

Průzkum databází Ramanových spekter

Raman spectral databases prospecting

Radovan Hěl

Bakalářská práce
2011



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky
akademický rok: 2010/2011

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Radovan HÉL**
Osobní číslo: **A08038**
Studijní program: **B 3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor: **Informační a řídicí technologie**

Téma práce: **Průzkum databází Ramanových spekter**

Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se s problematikou Ramanovy spektroskopie.
2. Nastudujte možnosti využití Ramanovy spektroskopie.
3. Vypracujte rešerši internetových databází Ramanových spekter vybraných materiálů.
4. Zhodnoťte software Spectral ID 3.03 a jeho možnosti pro sestavení a využití podobné databáze.
5. Po dohodě s vedoucím Bakalářské práce zpracujte vlastní databázi vybraných materiálů.

Rozsah bakalářské práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

1. SCHMITT, M. – POPP, J. Raman spectroscopy at the beginning of the twenty-first century. *Journal of Raman Spectroscopy*, 2006, vol. 37, p. 20–28, ISSN: 1097-4555
2. ŽALOUDEK, František. Experimentální metody biofyziky III. 1. vyd. Olomouc: Rektorát Univerzity Palackého v Olomouci, 1986. 243 s.
3. PITT, G. D. Engineering aspects and applications of the new Raman instrumentation. *IEE Proc.–Sci. Meas. Technol*, November 2006, vol.152, no. 6.
4. VAŠKOVÁ, H. Raman spectroscopy: a modern technique for material properties identification. In *Annals of DAAAM for 2010 & Proceedings of the 21st International DAAAM Symposium 20–22 October, 2010 Zadar, Croatia*. Vienna: DAAAM International Vienna, 2010, p. 1321–1322. ISBN 978–3–901509–73–5.
5. Raman Spectra Database of Minerals and Inorganic Materials. [Databáze online]. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology. [citováno 2011-01-24]. Dostupné z URL [http://riodb.ibase.aist.go.jp/rasmin/E_index_list.html]. Databáze RASMIN.
6. The Database The RRUFFTM. [Databáze online]. University of Arizona. [citováno 2011-01-24]. Dostupné z URL [http://ruff.info].

Vedoucí bakalářské práce: **Mgr. Hana Vašková**
Ústav elektroniky a měření

Datum zadání bakalářské práce: **25. února 2011**

Termín odevzdání bakalářské práce: **7. června 2011**

Ve Zlíně dne 25. února 2011


prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
děkan




prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
ředitel ústavu

ABSTRAKT

Ramanova spektroskopie se v posledních letech projevila jako velmi účinná metoda pro zkoumání a identifikaci látek, zejména jejich složení, struktur a vlastností na molekulární úrovni. Tato práce se zabývá její podstatou, užitím a hlavně, průzkumem digitálních a volně dostupných knihoven spekter, získaných právě touto metodou. V rámci průzkumu byl vytvořen seznam dvanácti online databází spekter, představeny dva programy pro získání a práci se spektroskopickými daty a také vytvořena databáze padesáti čtyř spekter pigmentů.

Klíčová slova: Ramanova spektroskopie, Spektra, Identifikace látek, Databáze Ramanových spekter

ABSTRACT

Raman spectroscopy has recently emerged as a very effective method for exploring and identifying compounds, particularly their composition, structure and properties at the molecular level. This work deals with it's essence, application and mostly, research of digital and freely available libraries of spectra, obtained by this method. Within the frame of the research, a list of twelve online spectroscopic libraries was made, two programs for acquiring and editing spectroscopic data were introduced and also a database of fifty four pigment spectra was made.

Keywords: Raman Spectroscopy, Spectra, Compound identification, Raman spectral databases

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval rodině za podporu při studiu a také mé vedoucí bakalářské práce Mgr. Haně Vaškové za odborné vedení a cenné rady v průběhu vypracovávání této práce.

„Minds are like parachutes. They only function when they are open.“

Sir James Dewar, Scientist (1877-1925)

Prohlašuji, že

- beru na vědomí, že odevzdáním bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších právních předpisů, bez ohledu na výsledek obhajoby;
- beru na vědomí, že bakalářská práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému dostupná k prezenčnímu nahlédnutí, že jeden výtisk bakalářské práce bude uložen v příruční knihovně Fakulty aplikované informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně a jeden výtisk bude uložen u vedoucího práce;
- byl/a jsem seznámen/a s tím, že na moji bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 1 autorského zákona má UTB ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 2 a 3 autorského zákona mohu užít své dílo – bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen s předchozím písemným souhlasem Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, která je oprávněna v takovém případě ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše);
- beru na vědomí, že pokud bylo k vypracování bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tedy pouze k nekomerčnímu využití), nelze výsledky bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- beru na vědomí, že pokud je výstupem bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá. Neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji,

- že jsem na bakalářské práci pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval. V případě publikace výsledků budu uveden jako spoluautor.
- že odevzdaná verze bakalářské práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

Ve Zlíně

.....
podpis diplomanta

OBSAH

ÚVOD	9
1 TEORETICKÁ ČÁST	11
1 RAMANOVA SPEKTROSKOPIE	12
1.1 PŘEDSTAVENÍ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE	12
1.2 OBJEV METODY	12
1.3 RAMANŮV ROZPTYL	13
2 VIBRACE MOLEKULY	16
2.1 VIBRACE DVOUATOMOVÉ MOLEKULY	16
2.2 VÍCEATOMOVÁ MOLEKULA	17
3 INTERPRETACE SPEKTER	18
4 VÝHODY A NEVÝHODY RAMANOVY SPEKTROSKOPIE	20
4.1 VÝHODY RAMANOVY SPEKTROSKOPIE	20
4.2 NEVÝHODY RAMANOVY SPEKTROSKOPIE.....	20
4.2.1 Fluorescence.....	21
4.2.2 Metody k potlačení fluorescence.....	22
5 VYUŽITÍ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE	23
5.1 CHEMIE	23
5.2 MATERIÁLOVÉ VĚDY	23
5.3 NANOTECHNOLOGIE	23
5.4 POLOVODIČOVÝ PRŮMYSL.....	23
5.5 KRIMINALISTIKA, BEZPEČNOSTNÍ SLOŽKY	24
5.6 FOREZNÍ VĚDY	24
5.7 GEOLOGIE A MINERALOGIE.....	25
5.8 FARMACEUTICKÝ PRŮMYSL.....	26
5.9 LÉKAŘSTVÍ, BIOLOGIE	27
5.10 UMĚNÍ, KULTURNÍ DĚDICTVÍ.....	28

II	PRAKTICKÁ ČÁST	29
6	PŘEHLED DATABÁZÍ RAMANOVÝCH SPEKTER	30
6.1	RRUFF	31
6.2	SDBS	32
6.3	RASMIN	33
6.4	IRUG	34
6.5	RAMAN DATABASE – UNIVERSITY OF PARMA	35
6.6	SFMC	36
6.7	ENS DE LYON	37
6.8	DIPARTIMENTO DI SCIENZE DELLA TERRA IN SIENA	38
6.9	RDRS	39
6.10	RAMAN SPECTROSCOPIC LIBRARY - UCL CHEMISTRY	40
6.11	MCCREERY RESEARCH GROUP	41
6.12	SICILAE STUDIUM GENERALE	42
6.13	TIŠTĚNÉ DATABÁZE	43
7	VLASTNÍ MĚŘENÍ	46
7.1	INSTRUMENTACE	46
7.2	PROSTŘEDÍ PROGRAMU WIRE 3.2	47
7.3	NAMĚŘENÁ SPEKTRA	48
7.3.1	Ametyst	48
7.3.2	Křišťál	50
7.3.3	Aragonit.....	52
7.3.4	Uhlíčitan sodný	53
8	SPECTRAL ID 3.0	54
8.1	PROSTŘEDÍ PROGRAMU SPECTRAL ID 3.0	54
9	VYTVORENÍ VLASTNÍ DATABÁZE	56
9.1	VLOŽENÍ ZÁZNAMU	56
9.2	HLEDÁNÍ V DATABÁZI	57
	ZÁVĚR	58
	ZÁVĚR V ANGLIČTINĚ	59
	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	60
	SEZNAM INTERNETOVÝCH DATABÁZÍ	64
	SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK	66
	SEZNAM OBRÁZKŮ	67
	SEZNAM TABULEK	69
	SEZNAM PŘÍLOH	70

ÚVOD

Téma této práce jsem si vybral, jelikož mě vždy zajímalo, jak je možné pomocí světla, resp. jeho rozptylu, identifikovat měřenou látku a zjišťovat o ní podrobné informace. Na začátku práce jsem tedy nebyl ani já nijak blíže seznámen se spektroskopickými metodami, konkrétně s Ramanovou spektroskopií. Mým cílem bylo poskytnout čtenáři základní znalosti o této problematice a dostatečný základ, ze kterého může případně vycházet pro další širší studium.

Ramanova spektroskopie je analytická metoda, umožňující zkoumání a identifikaci látek a jejich vlastností na molekulární úrovni. Využívá přitom neelastický rozptyl monochromatického světla, tzv. Ramanovu jevu, který byl experimentálně objeven a popsán v roce 1928. Přestože tento jev je znám už desítky let, k jeho efektivnímu využití dochází až s rozvojem moderních technologií, jelikož je to jev slabý a je třeba výkonné měřicí aparatury se speciálními filtry.

V první části práce se pokusím jednoduše a srozumitelně představit Ramanovu spektroskopii, jev, na kterém je založená, i s jejími hlavními klady a zápory. Mimo jiné uvedu metody k potlačení fluorescenčního záření, které patří mezi největší překážky v měření. Také nastíním princip interpretace spekter, kdy každý peak (vrchol) v zobrazeném grafu Ramanova spektra, odpovídá nějakému vibračnímu stavu nebo typu chemické vazby mezi molekulami. Dále uvedu některé možné obory působnosti, ve kterých Ramanova spektroskopie nachází své uplatnění. Těchto oborů je celá řada, jelikož svými vlastnostmi poskytuje účinný nástroj ke zkoumání a ověření vlastností analyzovaného vzorku v různých stádiích zpracování.

V praktické části se zaměřím na internetové databáze Ramanových spekter, popíšu jejich základní vlastnosti a uvedu k nim ukázkou naměřeného spektra z dané databáze. Jako důležité informace o každé databázi považuji: spektra jakých látek jsou obsažena, zda umožňuje vyhledávání, jestli poskytuje spektroskopická data ke stáhnutí, či jestli se dá se zobrazeným spektrem dále pracovat, například zobrazit peaky, přiblížit oblast atd.

Poté seznámím čtenáře se dvěma programy. Program WiRE, sloužící k získání Ramanových spekter a práci s nimi, využiji také na vlastní měření vybraných látek. Výsledky měření porovnam se spektry z uvedených databází k ověření, zda se i ve školních podmínkách dá dosáhnout stejných výsledků, k jakým přišli lidé z celého světa.

Druhým programem, na který se zaměřím, je Spectral ID sloužící k obsluze, vytváření a hledání ve spektroskopických knihovnách. S pomocí programu Spectral ID se také pokusím vytvořit vlastní databázi Ramanových spekter vybraných materiálů.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 RAMANOVA SPEKTROSKOPIE

1.1 Představení Ramanovy spektroskopie

Ramanova spektroskopie je analytická metoda umožňující zkoumání struktury a složení látek na molekulární úrovni. Tato vibrační metoda umožňuje rychlou identifikaci materiálů, poskytuje informace o složení, prostorovém uspořádání molekul a umožňuje strukturální analýzu látek. Stejně jako každý člověk na světě má jiný, jedinečný, soubor otisků prstů, podle kterých může být identifikován, i každá látka má svou jedinečnou charakteristiku - Ramanova spektra. [1] Struktura a složení materiálů ovlivňuje jejich fyzikální vlastnosti a následně vlastnosti produktů z těchto materiálů vyrobených. Prostřednictvím Ramanovy spektroskopie mohou být tyto vlastnosti a jejich změny sledovány a kontrolovány. [2]

1.2 Objev metody

Metoda je pojmenována po indickém fyzikovi Čandrašékharu Venkata Ramanovi (1888-1970), jenž za výsledky své práce a objev Ramanova jevu obdržel v roce 1930 Nobelovu cenu za fyziku. Profesor Raman společně s K. S. Krišnanem popsali v roce 1928 jev neelastického optického rozptylu, který je základem Ramanovy spektroskopické metody. [2]



Obr. 1 – C. V. Raman [4]

Přestože byl Ramanův jev objeven před více jak osmdesáti lety, k efektivnímu využití Ramanovy spektroskopie dochází až v posledních pár desetiletích, což souvisí především s nejnovějším vývojem v oblasti laserové technologie, konstrukcí velmi efektivních filtrů k potlačení elasticky rozptýleného Rayleighova světla a vývojem velmi citlivých senzorů.

Ramanova spektroskopie má celou řadu výhod, které napomáhají efektivnímu a rychlému měření vzorků. Mezi nesporné přednosti této metody patří fakt, že se jedná o nekontaktní a nedestruktivní techniku, která ve většině případů nevyžaduje přípravu měřených vzorků (nebo přípravu pouze minimální). [3]

1.3 Ramanův rozptyl

Ramanův jev je neelastický rozptyl světla, který nastává při interakci molekuly s fotonem dopadajícího záření. Část světla je rozptýlena beze změny frekvence (tzv. Rayleighův elastický rozptyl), část je absorbována a zbývající malá část světla je rozptýlena neelasticky.

Při interakci fotonu s molekulou, obzvláště s elektronovým obalem a s jejími vnitřními vazbami, dojde k zářivému dvoufotonovému přechodu mezi dvěma stacionárními vibračními stavy molekuly, jejichž energie jsou E_1 a E_2 , jestliže má dopadající záření frekvenci:

$$f_0 > \frac{|E_2 - E_1|}{h}, \quad (1)$$

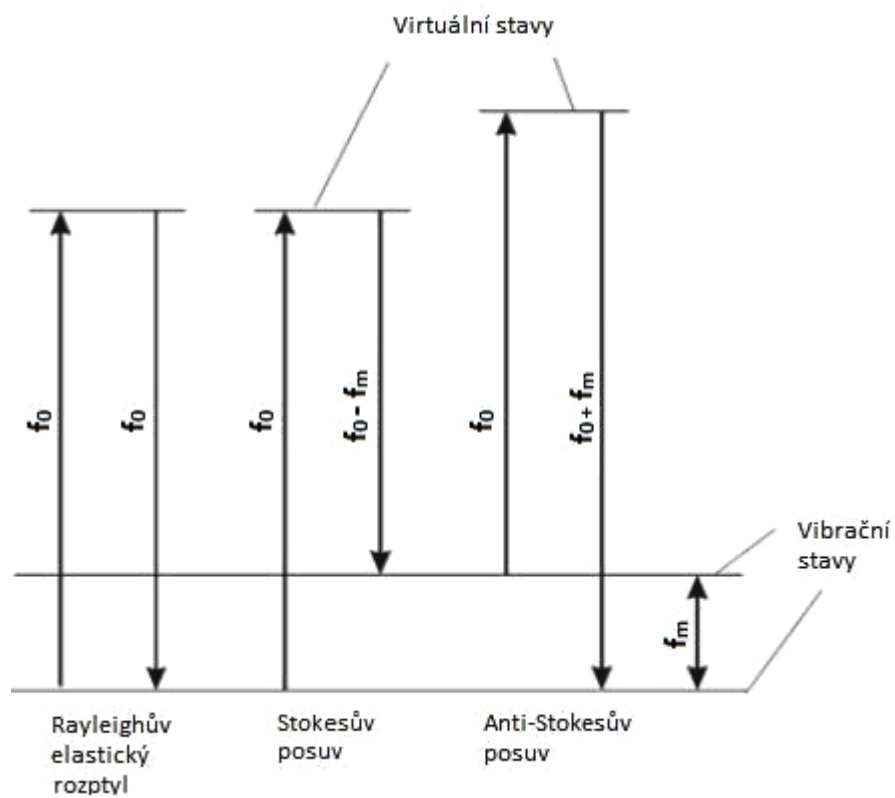
kde h je Planckova konstanta, přičemž je vyzářen foton rozptýleného záření. Pro vznik Ramanova rozptylu je také nutné, aby při vibračním pohybu docházelo ke změně polarizovatelnosti molekuly α (polarizibilita, tj. míra „obtížnosti“, s níž se vychylují negativní náboje elektrickým polem), tzn.:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial q} \neq 0. \quad (2)$$

[2]

Ramanův jev je založen na molekulární deformaci v elektrickém poli určeném polarizovatelností molekuly. Laserový paprsek může být považován za oscilační elektromagnetické vlny s elektrickým vektorem \mathbf{E} (vektor intenzity elektrického pole dopadajícího záření). Při interakci se vzorkem, se indukuje elektrický dipólový moment (vektorová veličina popisující nesymetrické rozdělení elektrického náboje) $P = \alpha E$, který deformuje molekuly. Tyto periodické deformace způsobí vibrace molekul s charakteristickou frekvencí \mathbf{f}_m . Amplitudy těchto vibrací se nazývají jaderný posun. Jinými slovy, monochromatické laserové světlo s frekvencí \mathbf{f}_0 vybudí molekuly a přemění je na oscilující dipóly (dvojice vázaných elektrostatických nábojů opačného znaménka), to je také vidět na Obr. 2. Takové oscilující dipóly vyzářují světlo o jedné z těchto frekvencí:

- A) Elastický Rayleighův rozptyl:** Molekula bez aktivních Ramanových módů absorbuje foton s frekvencí \mathbf{f}_0 a je excitována do virtuální energetické hladiny. Následně se vrací zpět na původní vibrační stav, přičemž vyzáří světlo se stejnou frekvencí \mathbf{f}_0 jakou má zdroj buzení.
- B) Neelastický Ramanův rozptyl:**
- 1. Stokesův posuv:** Foton s frekvencí \mathbf{f}_0 je absorbován aktivní Ramanovou molekulou, která je v době interakce v základním vibračním stavu. Část energie fotonu je převedena na aktivní Ramanův mód s frekvencí \mathbf{f}_m a výsledná frekvence rozptýleného světla je pak snížena na hodnotu $\mathbf{f}_0 - \mathbf{f}_m$.
 - 2. Anti-Stokesův posuv:** Foton s frekvencí \mathbf{f}_0 je absorbován aktivní Ramanovou molekulou, která je v době interakce už ve vybuděném vibračním stavu. Přebytková energie vybuděného aktivního Ramanova módu je uvolněna, molekula se poté vrací na základní vibrační stav a výsledná frekvence rozptýleného světla vzroste na $\mathbf{f}_0 + \mathbf{f}_m$.



