | Bibliografia | 52 |
| 4.2. | Powierzchniowo wzmocnione rozpraszanie ramanowskie (SERS) (<i>Agata Królikowska, Jolanta Bukowska</i>) | 53 |
| 4.2.1. | Mechanizm wzmocnienia powierzchniowego | 54 |
| 4.2.2. | Rodzaje podłoży stosowanych w spektroskopii SERS | 56 |
| 4.2.3. | Cechy widm SERS | 58 |
| 4.2.4. | Zastosowania spektroskopii SERS | 58 |
| | Bibliografia | 58 |
| 4.3. | Ramanowska aktywność optyczna (ROA) (<i>Joanna E. Rode</i>) | 59 |
| 4.3.1. | Schemat ideowy zjawiska ROA | 59 |
| 4.3.2. | Opis teoretyczny zjawiska ROA | 61 |
| 4.3.3. | Opis aparatury do pomiarów ROA | 63 |
| 4.3.4. | Zastosowania techniki ROA | 65 |
| 4.3.5. | Podsumowanie | 65 |
| | Bibliografia | 67 |
| 4.4. | Obrazowanie ramanowskie (<i>Agnieszka Kaczor</i>) | 68 |
| | Bibliografia | 74 |
| 5. | Analiza chemometryczna widm FT-IR i ramanowskich | 75 |
| | (<i>Katarzyna Majzner, Kamila Kochan, Małgorzata Barańska</i>) | |
| 5.1. | Analiza pasm charakterystycznych | 75 |
| 5.2. | Analiza skupień | 77 |
| 5.2.1. | Hierarchiczna analiza skupień | 78 |
| 5.2.2. | Niehierarchiczna analiza skupień | 82 |
| 5.2.3. | Porównanie metod HCA, KMCA oraz FCA | 84 |
| | Bibliografia | 85 |

| | |
|---|-----|
| 6. Wybrane zastosowania spektroskopii absorpcyjnej FT-IR. | 86 |
| 6.1. Symetria molekuly i wpływ podstawienia izotopowego w widmach IR i ramanowskich chloropochodnych metanu (<i>Kamilla Małek, Katarzyna M. Marzec</i>) | 86 |
| Bibliografia. | 90 |
| 6.2. Rozkład pasma na składowe, na przykładzie widm ATR FT-IR tkanek miękkich (<i>Marlena Gąsior-Głogowska, Adam Oleszko</i>) | 90 |
| 6.2.1. Budowa skóry | 90 |
| 6.2.2. Białka skóry | 90 |
| 6.2.3. Spektroskopia absorpcyjna w podczerwieni w badaniach tkanek | 91 |
| Bibliografia. | 96 |
| 6.3. Synteza i charakterystyka spektralna hydroksyapatytów (<i>Marlena Gąsior-Głogowska, Adam Oleszko</i>) | 97 |
| 6.3.1. Hydroksyapatyty | 97 |
| 6.3.2. Badania struktury hydroksyapatytów przy użyciu spektroskopii w podczerwieni | 98 |
| Bibliografia. | 101 |
| 6.4. Zastosowanie spektroskopii w podczerwieni w oznaczaniu węglowodorów ropopochodnych w wodach powierzchniowych i ściekach (<i>Paweł Miśkowiec</i>) | 102 |
| 6.4.1. Skład ropy naftowej. Zanieczyszczenia środowiska produktami ropopochodnymi | 102 |
| 6.4.2. Toksyczne właściwości składników ropy naftowej. | 103 |
| 6.4.3. Regulacje prawne problemu skażenia środowiska produktami ropopochodnymi oraz metodyka pomiaru | 104 |
| 6.4.4. Wykorzystanie spektroskopii IR w analityce chemicznej | 106 |
| 6.4.5. Prawo podziału Nernsta. | 106 |
| Bibliografia. | 110 |
| 6.5. Ustalanie konfiguracji absolutnej z wykorzystaniem oscylacyjnego dichroizmu kołowego (<i>Piotr F.J. Lipiński</i>) | 110 |
| 6.5.1. Ustalanie konfiguracji absolutnej za pomocą oscylacyjnego dichroizmu kołowego | 110 |
| Bibliografia. | 114 |
| 6.6. Identyfikacja materiałów malarskich i produktów ich degradacji. Obrazowanie ATR FT-IR przekrojów warstw malarskich (<i>Emilia Staniszewska-Ślęzak, Kamilla Małek</i>) | 115 |
| 6.6.1. Charakterystyka chemiczna warstwy malarskiej i produktów jej degradacji | 115 |
| 6.6.2. Spektroskopia FT-IR jako technika stosowana w identyfikacji składu chemicznego dzieł sztuki | 118 |
| Bibliografia. | 121 |
| 6.7. Analiza strukturalna białek przy użyciu spektroskopii FT-IR (<i>Katarzyna Majzner</i>) | 121 |
