

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 FJ. 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 FJ. 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 Staniszevska-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-Skirlńska, 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 Zajac, 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-merkapto-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-merkapto-1,2,4-triazolu (<i>AMT</i>)	215
7.12.4.	Widmo SERS monowarstwy 3-amino-5-merkapto-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