Obr. 2 – Schéma přechodů

2 VIBRACE MOLEKULY

Každá linie Ramanova spektra je závislá na počtu a hmotě vibrujících atomů uvnitř molekuly. Energie rozptýleného fotonu je rozdílná oproti energii fotonu dopadajícího, jelikož získal nebo ztratil část své energie na přechodu mezi dvěma stacionárními vibračními stavy molekuly. [6]

2.1 Vibrace dvouatomové molekuly

Vibrací dvouatomové molekuly rozumíme periodickou změnu mezijaderné vzdálenosti atomů, přičemž molekula jako celek má konstantní translační a rotační pohyb. Zjednodušeně si to můžeme představit jako harmonický oscilátor tvořený dvěma objekty na pružině, oscilujícími okolo své rovnovážné polohy.



Frekvence harmonického oscilátoru je dána:

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad (3)$$

kde k je silová konstanta a μ je redukovaná hmotnost.

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (4)$$

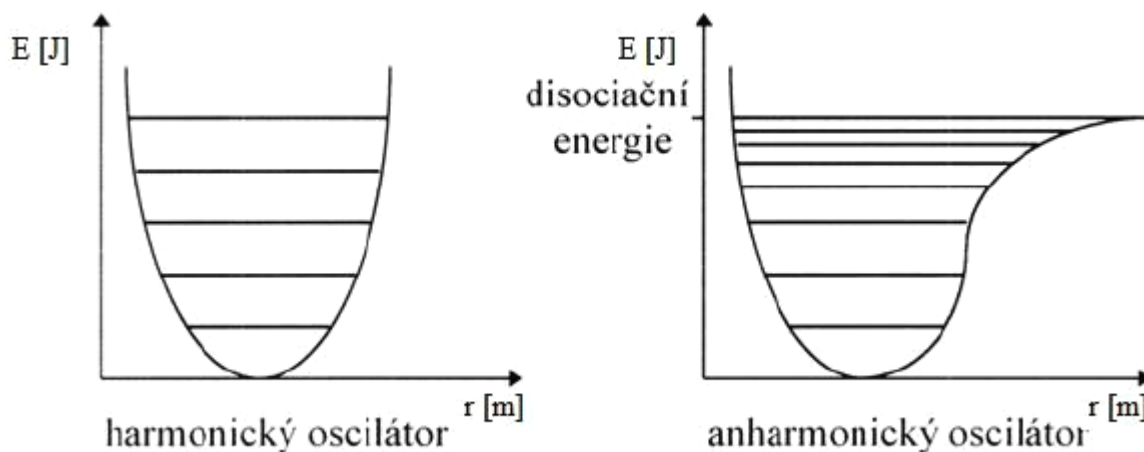
Frekvence, s jakou atomy vibrují, závisí na:

- síle poutající atomy (typ chemické vazby)
- druhu vibrujících atomů (hmotnost atomů)

Jedná-li se o harmonický oscilátor, je potenciální energie kvadratickou funkcí výchylky atomů, způsobenou jejich vibrací. V takto uvažovaném systému může nastat přechod pouze mezi sousedními vibračními hladinami. K přechodu z jedné vibrační hladiny na sousední dochází po dodání molekule potřebného množství energie ve formě elektromagnetického záření s frekvencí rovnající se frekvenci vibrace molekuly. Při absorpci energie se frekvence nemění, avšak změní se amplituda vibrací.

Může však nastat i případ anharmonického oscilátoru, kdy dojde k přechodu na jinou než sousední vibrační hladinu, když je frekvence záření přibližně násobek fundamentální frekvence (frekvence odpovídající přechodu ze základního do prvního excitovaného stavu).

[7]



Obr. 3 – Křivka potenciální energie [7]

2.2 Víceatomová molekula

Víceatomovou molekulu můžeme uvažovat jako soustavu hmotných bodů, jež jsou vázány různě silnými chemickými vazbami. Vibrace víceatomové molekuly je složitá forma kmitavého pohybu, která se dá popsat jako součet jednoduchých harmonických pohybů, tzv. *normálních vibrací*. Při normální vibraci všechny atomy uvnitř molekuly vibrují se stejnou frekvencí, současně nabývají maximálních výchylek i rovnovážných poloh, ale mají různé amplitudy. [7]

3 INTERPRETACE SPEKTER

„Každé ramanovsky aktivní normální vibraci molekuly přísluší pás ve spektru Ramanova rozptylu (přesněji řečeno dva pásy, jeden ve Stokesově a druhý v anti-Stokesově oblasti, běžně se měří Ramanova spektra pouze ve Stokesově oblasti). Ramanovo spektrum představuje závislost intenzity Ramanova rozptylu (osa y) na vlnočtu Ramanova posunu (osa x).“ [7]

Pro vlnočty je často voleno značení v anglickém jazyce - wavenumbers či Raman shift. Jeho jednotkami jsou reciproké cm^{-1} . K převodu mezi spektrální vlnovou délkou a vlnočtem se užívá následující vzorec:

$$\Delta\omega = \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda_1} \right), \quad (5)$$

kde $\Delta\omega$ je Ramanův posuv vyjádřený vlnočtem, λ_0 je excitační vlnová délka, a λ_1 je vlnová délka rozptýleného fotonu.

Vzorec uvedený výše se může upravit do tvaru pro konverzi jednotek:

$$\Delta\omega(\text{cm}^{-1}) = \left(\frac{1}{\lambda_0(\text{nm})} - \frac{1}{\lambda_1(\text{nm})} \right) \times 10^7 \frac{(\text{nm})}{(\text{cm})} \quad (6)$$

Pro konverzi frekvence a vlnové délky se užívá vztah:

$$\lambda = \frac{c}{f} = cT, \quad (7)$$

kde λ je vlnová délka, c je fázová rychlost šíření vlnění, T je perioda a f je frekvence vlnění.

Pro výpočet energie fotonu E platí vztah:

$$E = hf = \frac{hc}{\lambda}. \quad (8)$$

K analýze normálních vibračních modů se užívá tzv. koncepce charakteristických vlnočtů funkčních skupin, která umožňuje určit některé význačné pásy ve spektru. Jako oblast „otisku palce“ (fingerprint region) jsou označovány pásy v intervalu 400-1500 cm^{-1} . Pro určení funkčních skupin (např. $-\text{OH}$, $\text{C}=\text{O}$, $\text{N}-\text{H}$, CH_3 aj.) jsou vhodné absorpční pásy s vrcholy (peaky) v intervalu 1500-4000 cm^{-1} . [7]

Se znalostí těchto vrcholů a pomocí vyhledávacích programů, či digitálních databází spekter, je možné neznámou studovanou látku identifikovat. Průzkum internetových databází Ramanových spekter byl také jedním z bodů zadání této práce.

Tab. 1 – Vlnočty některých charakteristických vibrací vazeb a skupin v Ramanových spektrech [2]

Vlnočty, cm^{-1}	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
aminy – primární				
3550-3280	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$	$-\text{NH}_2$	3450-3160
vlnočty s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba, vliv menší než u $-\text{OH}$ širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
3450-3160	vw-w	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$	$-\text{NH}_2$	1650-1580
vlnočty s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba, vliv menší než u $-\text{OH}$ širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
1650-1580	w	$\delta(\text{NH}_2)$	$-\text{NH}_2$	Ar: 1360-1240 R: 1295-1145
1360-1240	m-w	$\nu(\text{CN})$	ArNH_2	1120-1020
1295-1145	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	RNH_2 , často překryv pásů	1240-1020
1240-1020	m-s	$\nu(\text{CN})$	RNH_2 , často překryv pásů	-
1120-1020	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	ArNH_2 , často překryv pásů	1120-1020

Použité zkratky:

Intenzita: vs - velmi silná, s - silná, m - střední, w - slabá, vw - velmi slabá, v - proměnná, br - široký pás, sh - raménko (anglicky shoulder).

Popis vibračních kmitů: ν - valenční, δ - deformační, γ - mimorovinný, ω - kývavý (anglicky wagging), ρ - kolébavý (angl. rocking), as - antisymetrický, s - symetrický, d - degenerovaný,

amid I - III - označení amidických pásů I - III, vystihující silné spřažení vibrací v amidech, komb.p. - kombinační pásy. R - alkyl, Ar - aryl.

Kompletní tabulka s vysvětlivky a popisem je uvedena v Příloze I.

4 VÝHODY A NEVÝHODY RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

Ramanova spektroskopie má celou řadu výhod, díky kterým našla své uplatnění v širokém okruhu působnosti. Výzkum a vývoj moderních technologií výhody ještě více posiluje a zároveň přispívá k potlačování nevýhod.

4.1 Výhody Ramanovy spektroskopie

- Rozmanitost vzorků: Může být použita na pevné, kapalné či plynné látky.
- Látky organické i anorganické.
- Různá forma vzorků: gely, roztoky, suspenze či tenké vrstvy, stejně tak i na vlákna nebo na práškové a amorfni vzorky.
- Nevyžaduje žádnou, nebo pouze minimální přípravu vzorku.
- Možnost měření vodných roztoků jelikož voda neovlivňuje měření.
- Nekontaktní a nedestruktivní.
- Velmi specifická, poskytuje chemický „otisk“ látky.
- Rychlá metoda. Možnost získání spekter už během několika sekund.
- Vzorky lze analyzovat přes obalové materiály, například přes sklo nebo obal z polymeru.
- Možnost vzdálených měření za pomoci přenášení signálu optickými vlákny.
- Ramanova spektra mohou být získána z velmi malého množství vzorku.
- Připojením mikroskopu či sondy přes optické vlákna umožňuje *in situ* měření.

4.2 Nevýhody Ramanovy spektroskopie

- Ramanův rozptyl je slabý jev – způsobuje jej řádově 1 foton z cca $10^6 - 10^7$. K detekci je třeba vysoce citlivých přístrojů.
- Fluorescence nečistot nebo vzorku samotného může Ramanova spektra skrýt.
- Ohřev intenzivním laserovým zářením může citlivý vzorek zničit.
- Většina kovů a slitin není Ramanovsky aktivní. [9]

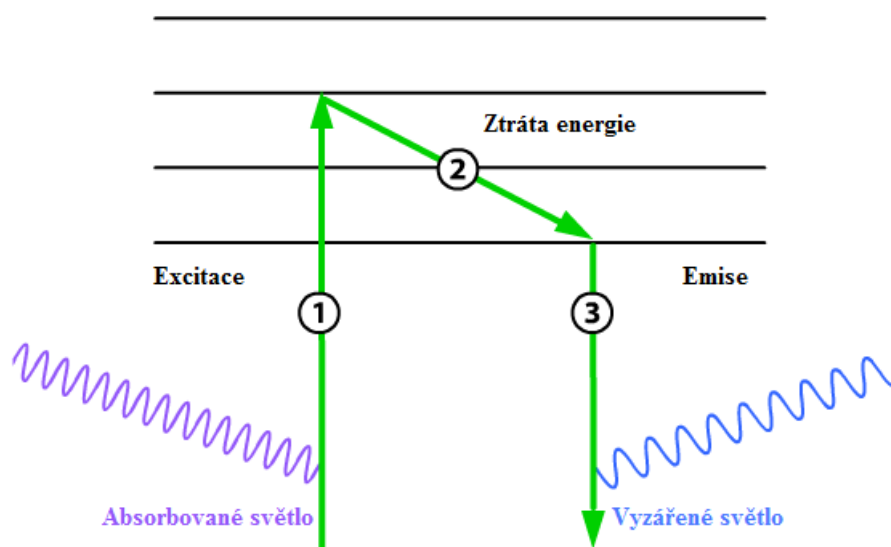
4.2.1 Fluorescence

Fluorescence je jev, při němž dochází k emisi světla látkou, která absorbovala světlo nebo jiné elektromagnetické záření s rozdílnou vlnovou délkou. Ve většině případů má vyzářené světlo delší vlnovou délku a menší energii, než absorbované záření. Nicméně může nastat i situace, když je absorbované záření intenzivnější, že elektron absorbuje dva fotony. Tato dvoufotonová absorpce může vést k emisi světla s kratší vlnovou délkou a větší energií než je vlnová délka absorbovaného světla.

Nejvýraznějším projevem fluorescence je absorbování světla z ultrafialové oblasti, tudíž pro oko neviditelného, a vyzáření světla ve viditelné oblasti. [10]

Ramanův rozptyl a fluorescenční emise jsou dva soupeřící jevy, které mají podobný původ. Obecně, laserový foton interaguje s molekulou a předá jí část své energie, která umožní molekulovou vibraci (Stokesův proces). Rozptýlený foton má tedy menší energii a související světlo vykazuje posun ve frekvenci. Různé frekvenční posuny spojené s různými molekulárními vibracemi vyvolávají spektra charakteristická pro konkrétní sloučeniny.

Pokud excitovaný foton neposkytne dostatečné množství energie molekule, neuskuteční se potřebný přechod pro generování fluorescence. Pokud však dojde ke vzniku fluorescence, bývá často mnohem intenzivnější než Ramanův rozptyl a tím pádem skrývá specifické rysy Ramanova spektra. Je tedy vhodné užít metody k jejímu potlačení.



Obr. 4 – Fluorescenční proces [11]

4.2.2 Metody k potlačení fluorescence

- Jednou z metod, jak fluorescenci zabránit, je volba laseru o vhodné excitační vlnové délce. Volba vlnové délky z blízko-infračervené (NIR) oblasti způsobí, že laserový foton má menší energii a tím je riziko vzniku fluorescence menší. Naopak volba vlnové délky z ultrafialové (UV) oblasti, může vést k emisi fluorescence, ale ta je od Ramanova signálu široce oddělena tak, že je možné Ramanovo spektrum zaznamenat bez fluorescenčního rušení.
- Vhodné nastavení měřících parametrů. Například výkon laseru, doba vystavení látky laserovému paprsku, tzv. exposure time, zvýšení počtu naměřených spekter, tzv. akumulace, které zvyšují Ramanův signál oproti šumu pozadí a tím je získané spektrum zřetelnější. [12]
- Photo-bleaching. Metoda spočívá ve vystavení měřeného vzorku po určitou dobu intenzivnímu záření, kde zdrojem světla je laser Ramanova spektrometru. Toto záření často vyvolává fotolytický rozklad, odbourává fluorescenční molekuly a snižuje fluorescenční pozadí. [13]

5 VYUŽITÍ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

Ramanova spektroskopie nachází své uplatnění v mnoha vědeckých a průmyslových oborech a odvětvích jako jsou:

5.1 Chemie

- Získávání poznatků a informací o zkoumaných molekulách a chemických systémech, pozorování interakce organických a anorganických molekul s kovovými povrchy. [14]
- Ramanova spektroskopie poskytuje „otisků prstů“ pro identifikaci molekuly, jelikož vibrační informace jsou specifické pro chemické vazby a symetrie molekul.