| 6.7.1. Anatomia białek. | 121 |
| 6.7.2. Zastosowanie spektroskopii FT-IR do badania białek | 124 |

| | |
|--|-----|
| Bibliografia | 128 |
| 6.8. Analiza strukturalna lipidów z wykorzystaniem spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni (<i>Tomasz P. Wróbel</i>) | 129 |
| 6.8.1. Charakterystyka i występowanie lipidów | 129 |
| 6.8.2. Zastosowanie spektroskopii FT-IR do badania lipidów | 130 |
| Bibliografia | 133 |
| 6.9. Analiza strukturalna cukrów przy użyciu spektroskopii FT-IR (<i>Kamilla Małek, Ewelina Wiercigroch</i>) | 134 |
| 6.9.1. Budowa strukturalna cukrów | 134 |
| 6.9.2. Charakterystyczne pasma IR cukrów | 136 |
| Bibliografia | 138 |
| 6.10. Analiza widm ATR FT-IR tkanek zwierzęcych (<i>Emilia Staniszewska-Ślęzak, Kamilla Małek</i>) | 138 |
| 6.10.1. Charakterystyka biochemiczna wybranych tkanek zwierzęcych | 139 |
| 6.10.2. Widma FT-IR tkanek zwierzęcych | 139 |
| Bibliografia | 144 |
| 6.11. Diagnostyka rozwoju choroby poprzez obrazowanie FT-IR tkanki (<i>Kamila Kochan, Małgorzata Barańska</i>) | 145 |
| 7. Wybrane zastosowania spektroskopii ramanowskiej | 149 |
| 7.1. Identyfikacja struktury drugorzędowej białek w widmach ramanowskich (<i>Anna Ryguła</i>) | 149 |
| 7.1.1. Charakterystyka widm ramanowskich białek | 149 |
| 7.1.2. Charakterystyczne pasma ramanowskie reszt aminokwasowych | 151 |
| 7.1.3. Inne techniki spektroskopii ramanowskiej w analizie białek | 152 |
| Bibliografia | 154 |
| 7.2. Analiza ramanowska kwasów tłuszczowych (<i>Aleksandra Jaworska, Małgorzata Barańska</i>) | 154 |
| 7.2.1. Charakterystyka i występowanie kwasów tłuszczowych | 154 |
| 7.2.2. Zastosowanie spektroskopii ramanowskiej do badania kwasów tłuszczowych | 156 |
| Bibliografia | 159 |
| 7.3. Spektroskopia rozproszenia ramanowskiego jako metoda analizy lipidów w tkankach zwierzęcych/mieszaninach (<i>Krzysztof Czamara, Agnieszka Kaczor</i>) | 159 |
| 7.3.1. Klasyfikacja lipidów | 159 |
| 7.3.2. Charakterystyka spektralna lipidów | 161 |
| Bibliografia | 165 |
| 7.4. Polimorfizm modelowych trójacylogliceroli (<i>Krzysztof Czamara, Marta Z. Pacia, Agnieszka Kaczor</i>) | 165 |
| 7.4.1. Polimorfizm tłuszczów | 165 |
| 7.4.2. Charakterystyka spektralna polimorfów trójacylogliceroli | 167 |
| Bibliografia | 170 |
| 7.5. Identyfikacja karotenoidów w roślinach przy użyciu spektroskopii ramanowskiej (<i>Aleksandra Jaworska, Małgorzata Barańska</i>) | 171 |
| 7.5.1. Budowa, funkcje i występowanie karotenoidów | 171 |

| | | |
|---------|---|-----|
| 7.5.2. | Pasma ramanowskie karotenoidów | 172 |
| | Bibliografia. | 175 |
| 7.6. | Detekcja terpenów w olejkach cytrusowych oraz analiza chemotypów roślin zawierających olejki eteryczne (<i>Aleksandra Jaworska, Małgorzata Barańska, Kamilla Małek</i>) | 175 |
| 7.6.1. | Olejki cytrusowe – charakterystyka | 175 |
| 7.6.2. | Identyfikacja terpenów przy użyciu chromatografii gazowej i spektroskopii ramanowskiej | 176 |
| 7.6.3. | Analiza chemometryczna widm ramanowskich cytrusowych olejków eterycznych. | 177 |
| | Bibliografia. | 179 |
| 7.7. | Analiza pigmentów i materiałów malarskich w widmach ramanowskich (<i>Anna Ryguła, Kamilla Małek</i>). | 179 |
| 7.7.1. | Spektroskopia ramanowska jako technika analityczna w konserwacji dzieł sztuki. | 180 |
