

Eksperymentalne zastosowanie spektroskopii molekularnej w badaniach materii | dr hab. Roman Wrzalik, prof. UŚ ...*

*... i przyjaciele

Spektroskopia molekularna to metoda badawcza, która pozwala „wstuchać się” w to, co mówią cząsteczki – bez potrzeby ich niszczenia, modyfikowania czy specjalnego przygotowania chemicznego. Dzięki wykorzystaniu promieniowania podczerwonego, światła laserowego, a także promieniowania widzialnego i ultrafioletowego możliwa jest analiza składu, struktury i właściwości bardzo różnorodnych materiałów – zarówno organicznych, jak i nieorganicznych. **Celem seminarium** jest przedstawienie spektroskopii molekularnej jako interdyscyplinarnego narzędzia do rozwiązywania zagadnień związanych z analizą składu i struktury materii.

Seminarium poświęcone będzie zatem praktycznym aspektom stosowania podstawowych technik spektroskopii molekularnej, takich jak spektroskopia w podczerwieni (IR), Ramana oraz UV-Vis. Zostaną one zaprezentowane na przykładzie badań nad:

- związkami organicznymi: alkoholami, lipidami, białkami, cukrami, polimerami i farmaceutykami,
- strukturami biologicznymi: komórkami roślinnymi i tkankami,
- materiałami węglowymi: grafenem, grafitem oraz materiałami grafenowymi i grafitopodobnymi,
- ciekłymi i plastycznymi kryształami, biomateriałami oraz materiałami optycznymi,
- materiałami naturalnymi: bursztynem, koralowcami, muszlami i skorupkami.

Podstawą zrozumienia materiału na poziomie molekularnym jest eksperyment, polegający na rejestracji widm pochłaniania, emisji bądź rozpraszania promieniowania przez cząsteczki. Często badania prowadzi się w zmiennych warunkach środowiskowych – temperatury, ciśnienia czy wilgotności – aby śledzić, jak wpływają one na kształt i intensywność pasm. Analiza zależności widmowych od parametrów zewnętrznych

pozwała uzyskać informacje o budowie cząsteczek, ich właściwościach, dynamice, stabilności oraz o procesach fizykochemicznych zachodzących w układzie.

Kluczowym elementem interpretacji zarejestrowanych widm, będących swoistym „odciskiem palca” obecnych grup chemicznych i przejść optycznych, są modele teoretyczne oparte na metodach kwantowo-mechanicznych, takich jak teoria funkcyjności gęstości (DFT). Obliczenia te umożliwiają modelowanie struktur molekularnych, przewidywanie typów drgań cząsteczek, a także wizualizację widm molekularnych. Porównanie widm teoretycznych z eksperymentalnymi pozwala precyzyjnie przypisać obserwowane pasma do określonych zjawisk, takich jak denaturacja białek, przejścia fazowe czy procesy degradacyjne materiałów. W ten sposób spektroskopia molekularna staje się nie tylko metodą analityczną, lecz także potężnym narzędziem badawczym, pozwalającym zajrzeć w świat molekuł i uchwycić historie „opowiadane” przez materię.