5.2 Materiálové vědy

- Ramanova spektroskopie má zásadní význam pro určování a strukturální analýzy téměř všech druhů materiálů (amorfní, částečně krystalické, průhledné, neprůhledné a vzorky s různými povrchovými strukturami). [15]

5.3 Nanotechnologie

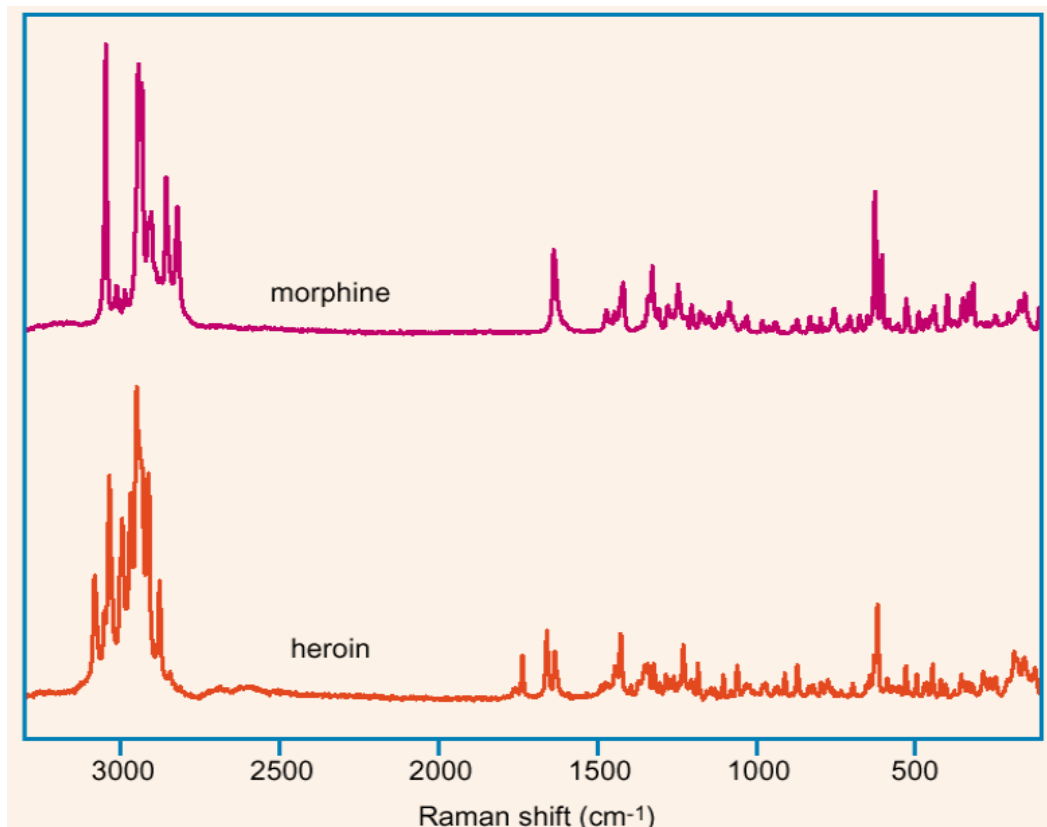
- Ramanova spektroskopie je standardní nástroj pro charakterizaci a studium fyzikálních vlastností materiálů na bázi uhlíku. Ve svém přirozeném stavu pevný uhlík existuje v různých strukturálních modifikacích (diamant a grafit), které vykazují odlišné fyzikální a mechanické vlastnosti. RS poskytuje informace o vibračních stavech molekul uhlíku, například informace o velikosti (délky i průměru). RS tedy umožňuje výzkum a vývoj nanotrubiček a fullerenu s cílem optimalizovat jejich vlastnosti. [16]

5.4 Polovodičový průmysl

- Umožňuje stanovení nečistot polovodičů v silikonových substrátech a diamantu-podobných uhlíkových vrstvách. Jednotlivá spektra lze získat ve velmi krátké době. Identifikace defektů na povrchu materiálů. Taková měření mohou pozitivně ovlivnit výrobní výnosy a ekonomickou stránku výroby. [15]

5.5 Kriminalistika, bezpečnostní složky

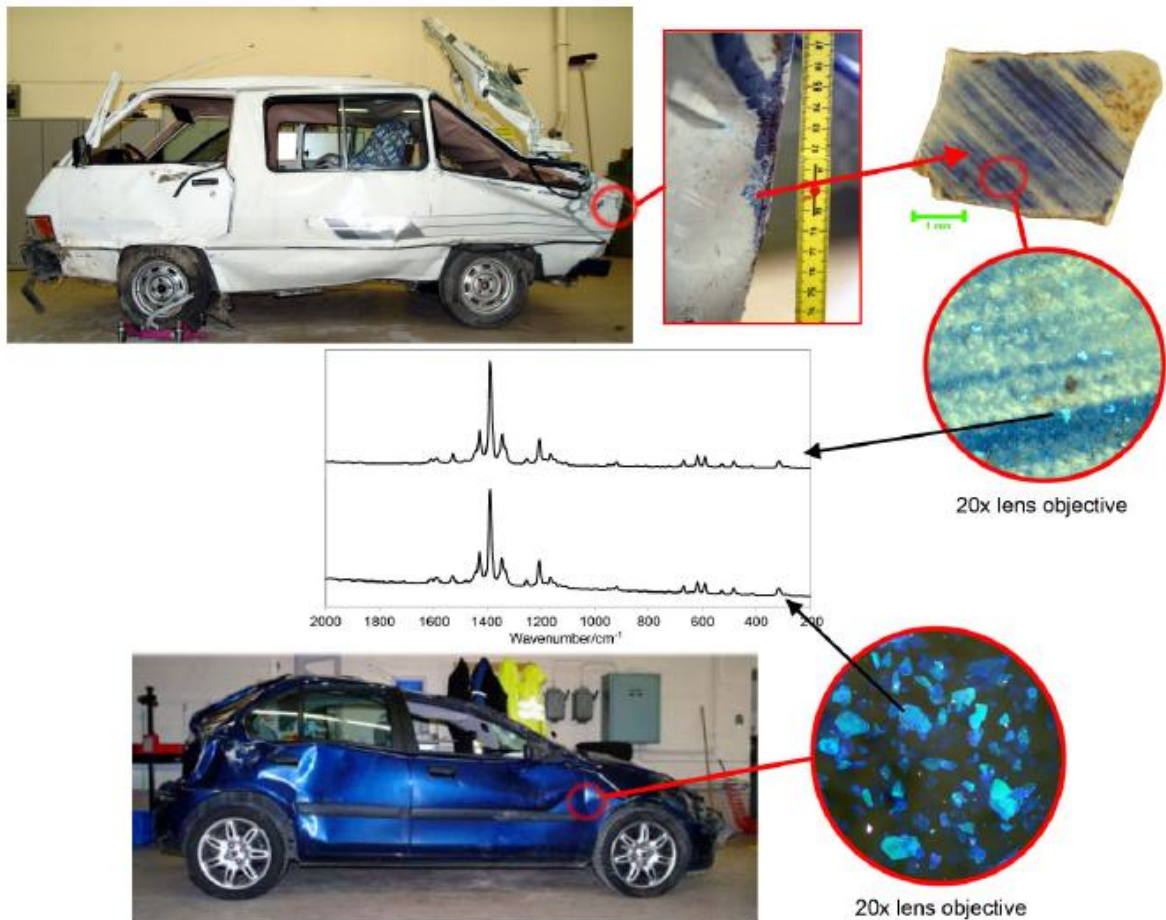
- Identifikace neznámých nebo nebezpečných látek, například detekování výbušnin a drog letištní ochrankou. Možnost detekování látek i přes obal. [15]
- Identifikace zbytkových stop látek v důkazních materiálech, a jiné. [17]



Obr. 5 – Ramanovo spektrum pro Morfium a Heroin [18]

5.6 Forezní vědy

- Ramanova technika prokázala významné výhody, jako je její nedestruktivní povaha, rychlost, a zejména možnost provádět mikroskopické analýzy přímo na místě. Ve forezní aplikaci, je to univerzální metoda, která pokrývá široké spektrum látek, jako stopové důkazy, nezákonné drogy, inkousty, barvy a další. [17]



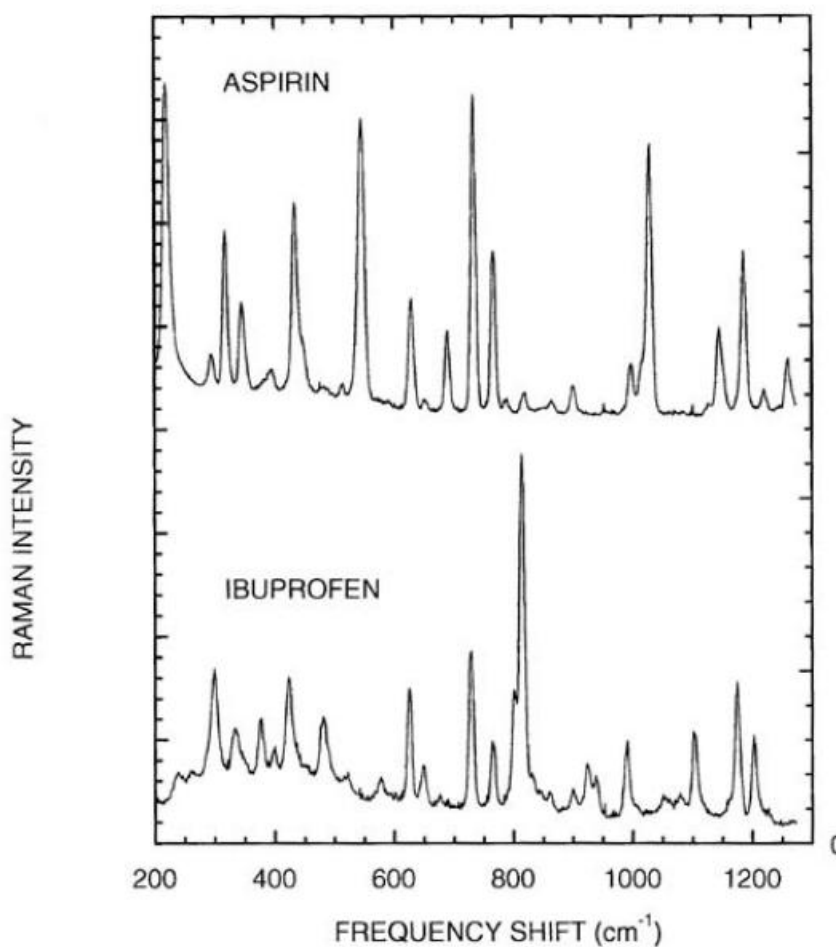
Obr. 6 – Srovnání Ramanových spekter modré metalické barvy, k určení přesného místa kontaktu při nehodě těchto dvou automobilů [19]

5.7 Geologie a mineralogie

- RS je praktický průzkumný nástroj pro studování geologických materiálů. Umožňuje rychlé a spolehlivé potvrzení, že se opravdu jedná o uvedenou horninu, například k ověření pravosti drahokamů. Chemické informace mohou být získány bez těžebních procedur nebo příprav vzorku. Navíc, analýza může být provedena přímo na místě nálezů. Ramanovo snímkování je také užitečné ke studování různorodých vzorků s uplatněním v mnoha vědních oborech zkoumajících naši planetu jako: mineralogie, petrologie, geologie, geoarcheologie, paleontologie, vulkanologie atd. Těmito prostředky můžeme dosáhnout lepšího porozumění vývoje a historie Země. [20]

5.8 Farmaceutický průmysl

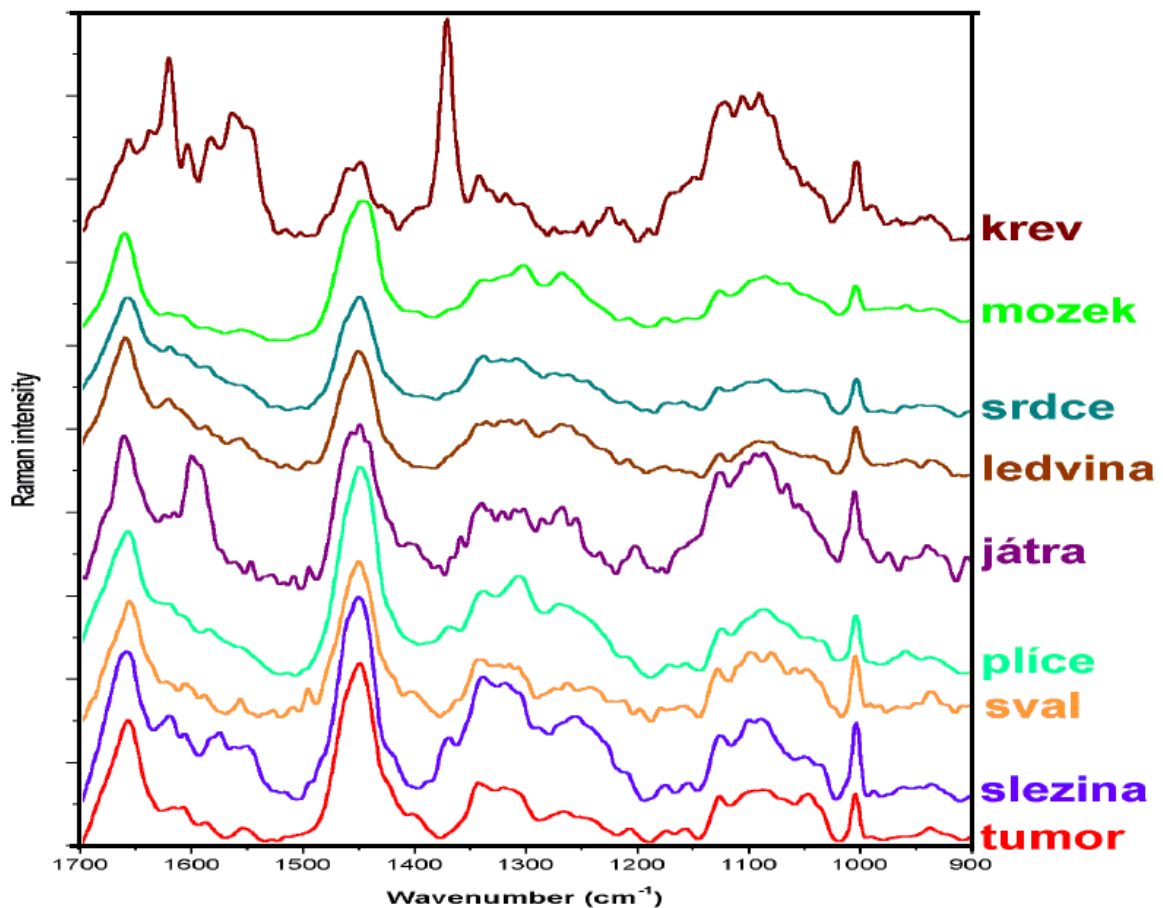
- RS poskytl přesnou charakteristiku různých polymorfních forem farmaceutických sloučenin a schopnost získat spektra vzorku bez příprav, které by mohly vzorek změnit.
- Detekce a identifikace polymorfů důležitých pro snadnost výroby, účinnost a stabilitu konečného složení. Tato analytická identifikace je nedílnou součástí patentové ochrany.
- Ověření totožnosti surovin. Absence potřeby pro přípravu vzorků a krátké časy spektrální akvizice činí Ramanovu spektroskopii vhodnou zejména pro velmi výkonnou verifikaci identity surovin. Zařízení pro záznam spektra přes opticky průhledné nádoby dává možnost k testování materiálů bez otevření jejich obalů nebo za pochodu, jak jsou zapracovány do výrobní linky. [21]



Obr. 7 – Ramanovo spektrum pro Aspirin a Ibuprofen [18]