| 7.7.2. | Struktura warstw malarskich. | 181 |
| 7.7.3. | Metodyka pracy przy ramanowskiej analizie dzieł sztuki | 182 |
| | Bibliografia. | 185 |
| 7.8. | Oznaczanie glukozy w preparatach farmaceutycznych i płynach ustrojowych (<i>Agnieszka Kaczor</i>). | 186 |
| 7.9. | Spektroskopia rezonansowego rozpraszania ramanowskiego w badaniu struktury hemoglobiny (<i>Jakub Dybaś, Antonina Chmura-Skirińska, Katarzyna M. Marzec</i>) | 191 |
| 7.9.1. | Budowa i fizjologia hemoglobiny. | 191 |
| 7.9.2. | Zastosowanie spektroskopii rezonansowego rozpraszania ramanowskiego w badaniach strukturalnych hemoglobiny. | 194 |
| 7.9.3. | Zastosowanie spektrofotometrii UV-Vis w badaniach hemoglobiny | 195 |
| | Bibliografia. | 198 |
| 7.10. | Identyfikacja enancjomerów octanu bornylu i α -pinenu w olejkach eterycznych z igieł jodły syberyjskiej (<i>Katarzyna Chruszcz-Lipska</i>) | 198 |
| 7.10.1. | Terpeny | 198 |
| 7.10.2. | Stereochemia terpenów | 199 |
| 7.10.3. | Zawartość enancjomerów terpenów w olejkach eterycznych | 200 |
| 7.10.4. | Widma ramanowskiej aktywności optycznej (ROA) terpenów. | 201 |
| | Bibliografia. | 204 |
| 7.11. | Wyznaczanie konfiguracji absolutnej enancjomerów α -pinenu na podstawie pomiarów ramanowskiej aktywności optycznej i obliczeń kwantowo-chemicznych (<i>Grzegorz Zając, Małgorzata Barańska</i>) | 204 |
| 7.11.1. | Obliczenia teoretyczne ROA | 205 |
| | Bibliografia. | 210 |
| 7.12. | Szacowanie współczynnika wzmocnienia powierzchniowego oraz badanie adsorpcji 3-amino-5-merkpto-1,2,4-triazolu (AMT) na powierzchni srebra techniką powierzchniowo wzmocnionego rozpraszania ramanowskiego (SERS) (<i>Agata Królikowska, Jolanta Bukowska</i>) | 211 |

| | | |
|-----------|---|-----|
| 7.12.1. | Współczynnik wzmocnienia powierzchniowego w SERS | 211 |
| 7.12.1.1. | Sposoby definicji współczynnika wzmocnienia | 212 |
| 7.12.1.2. | Współczynnik wzmocnienia dla danego podłoża (<i>EF</i>) | 212 |
| 7.12.1.3. | Analityczny współczynnik wzmocnienia (<i>AEF</i>) | 213 |
| 7.12.1.4. | Współczynnik wzmocnienia dla pojedynczych molekuł (<i>SMEF</i>) | 214 |
| 7.12.2. | Najczęstsze źródła błędów w wyznaczaniu wartości współczynnika wzmocnienia SERS | 214 |
| 7.12.3. | Struktura i właściwości 3-amino-5-merkaptto-1,2,4-triazolu (<i>AMT</i>) | 215 |
| 7.12.4. | Widmo SERS monowarstwy 3-amino-5-merkaptto-1,2,4-triazolu (<i>AMT</i>) na podłożu srebrnym | 215 |
| | Bibliografia | 219 |
| 7.13. | Identyfikacja i badanie dystrybucji kofeiny w lekach przeciwbólowych <i>in situ</i> (<i>Małgorzata Barańska, Agnieszka Kaczor, Kamilla Małek</i>) | 219 |
| 7.14. | Charakterystyka organelli komórkowych na podstawie analizy pasm charakterystycznych oraz analizy skupień (<i>Katarzyna Majzner</i>) | 223 |
| 7.14.1. | Przypisanie najważniejszych pasm ramanowskich w widmach komórek | 224 |
| 7.14.2. | Analiza wyników obrazowania ramanowskiego komórek | 226 |
| | Bibliografia | 228 |
| 7.15. | Obrazowanie ramanowskie <i>in vitro</i> i <i>in vivo</i> jednokomórkowych organizmów produkujących karotenoidy (<i>Marta Z. Pacia, Agnieszka Kaczor</i>) | 229 |
| 7.15.1. | Charakterystyka spektralna składników organizmów jednokomórkowych | 230 |
| | Bibliografia | 234 |
| | Spis ilustracji | 236 |
| | Spis tabel | 244 |