5.9 Lékařství, biologie

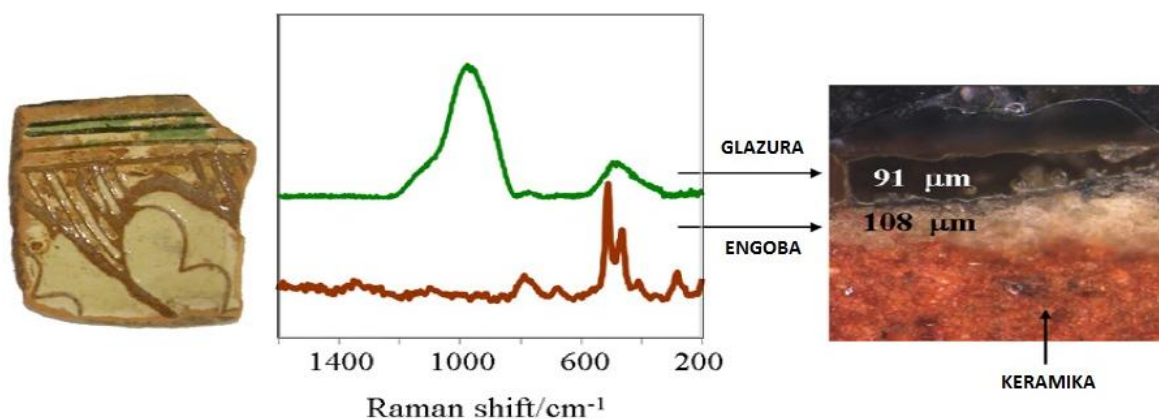
- Ramanova spektroskopie velmi přispěla k podrobné analýze buněk. Moderní metody umožnily analýzu buněk in vivo bez nutnosti ustalovacích prostředků, čímž poskytly velmi podrobnou analýzu buněk v jejich přirozeném stavu. Takový analytický potenciál byl dobře využit, nejen při vyplňování spektrální mapy, ale také pro sledování změn v průběhu času u mnoha odrůd buněk, včetně bakterií a eukaryot. Ramanova spektroskopie byla například použita ke sledování bakterií v pitné vodě. [22]
- Analýza DNA, prognózy a diagnózy karcinomu, studium biologických systémů, atd. [15]



Obr. 8 - Ramanova spektra tkání [23]

5.10 Umění, kulturní dědictví

- Ramanova spektroskopie umožňuje datovat původ uměleckých děl a ověřovat jejich pravost. V některých případech můžeme dokonce určit pravděpodobné místo původu barviva či starověké metody jeho přípravy. Díky tomu je také možné rozvíjet nové hypotézy o umělcově stylu práce. [24]
- Přestože studie památkových objektů pomocí Ramanovy spektroskopie jsou zatím v počáteční fázi, už nyní se prokázaly být užitečné pro zkoumání pigmentů v nástěnných malbách a ikonách, stejně jako pro glazovanou keramiku. V souvislosti s analýzou pigmentů, bylo zjištěno, že se dají rozlišit pigmenty používané v 17. a 19. století pro nástěnné malby a ikony. Lze také určit, zda pro tvorbu těchto maleb, či ikon, byly použity tradiční anorganická, nebo také novější, syntetická, barviva. Dále bylo zjištěno, že studované Byzantské keramické glazury, nalezené na území dnešní Makedonie, byly vypáleny při dvou výrobních teplotách. Na výrobu většiny z nich byla použita teplota pod 700°C, ale našly se také exempláře, vypálené teplotou kolem 800°C. Tyto výsledky se shodují s podobnými studiemi Byzantské keramiky z 6. až 11. století, nalezené na území Turecka. [25]



Obr. 9 – Keramický vzorek, odpovídající Ramanovo spektrum a jeho průřez [25]

II. PRAKTICKÁ ČÁST

6 PŘEHLED DATABÁZÍ RAMANOVÝCH SPEKTER

Na internetu je možné se setkat s databázemi nejen volně přístupnými, ale i s databázemi, které mají nějakým způsobem omezený vstup, ať už se jedná o vstup podmíněný registrací, či dokonce zpoplatněný. V mém průzkumu jsem se zaměřil na databáze volně přístupné. Jedná se převážně o knihovny spekter minerálů, pigmentů, olejů, anorganických látek a v menší míře i látek organických. Spektra jsou nejčastěji k dispozici v grafické formě, např. ve formátu pdf, nebo ve formátu pro ukládání spektroskopických dat, např. spc. Některé databáze ale umožňují stáhnout data zpracovaná i jako text, např. ve formátu txt.

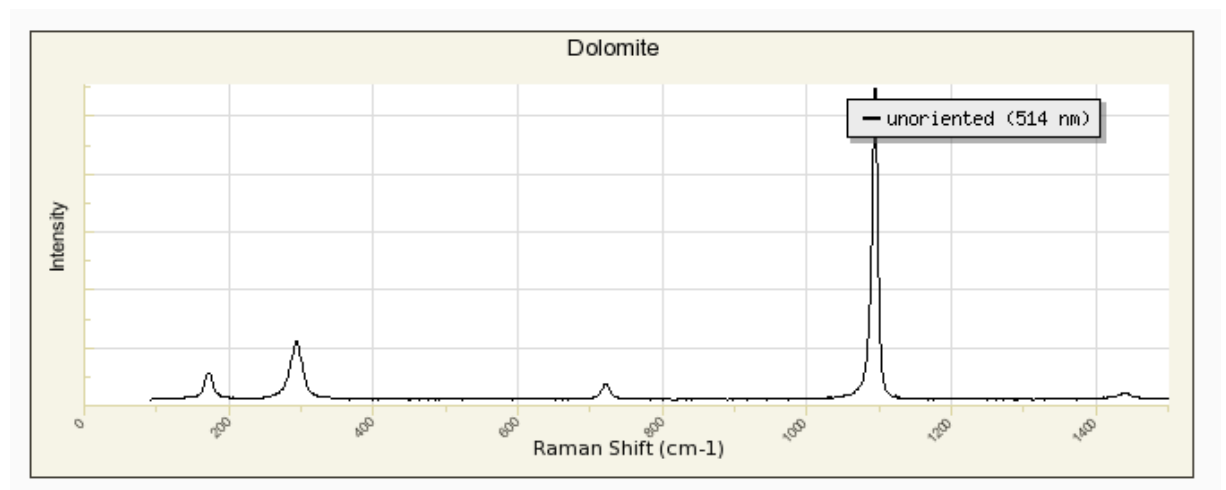
Databáze Ramanových spekter nám umožňují naměřená spektra porovnávat, či s jejich pomocí identifikovat neznámou analyzovanou látku. Zvláštní formou databáze spekter, jsou knihovny publikované v tištěné podobě. Takové databáze obsahují textový zápis naměřených peaků s popisem a případně i s doplňujícím grafem – viz kapitola 6.13. Celkový počet volně dostupných spekter se pohybuje v řádech tisíců.

K porovnávání spekter a identifikaci látek, slouží specializované programy, např. program Spectral ID 3.2. Software pro práci se spektrální databází nám nejen umožní vytvářet vlastní knihovny spekter, ale také často obsahuje databáze výrobcem softwaru už vytvořené. V těchto databázích poté můžeme vyhledávat, porovnávat a identifikovat spektrum naměřené látky.

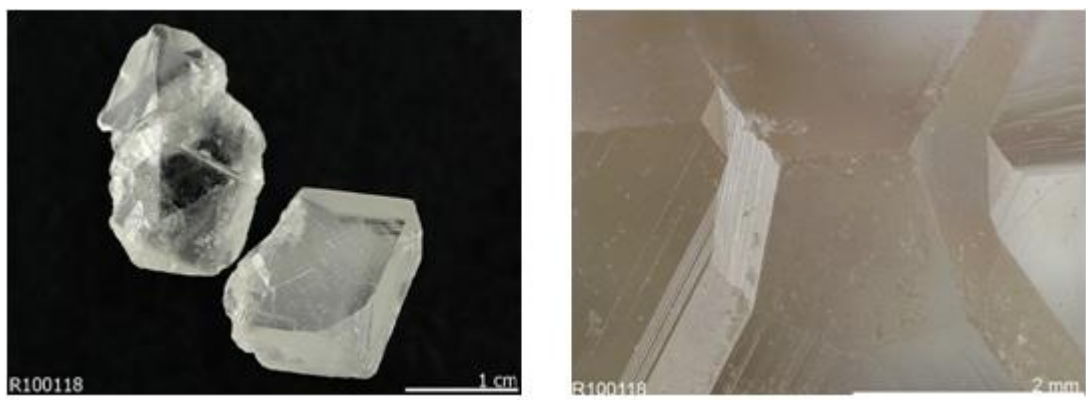
Volně přístupné databáze spekter:

6.1 RRUFF [26]

- databáze více jak 3375 spekter minerálů z celého světa
- umožňuje stáhnout zpracovaná i nezpracovaná data naměřeného spektra v textové podobě
- umožňuje další práci s grafem, např. zvětšení určité oblasti
- je-li dostupný, poskytuje náhled na měřený vzorek a informace o místě původu
- možnost vyhledávání



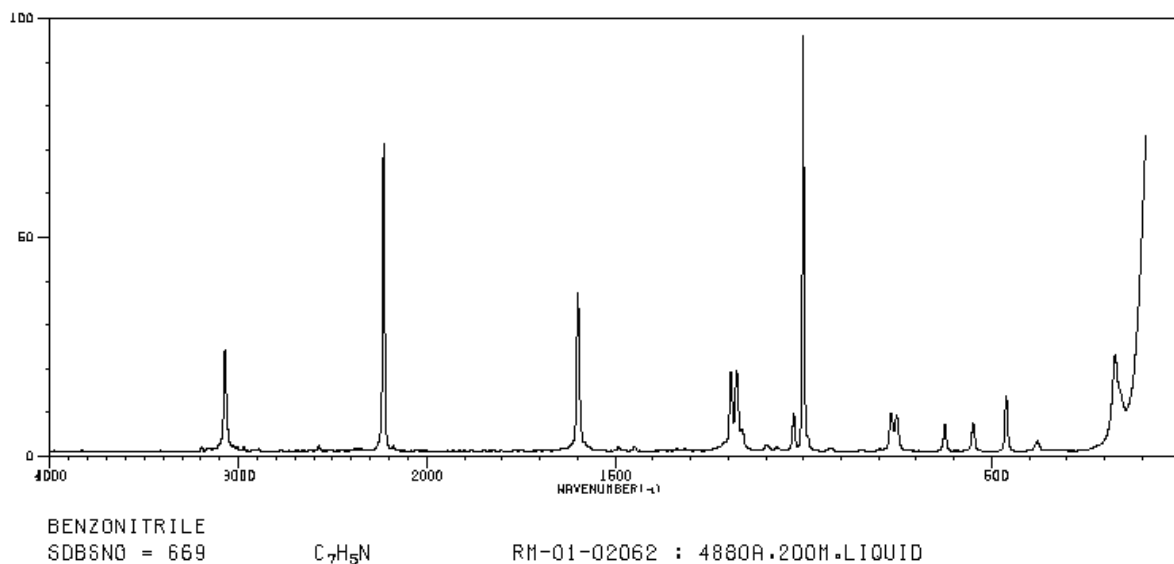
Obr. 10 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze RRUFF [26]



Obr. 11 – Náhled měřeného vzorku z databáze RRUFF [26]

6.2 SDBS [27]

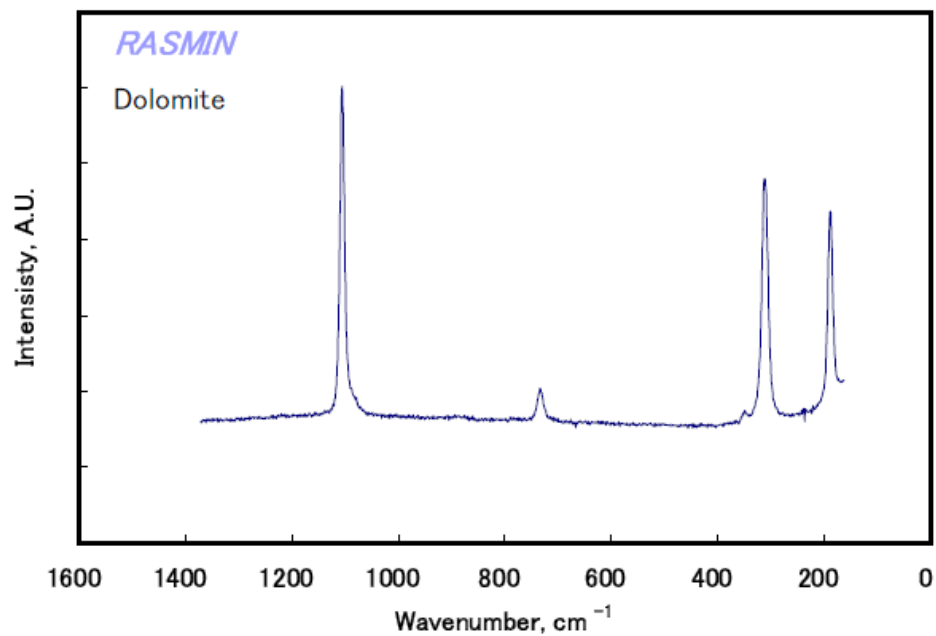
- stále se rozšiřující databáze organických sloučenin obsahující více jak 3500 spekter tekutých, práškových a zrnitých vzorků
- poskytují detailní chemické informace o měřeném vzorku
- měřená oblast $0-4000\text{ cm}^{-1}$, s excitační vlnovou délkou 4800nm
- neumožňuje další práci s grafem, stáhnutí naměřených dat v textové podobě ani nezobrazuje popisy peaků
- možnost vyhledávání



Obr. 12 – Ramanovo spektrum Benzonitrilu z databáze SDBS [27]

6.3 RASMIN [28]

- databáze minerálů (576 spekter) a anorganických látek (1022 spekter)
- spektra ve formátu pdf
- je-li k dispozici, poskytuje náhled na měřený vzorek
- umožňuje vyhledávání
- Ar+ Laser 514.5 nm, 300 mW



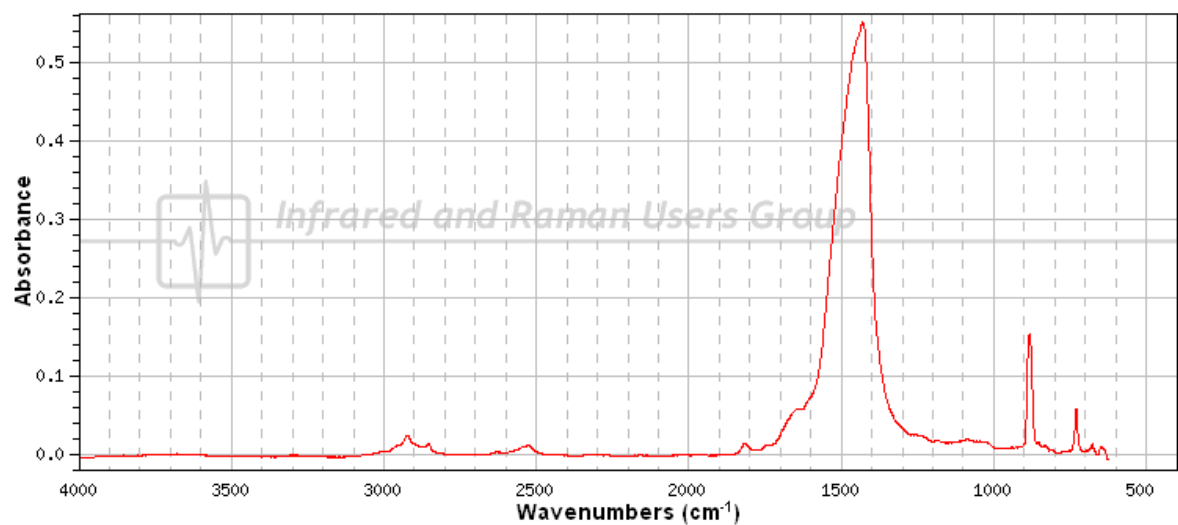
Obr. 13 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze RASMIN [28]



Obr. 14 – Náhled měřeného vzorku z databáze RASMIN [28]

6.4 IRUG [29]

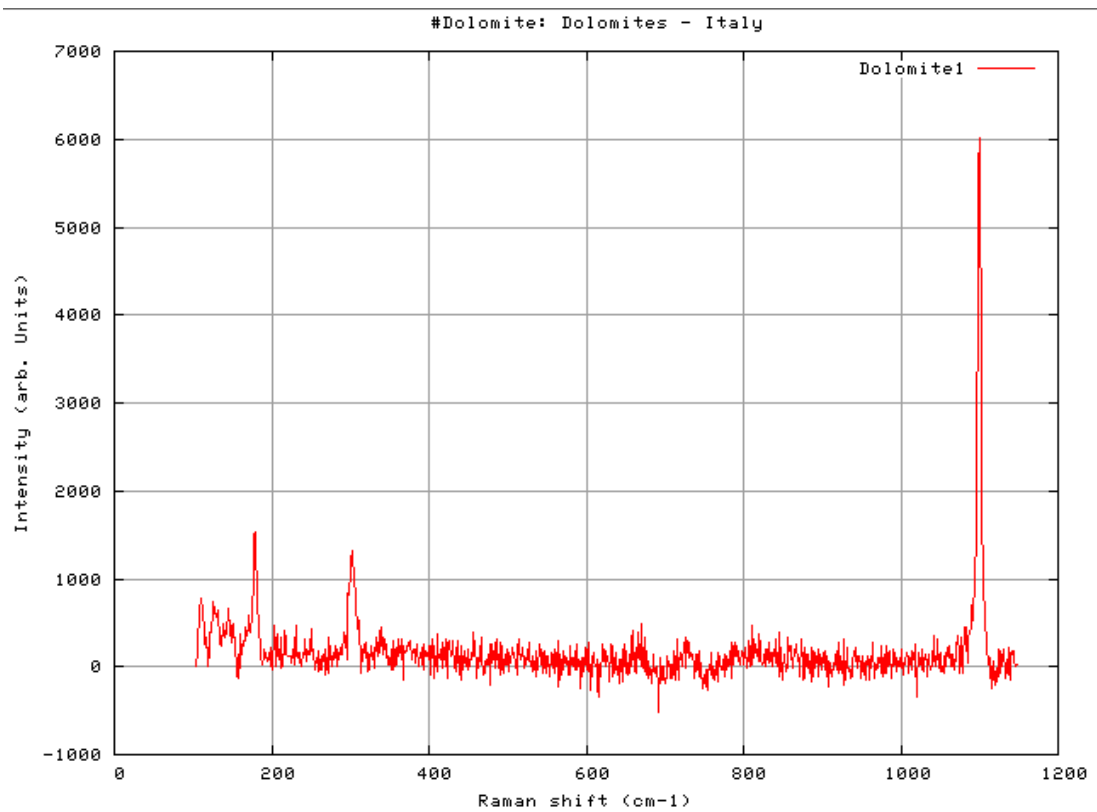
- spektrální databáze IRUG v současné době obsahuje přes 1250 spekter olejů, vosků, přírodních a syntetických pryskyřic, barviv, pigmentů, bílkovin, gum a minerálních látek
- umožňuje vyhledávání
- je-li dostupná, poskytuje informaci o místě původu vzorku



Obr. 15 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze IRUG [29]

6.5 Raman Database – University of Parma [30]

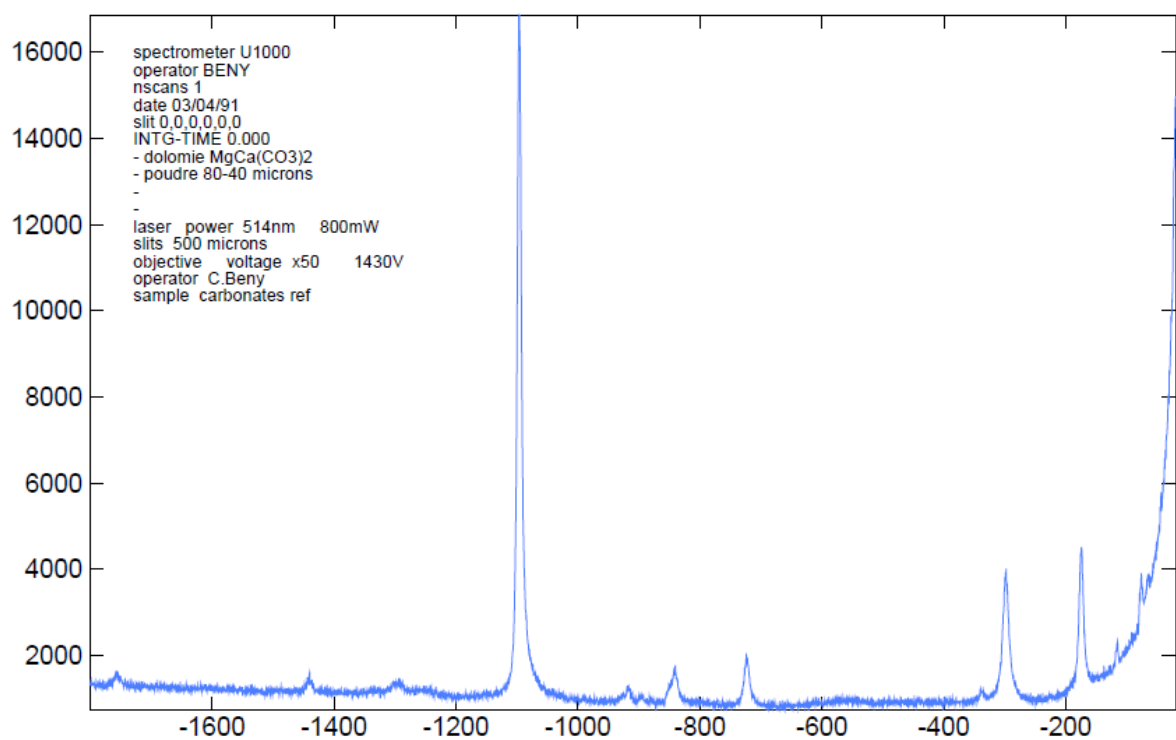
- Ramanova spektra minerálů
- umožňuje stáhnout data v textovém formátu
- neumožňuje vyhledávání, práci s grafem ale poskytuje informace o místě původu vzorku



Obr. 16 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze University of Parma [30]

6.6 SFMC [31]

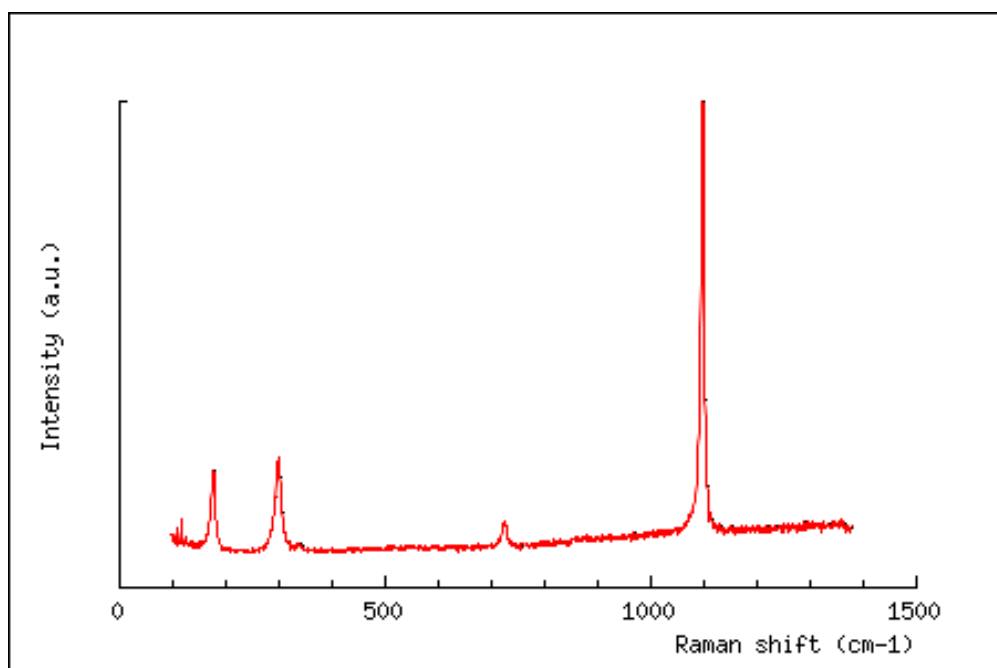
- kombinovaná databáze minerálů a chemikálií
- přes 500 spekter ve formě pdf i s popisem peaků
- neumožňuje vyhledávání ani práci s grafem
- poskytují data v textovém formátu ke stažení
- graf obsahuje podrobný zápis z měření



Obr. 17 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze SFMC [31]

6.7 ENS de Lyon [32]

- databáze spekter nejvýznamnějších minerálních skupin
- umožňuje vyhledávání
- spektra ve formátu pdf
- poskytují data v textovém formátu ke stažení
- neumožňuje práci s grafem



Obr. 18 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze ENS de Lyon [32]

6.8 Dipartimento di Scienze della Terra in Siena [33]

- databáze minerálů, kapalných látek, drahokamů, pigmentů a skla
- neumožňuje práci s grafem
- umožňuje vyhledávání
- poskytuje detailní informace o měřeném vzorku

Raman Spectra Dolomite3

Locality **Dabre Mountains**

Lambda (nm) **514**

Accumulation time (sec) **0**

Direction Polar. **NS**

Fundamental vibration (cm-1) **1097**

Spectral range min (cm-1) **100**

Notes **CaMg(CO₃)₂ - (B.Ghiribelli)**

Comments

Operator **fluid lab - Siena**

Power (mW) **0**

Accumulation number **0**

Crystal (P)owder or (S)ection **S**

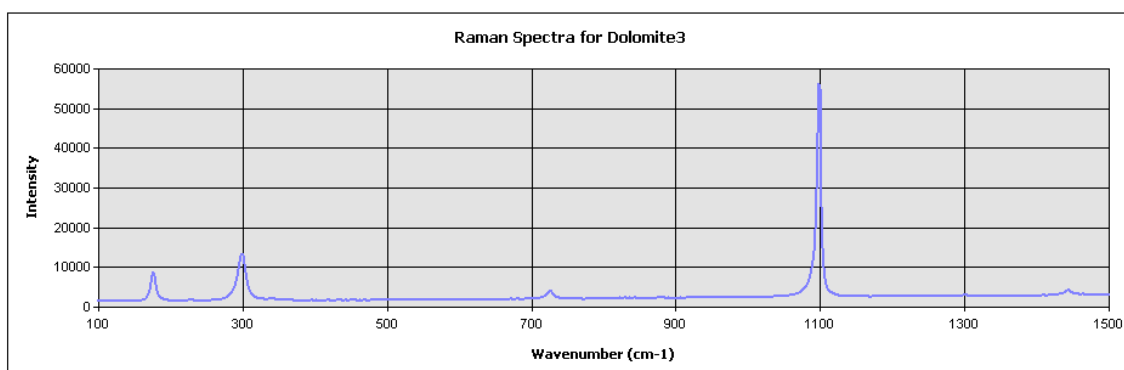
Fundamental vibration (cm-1) **299**

Spectral range max (cm-1) **1500**

Objective **50**

Fundamental vibration (cm-1) **176**

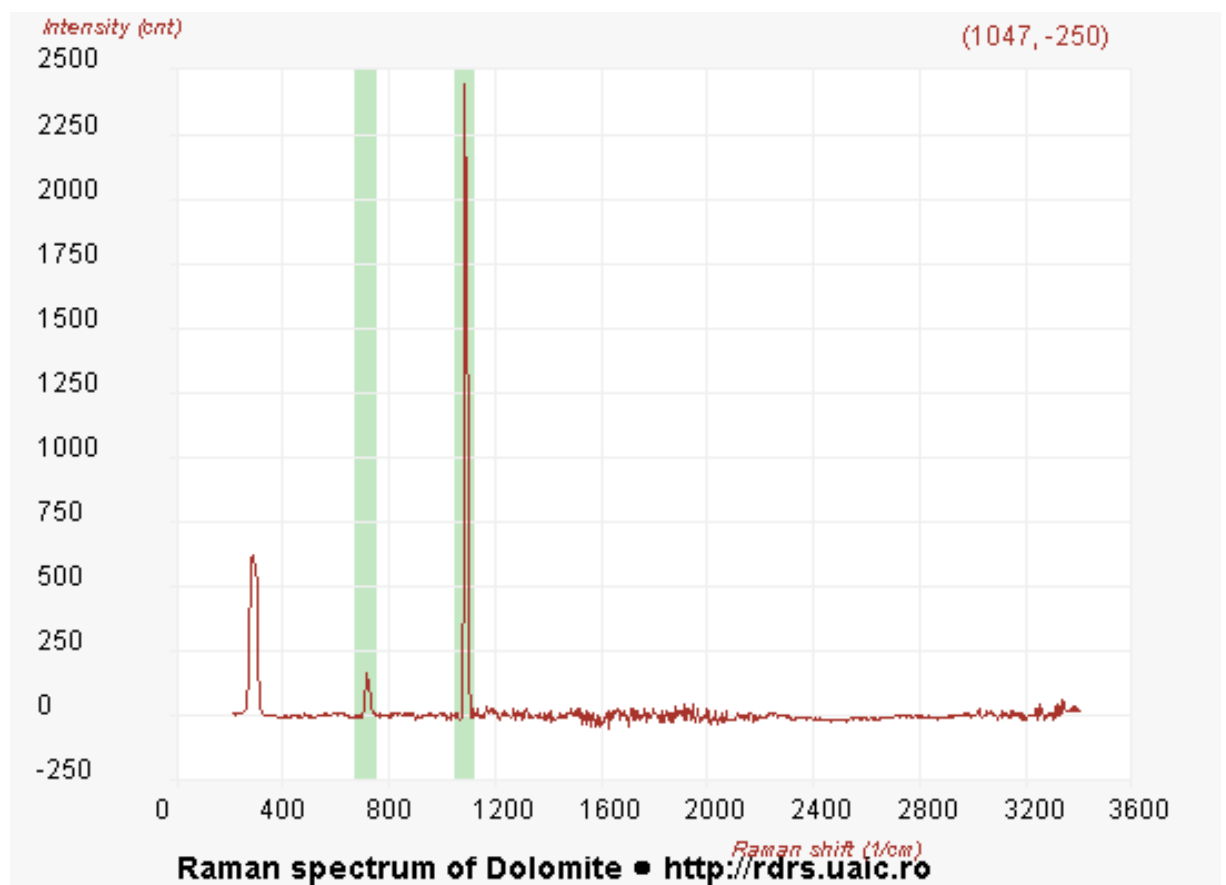
Accuracy **1,5**



Obr. 19 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze DST in Siena [33]

6.9 RDRS [34]

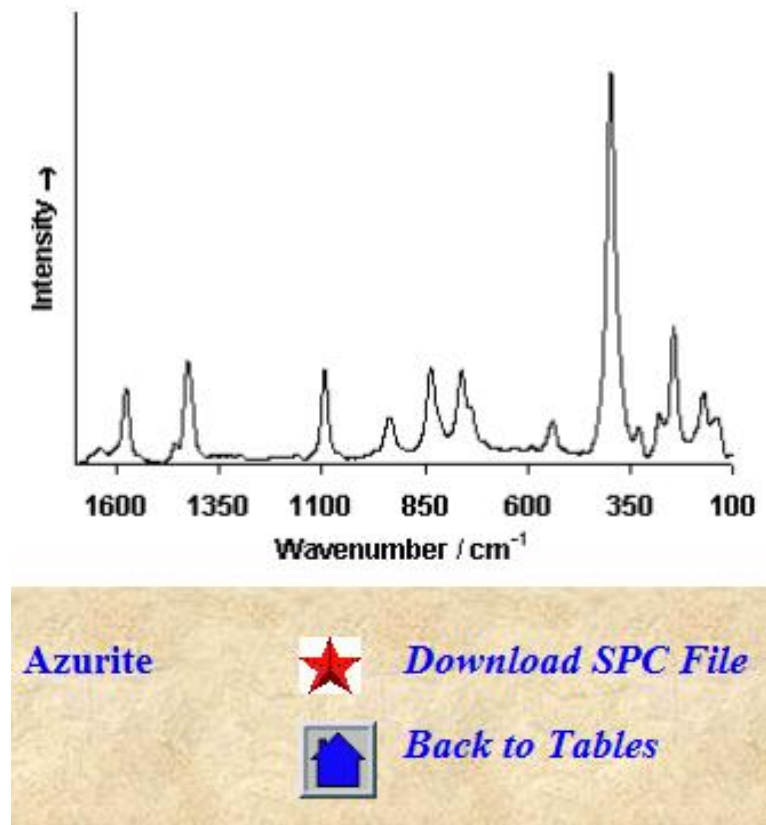
- databáze obsahuje 67 spekter přírodních a syntetických minerálů a 46 spekter pigmentů
- umožňuje stáhnutí dat v textovém formátu, jsou-li k dispozici
- umožňuje práci s grafem
- poskytuje informace o měřeném vzorku



Obr. 20 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze RDRS [34]

6.10 Raman Spectroscopic Library - UCL Chemistry [35]

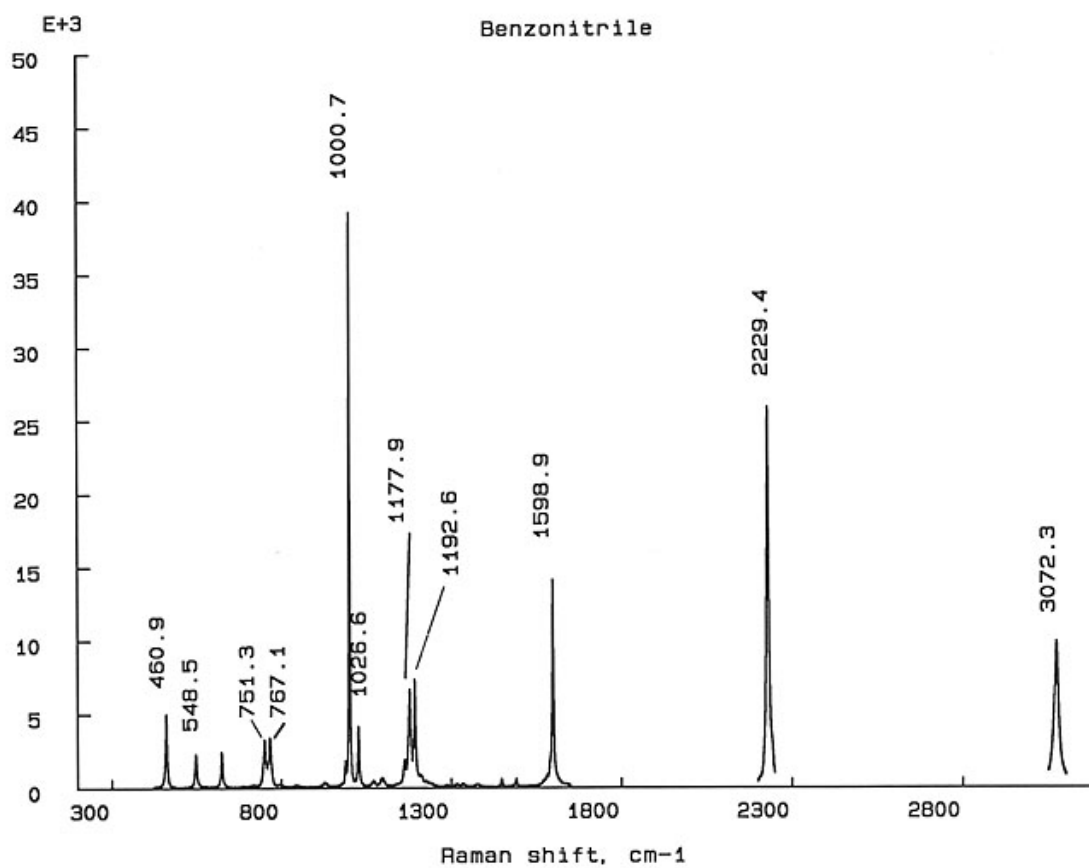
- databáze Ramanových spekter přírodních a syntetických pigmentů
- umožňuje stáhnutí dat ve formátu SPC
- neumožňuje vyhledávání ani práci s grafem



Obr. 21 – Ramanovo spektrum Azuritu z databáze UCL Chemistry [35]

6.11 McCreery research group [36]

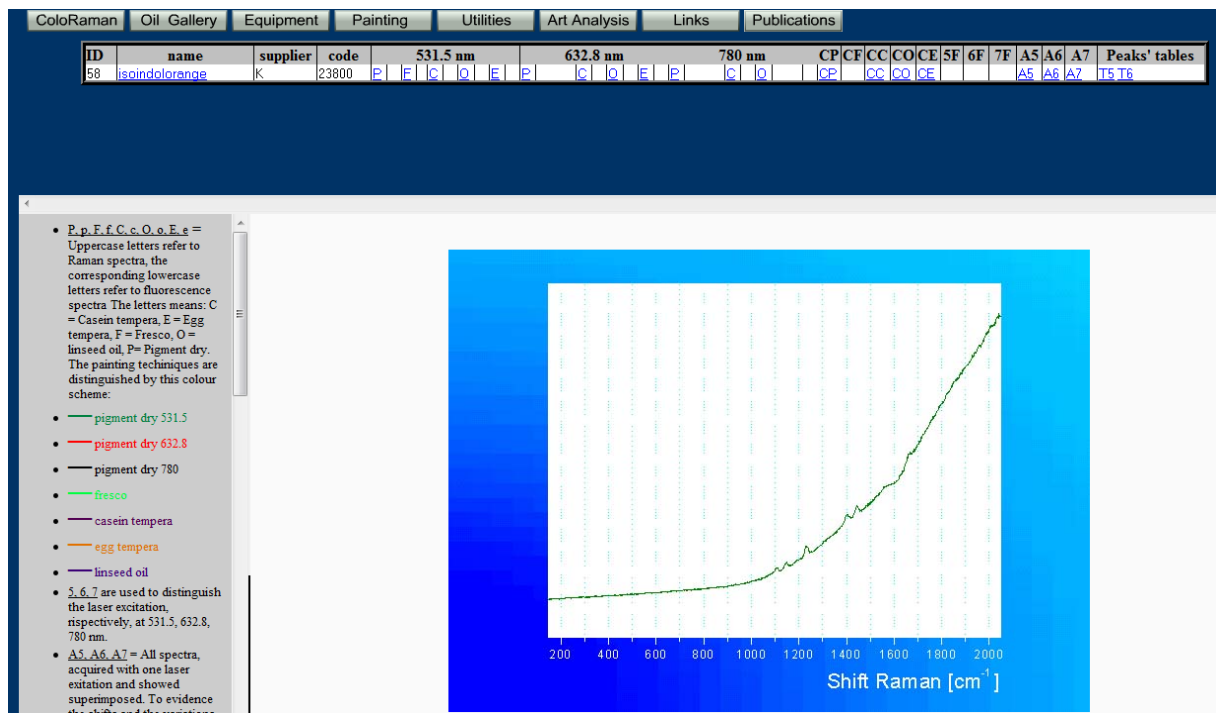
- databáze osmi organických sloučenin
- spektra pro naphthalene, benzene, toluene, sulfur, acetamidophenol, benzonitrile, cyclohexane, polystyrene
- neumožňuje práci s grafem
- graf obsahuje popis peaků
- poskytuje informace z měření



Obr. 22 – Ramanovo spektrum Benzonitrilu z databáze McCreery Group [36]

6.12 Sicilae Studium Generale [37]

- databáze Ramanových a fluorescenčních spekter, získaných pomocí tří různých excitačních vlnových délek (531,5, 632,8, 780 nm), z 99 analyzovaných, vysušených pigmentů, které byly aplikovány jednou ze čtyř malířských technik (egg tempera, casein tempera, oil a fresco)
- databáze umožňuje snadno určit nejvhodnější excitační vlnové délky pro identifikaci pigmentů použitých těmito malířskými metodami
- neumožňuje vyhledávání ani práci s grafem



Obr. 23 - Zobrazení spektra pigmentu isoindolo orange, použitým Fresco technikou a měřeném laserem s vlnovou délkou 531.5 nm [37]

The screenshot shows the ColoRaman project website. At the top, there are navigation tabs: ColoRaman, Oil Gallery, Equipment, Painting, Utilities, Art Analysis, Links, and Publications. Below these is a grid of pigment color swatches, each with a label and a corresponding color. The labels include PB 15:3 (phthalocyanine blue), PR 27 (Prussian blue), PR 29 (ultramarine blue), PB 30 (azurite), PB 31 (Egyptian blue), PB 32 (smalt), PB 35 (cerulean blue), PBk 6 (lamp black), PBk 8 (vine black), PBk 9 (bone black), PBk 10 (graphite), PBk 26 (spinel black), PBk 11 (Mars black), and NBk 6 (asphaltum). Other labels include PBr 7 (burnt Sienna), PBr 9 (sepia), PBr 24 (titanium orange), PG 7 (phthalocyanine green), PG 17 (chromium oxide green), PG 18 (cicidian), PG 19 (cobalt green), PG 20 (verdigris), PG 23 (green earth), and PG 50 (cobalt teal). Further down, there are labels for PO 20 (cadmium orange), PO 60 (benzimidazolone orange), PO 61 (isoindolo orange), PO 73 (pyrrole orange), PR 88 (thioindigo violet), PR 101 (Synthetic iron oxide), PR 102 (Natural iron oxide), PR 106 (vermillion), PR 108 (cadmium red), PR 122 (quinacridone magenta), and PR 168 (brominated anthraquinone).

On the left side, there is a navigation menu with buttons for: Homepage, Didattica, Attività, Strumentazione, Pubblicazioni, Servizi, Collaborazioni, Contatti, Links, and Raman. Below the menu is a small image of a painting and a 'ShinySteel' logo.

In the center, there is a text box titled 'ColoRaman project' with the following text: 'An on-line database has been compiled providing the Raman and fluorescence spectra, obtained using three different excitation wavelengths (531.5, 632.8, 780 nm) of 99 pigments analysed dry and already applied with four painting technique (egg tempera, casein tempera, oil and fresco). The database makes it possible to easily determine the most suitable excitation wavelength for the identification of pigments already applied with these painting technique. The binding agents and ground material, almost always of organic origin, are responsible for a fluorescence which in many cases is so intense that it covers the weak Raman signal emitted by the pigment, making it impossible to identify the latter. In many cases, however, it is possible to improve the signal-noise ratio (noise here consisting of the emission of fluorescence) by adopting an appropriate excitation wavelength. This wavelength will depend on the pigment and on the painting technique used because the different materials employed to produce binding agents and grounds can contribute in different ways to mask the Raman signal. The pigments were used in the laboratory according to documented recipes. It was then possible to perform measurements on a specimen produced using specifically selected materials and techniques. See recipes and products for the four painting techniques in the "Painting" site section.'

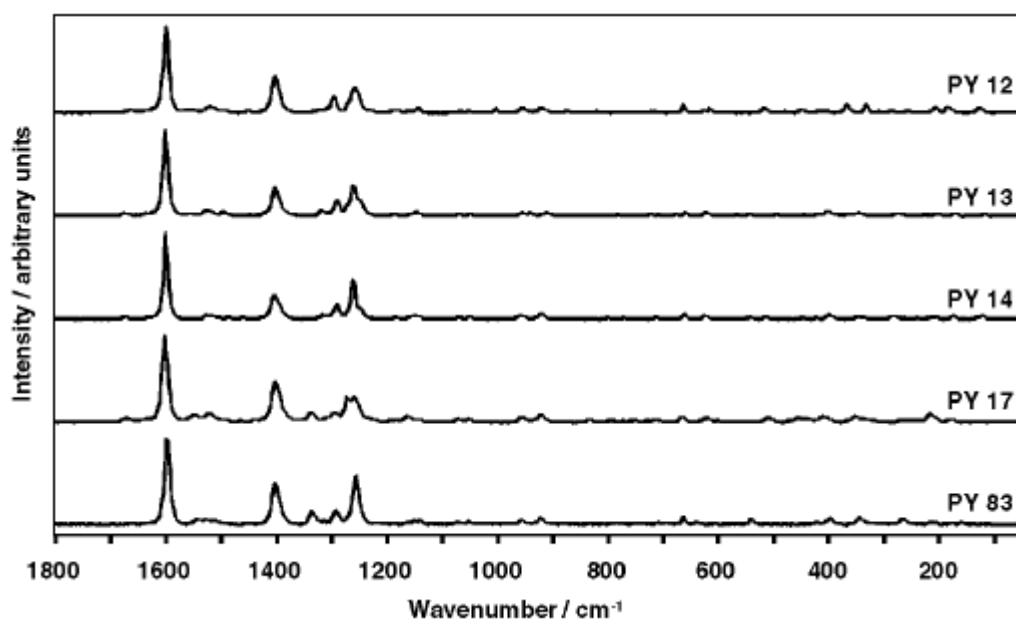
Obr. 24 – Zobrazení výběru pigmentu [37]

6.13 Tištěné databáze

- zvláštní forma spektrálních knihoven
- tištěné databáze poskytují seznam peaků s jejich popisem
- mohou obsahovat i grafy naměřených spekter
- většinou tematicky zaměřené

Tab. 2 – Ukázka tištěné databáze [38]

CI name	Supplier	Raman band wavenumbers $\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$ (between 1800 and 50 cm^{-1})
PY 12	SunChemicals	1661(vw), 1597(vs), 1554(vw), 1517(vw), 1490(vw), 1449(vw), 1399(m), 1320(vw), 1294(w), 1255(w), 1228(vw), 1179(vw), 1140(vw), 1065(vw), 1050(vw), 1001(vw), 952(vw), 917(vw), 871(vw), 817(vw), 718(vw), 661(vw), 623(vw), 613(vw), 515(vw), 475(vw), 449(vw), 407(vw), 365(vw), 330(vw), 308(vw), 284(vw), 256(vw), 204(vw), 183(vw), 125(vw)
PY 13	SunChemicals	1673(vw), 1598(vs), 1553(vw), 1522(vw), 1491(vw), 1448(vw), 1399(m-w), 1315(vw), 1287(w), 1258(m-w), 1248(w,sh), 1183(vw), 1144(vw), 1067(vw), 1049(vw), 953(vw), 938(vw), 907(vw), 874(vw), 829(vw), 780(vw), 720(vw), 707(vw), 674(vw), 658(vw), 620(vw), 564(vw), 541(vw), 492(vw), 443(vw), 420(vw), 398(vw), 345(vw), 272(vw), 225(vw), 199(vw), 171(vw), 114(vw)
PY 14	SunChemicals	1670(vw), 1597(vs), 1557(vw), 1524(vw), 1481(vw), 1458(vw), 1400(w), 1313(vw), 1287(w), 1258(m), 1180(vw), 1145(vw), 1068(vw), 1049(vw), 954(vw), 918(vw), 798(vw), 769(vw), 709(vw), 659(vw), 623(vw), 539(vw), 512(vw), 477(vw), 444(vw), 422(vw), 396(vw), 344(vw), 280(vw), 203(vw), 172(vw), 120(vw)
PY 17	SunChemicals	1668(vw), 1599(vs), 1546(vw), 1518(vw), 1489(vw), 1461(vw), 1436(vw), 1399(m), 1334(vw), 1292(vw), 1268(w), 1256(w), 1183(vw), 1162(vw), 1067(vw), 1049(vw), 953(vw), 918(vw), 832(vw), 794(vw), 712(vw), 665(vw), 618(vw), 508(vw), 453(vw), 409(vw), 349(vw), 268(vw), 215(vw), 176(vw), 124(vw)
PY 83	Schmincke, SunChemicals	1659(vw), 1595(vs), 1540(vw), 1523(vw), 1511(vw), 1449(vw), 1399(m), 1333(w), 1289(w), 1253(m), 1218(vw), 1148(vw), 1136(vw), 1067(vw), 1049(vw), 956(vw), 920(vw), 692(vw), 661(vw), 638(vw), 538(vw), 421(vw), 394(vw), 342(vw), 265(vw), 211(vw), 176(vw), 158(vw)



Obr. 25 – Ramanova spektra sloučenin z Tab. 2 [38]

Kompletní databáze s popisky a vysvětlivky k Tab. 2 a Obr. 25 jsou uvedeny v Příloze II. Tištěná databáze Ramanových spekter farmaceutických pomocných látek je v Příloze III.

Tab. 3 – Přehled informací o databázích 1/2

Databáze	RRUFF	SDBS	RASMIN	IRUG	U. of Parma	SFMC
Většinové množství látek	M	O	M, A	M, P	M	M, C
Vyhledávání v databázi	Ano	Ano	Ano	Ano	Ne	Ne
Práce s grafem	Ano	Ne	Ne	Ne	Ne	Ne
Informace o vzorku	Ano	Ano	Ano	Ne	Ano	Ne
Download dat	Ano	Ne	Ne	Ne	Ano	Ano
Počet spekter v databázi (cca)	3375	3500	1600	1250	100	500

Tab. 4 – Přehled informací o databázích 2/2

Databáze	ENS de Lyon	T. in Siena	RDRS	UCL Chemistry	McCreery	SSG
Většinové množství látek	M	M, P	M, P	P	O	P
Vyhledávání v databázi	Ano	Ano	Ano	Ne	Ne	Ne
Práce s grafem	Ne	Ne	Ano	Ne	Ne	Ne
Informace o vzorku	Ne	Ano	Ano	Ano	Ne	Ano
Download dat	Ano	Ne	Ano	Ano	Ne	Ne
Počet spekter v databázi	100	/	120	54	8	100

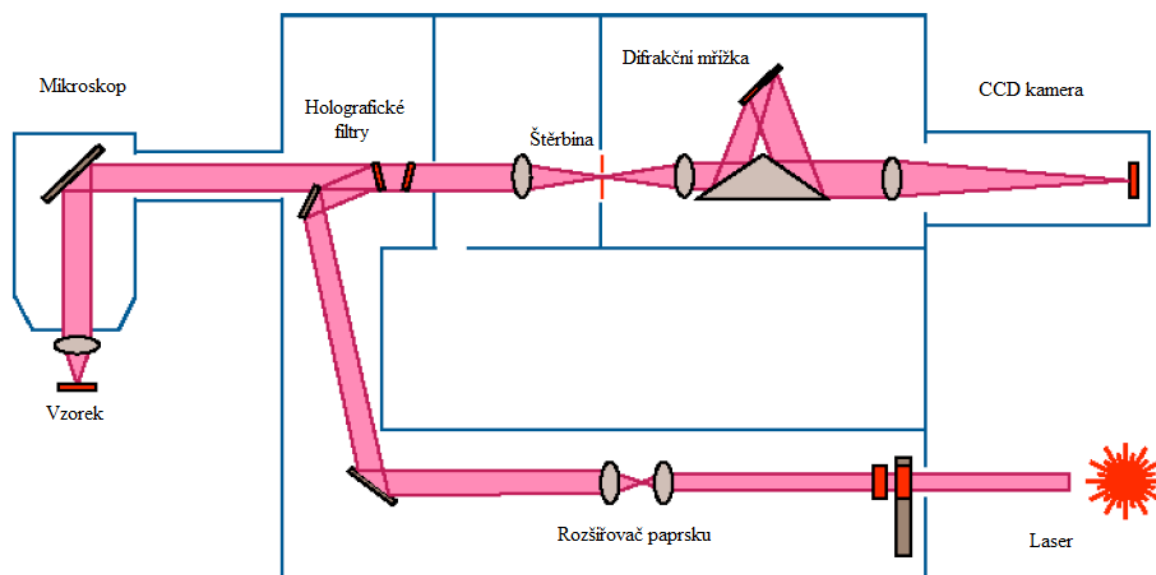
Použité zkratky: M – minerály, O – organické sloučeniny, A – anorganické sloučeniny, P – pigmenty, C - chemikálie

7 VLASTNÍ MĚŘENÍ

K ověření teoretických poznatků k Ramanově spektroskopii a pro srovnání se spektry dostupnými z online databází, jsem provedl vlastní měření čtyř vybraných minerálů.

7.1 Instrumentace

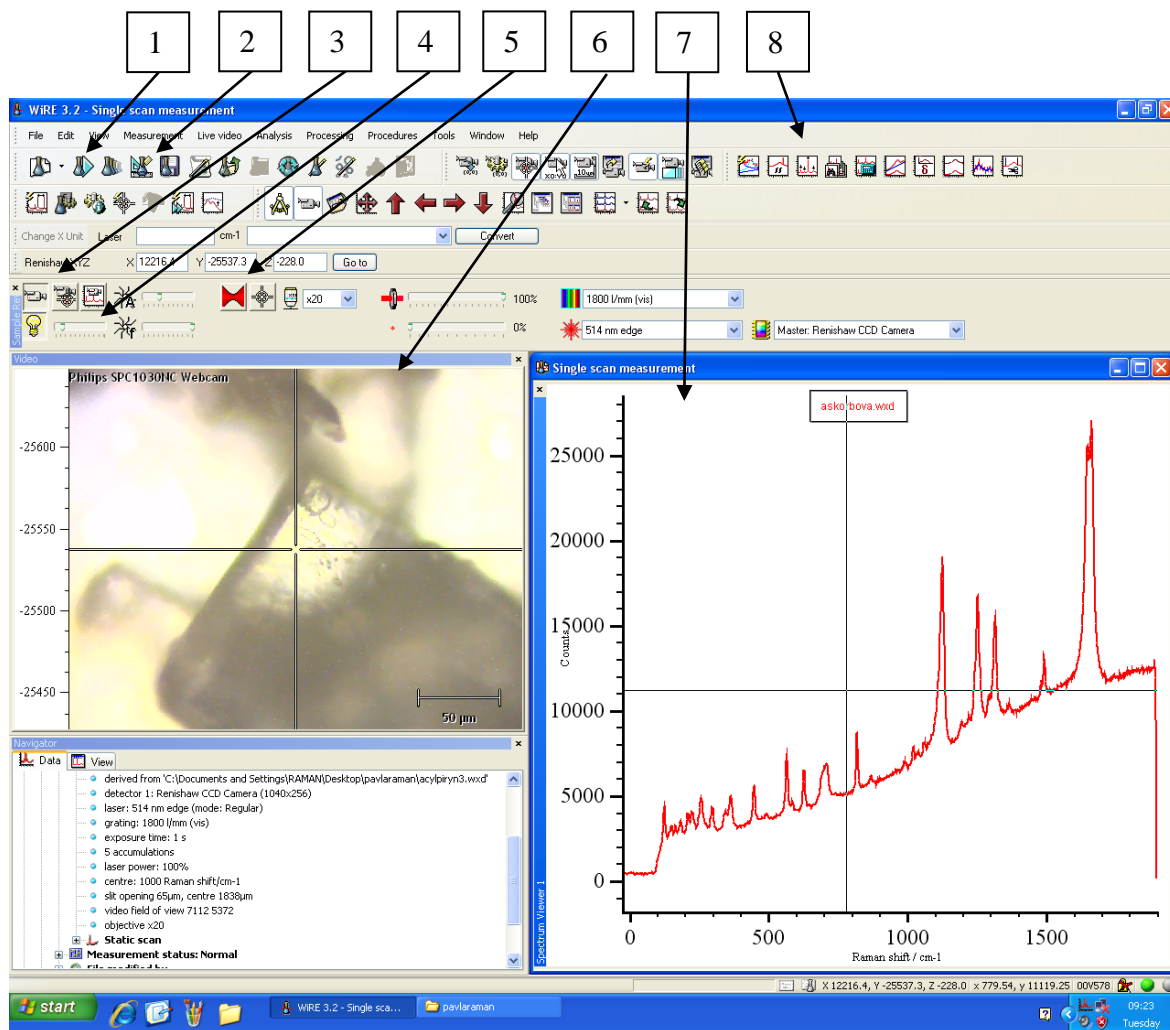
Měření byla provedena na Ramanově spektrometru InVia Basis od firmy Renishaw. Přístroj je vybavený argonovým iontovým laserem s vlnovou délkou 514 nm a maximálním výstupním výkonem 20 mW. Ke spektrometru je připojený konfokální mikroskop Leica (včetně videokamery pro přenesení obrazu do počítače) s objektivy umožňujícími 5x - 50x násobné zvětšení, díky kterému stačí pouze velmi malá množství zkoumaných vzorků. Ramanova spektra je možné získat v rozmezí 0 - 3200 cm^{-1} . Naměřená spektra jsou dále zpracovávána a vyhodnocována pomocí softwaru WiRE 3.2.



Obr. 26 – Schéma spektrometru od firmy Renishaw

7.2 Prostředí programu WiRE 3.2

Program WiRE 3.2 od firmy Renishaw je výkonná softwarová platforma pro manipulaci se všemi formami Ramanových dat. Umožňuje měření Ramanových spekter s náhledem na měřenou látku, mapování vzorku, práci s naměřeným spektrem, archivaci dat a mnoho dalších užitečných funkcí.



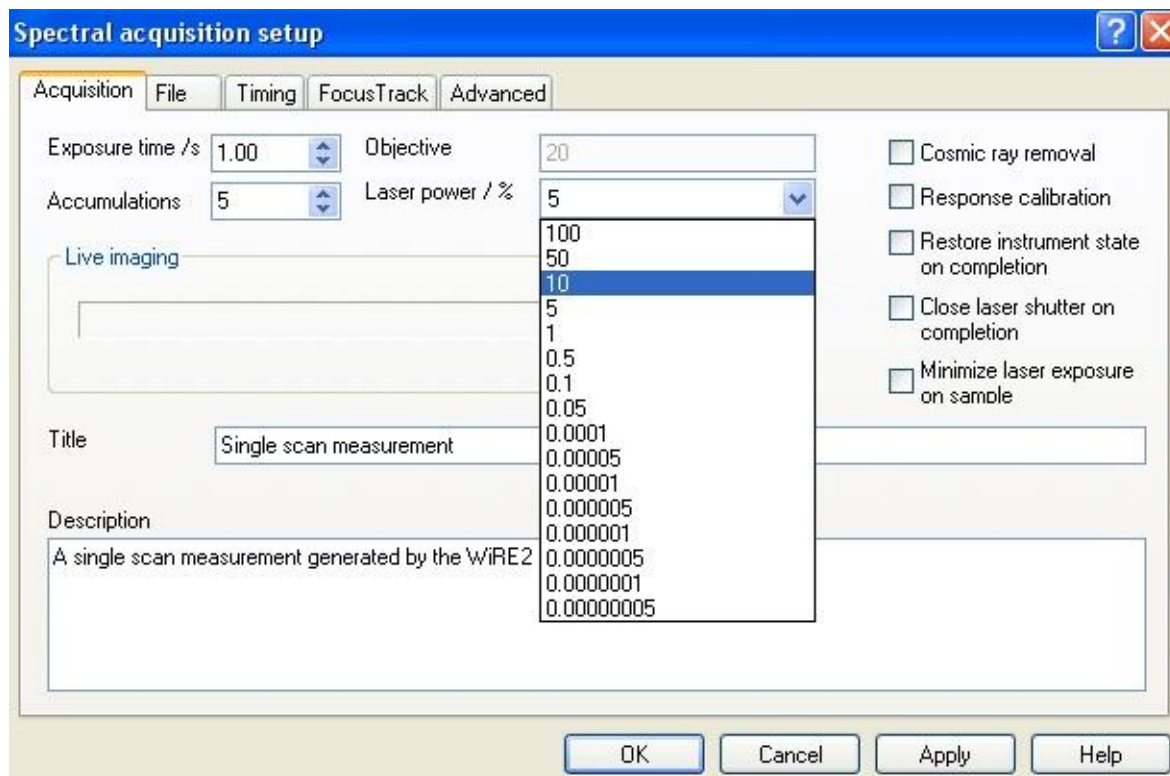
Obr. 27 – Prostředí programu WiRE 3.2

- 1 – Spuštění měření.
- 2 – Nastavení parametrů měření viz Obr. 28.
- 3 – Zapnutí/Vypnutí kamery.
- 4 – Nastavení intenzity osvětlení kamery.
- 5 – Zapnutí/Vypnutí laseru.

6 – Pohled kamerou na měřený vzorek.

7 – Naměřené spektrum.

8 – Nástroje.



Obr. 28 – Nástroj pro nastavení parametrů měření

7.3 Naměřená spektra

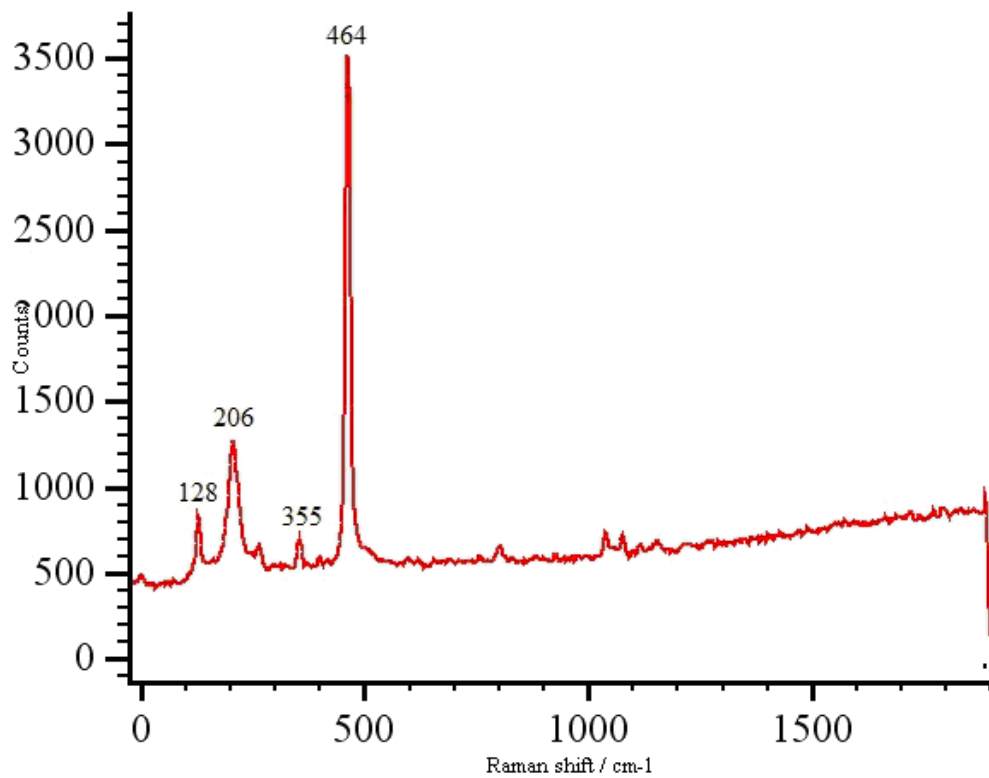
Pro vlastní měření byly vybrány tyto vzorky: Ametyst (SiO_2), Křišťál (SiO_2), Aragonit (CaCO_3) a Uhličitan sodný (Na_2CO_3).

7.3.1 Ametyst

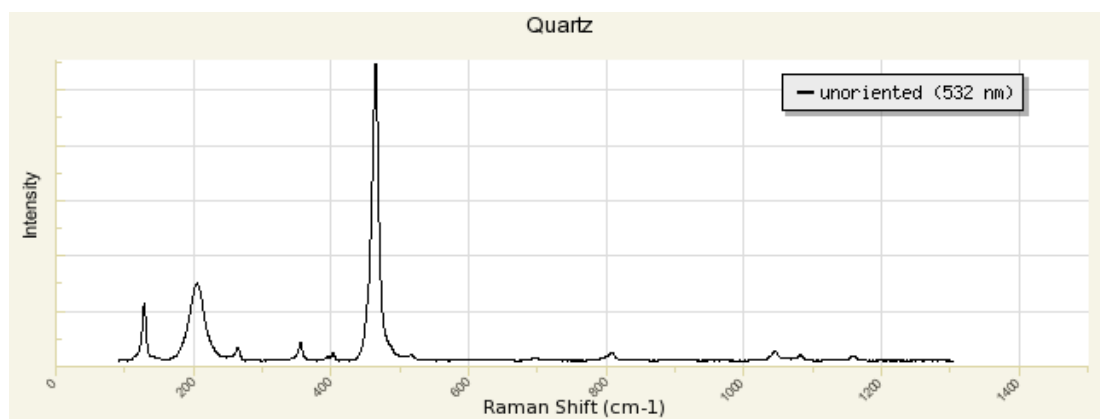
Ametyst je odrůda krystalovaného křemene, většinou zbarvený do fialova a řadí se mezi polodrahokamy. Jeho chemický vzorec je SiO_2 . Měřený vzorek pochází z České Republiky.



Obr. 29 – Měřený Ametyst



Obr. 30 – Naměřené Ramanovo spektrum Ametystu



Obr. 31 – Naměřené spektrum Ametystu z databáze RRUFF [26]

7.3.2 Křišťál

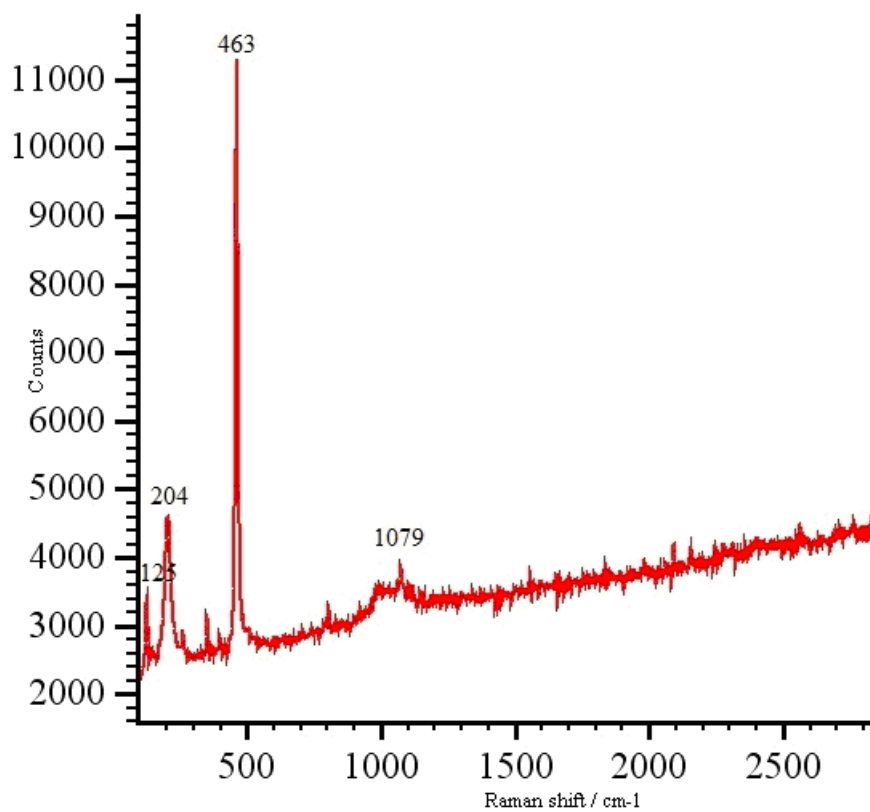
Křišťál je podobně jako Ametyst odrůdou křemene. Většinou ve formě bezbarvých krystalů. Jeho chemický vzorec je také SiO_2 . I tento měřený vzorek pochází z České republiky.



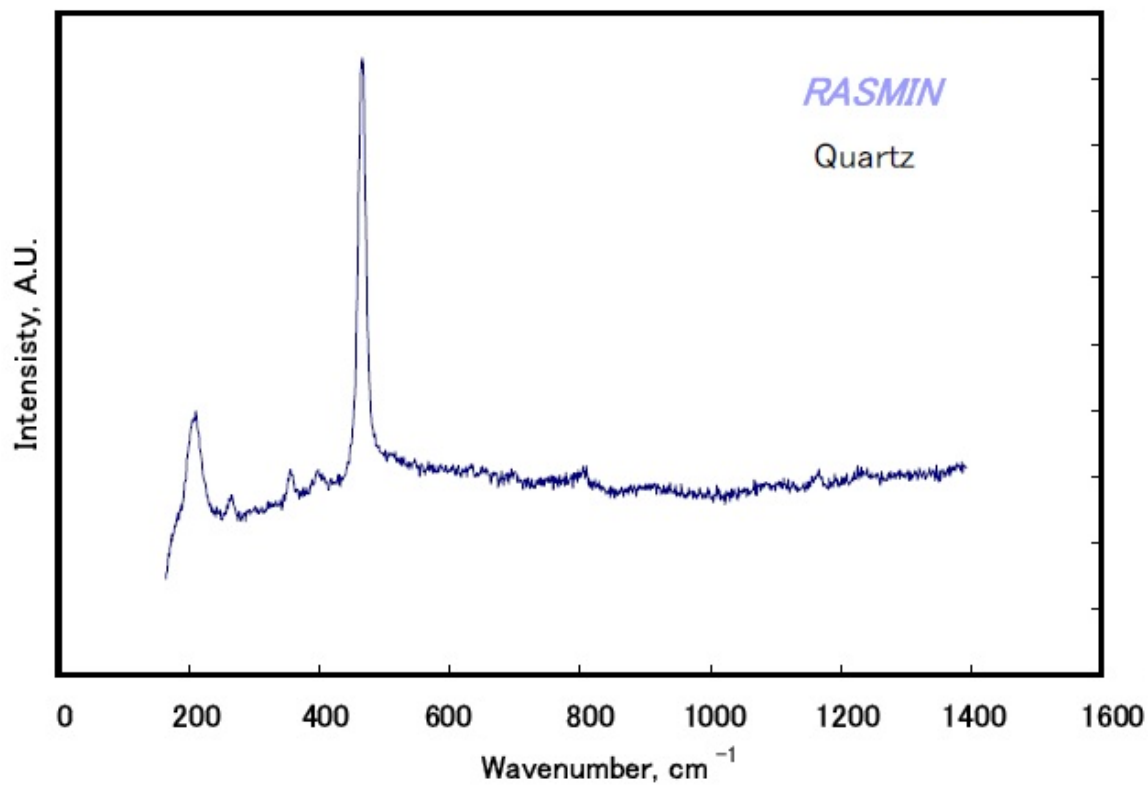
Obr. 32 – Měřený Křišťál



Obr. 33 – Pohled na měřený křišťál mikroskopem, resp. kamerou



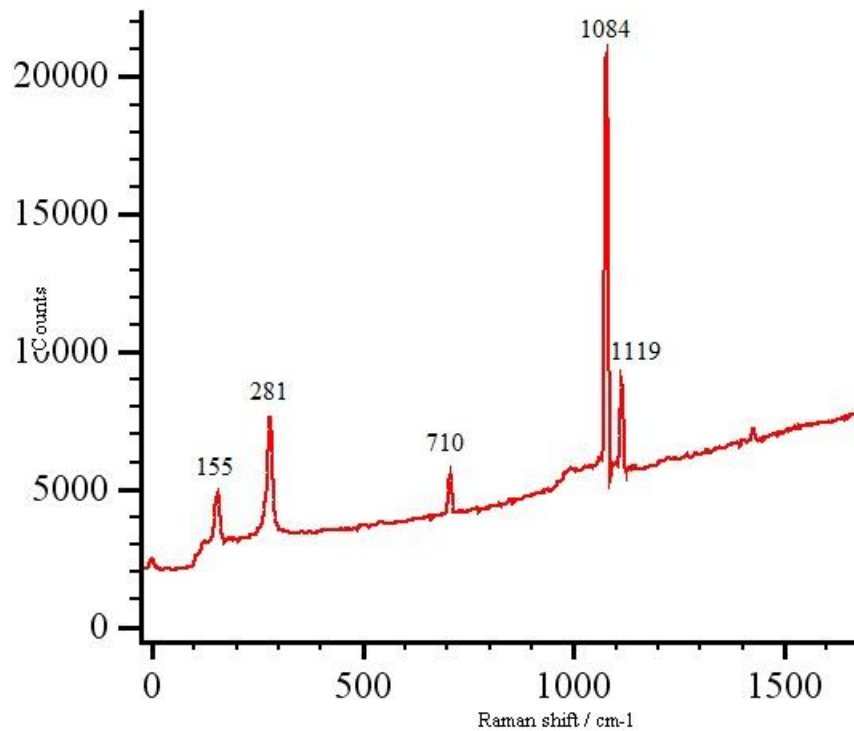
Obr. 34 – Naměřené Ramanovo spektrum Křišťálu



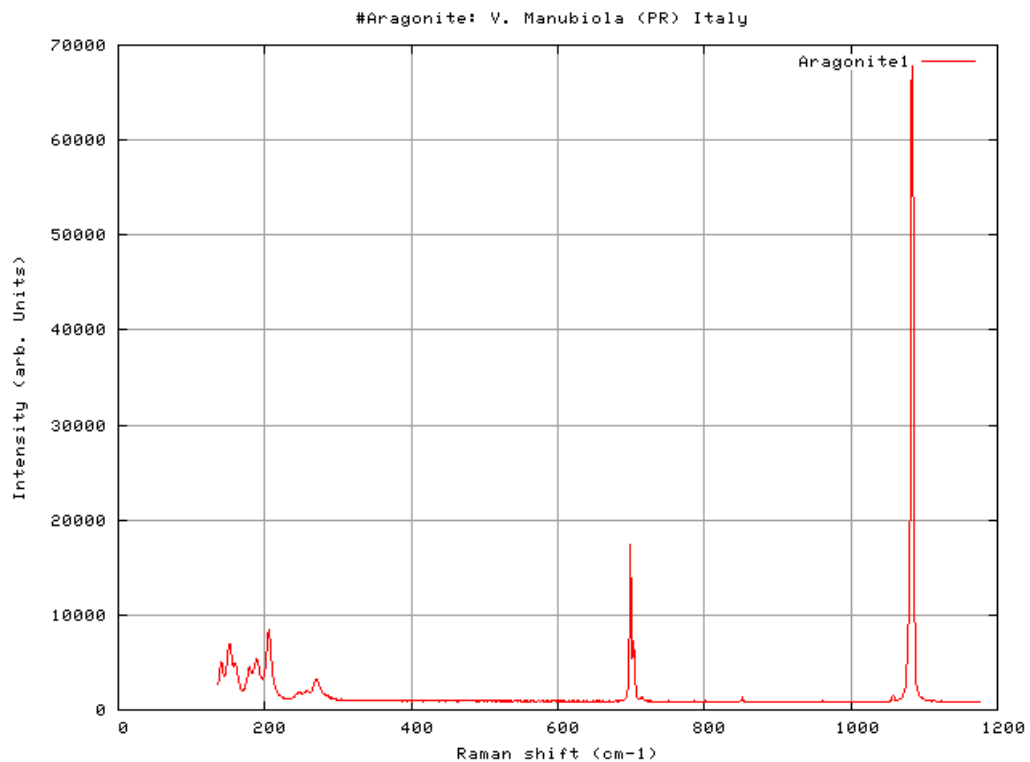
Obr. 35 – Ramanovo spektrum Křišťálu z databáze RASMIN [28]

7.3.3 Aragonit

Aragonit je uhličitan vápníku, chemický vzorec je CaCO_3 .



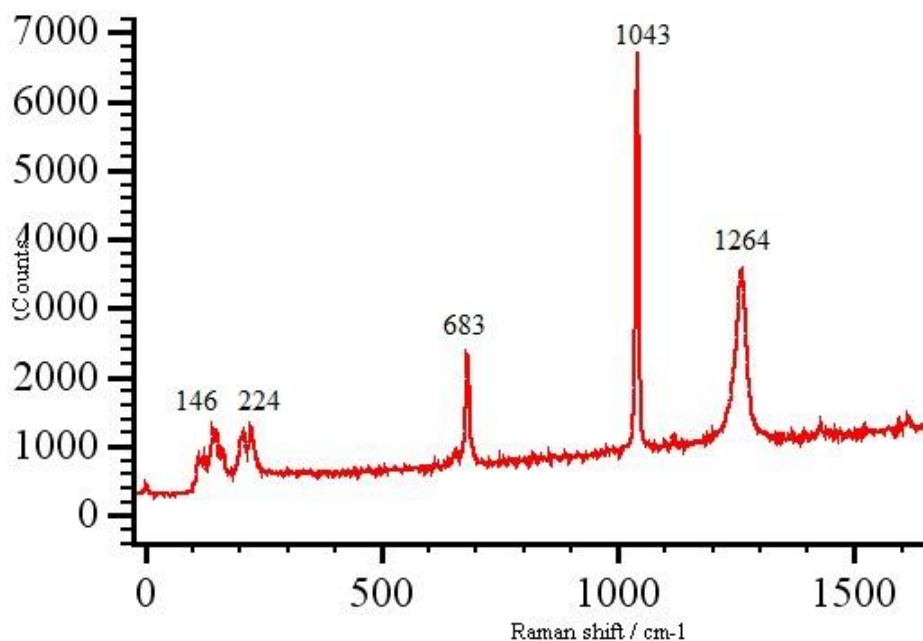
Obr. 36 – Naměřené Ramanovo spektrum Aragonitu



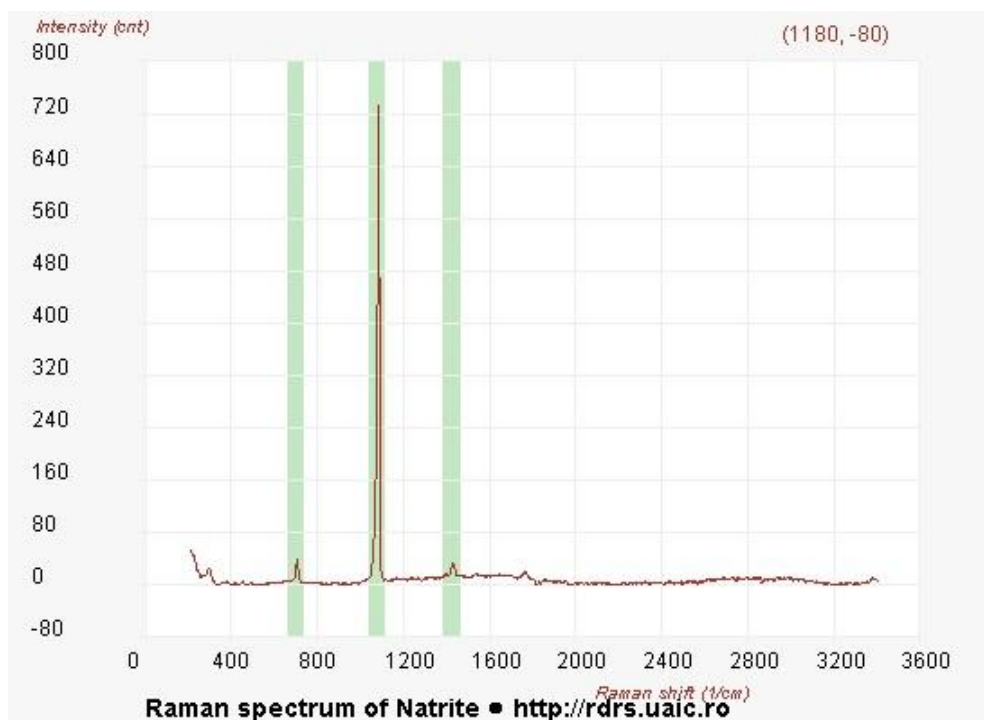
Obr. 37 – Ramanovo spektrum Aragonitu z databáze University of Parma [30]

7.3.4 Uhličitan sodný

Uhličitan sodný je anorganická sloučenina – sodná sůl kyseliny uhličité. Chemický vzorec je Na_2CO_3 .



Obr. 38 – Naměřené Ramanovo spektrum Uhličitanu sodného



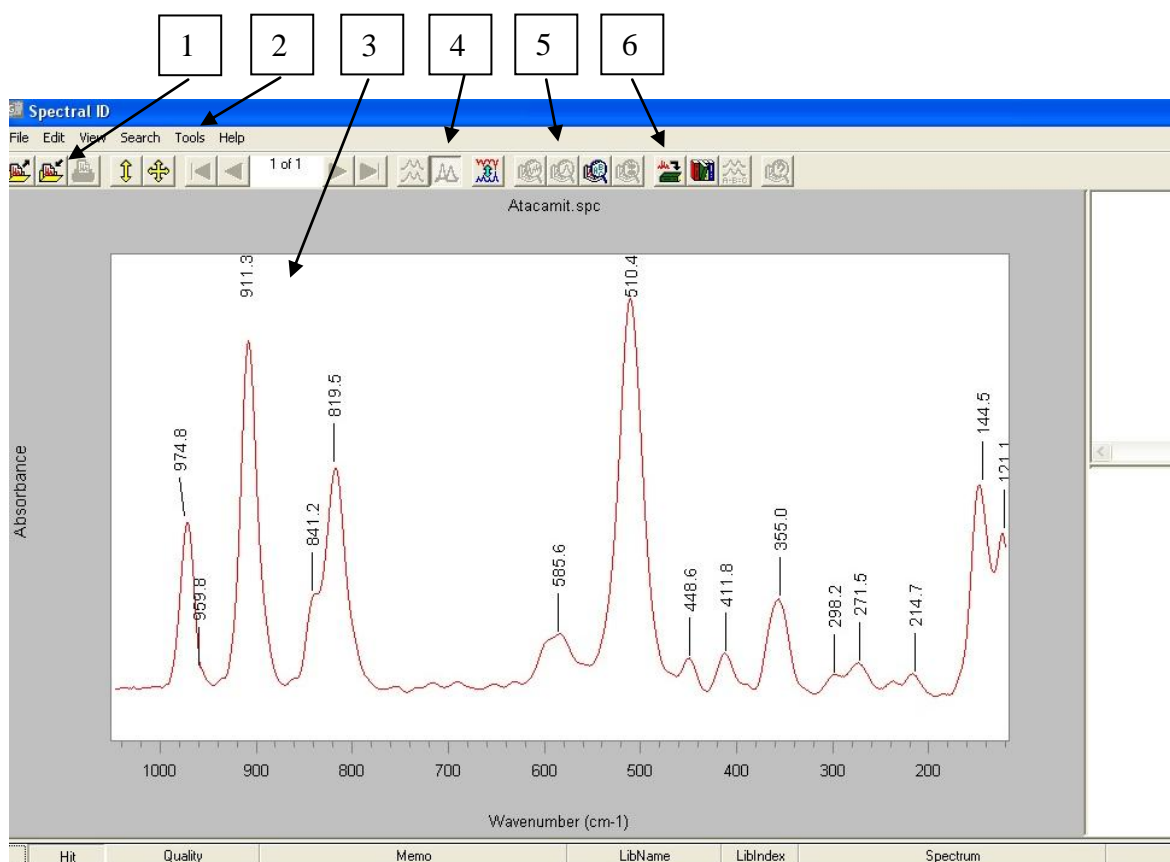
Obr. 39 – Ramanovo spektrum Uhličitanu sodného z databáze RDRS [34]

8 SPECTRAL ID 3.0

Program Spectral ID 3.0 od firmy Thermo Galactic je užitečný nástroj s intuitivním rozhraním pro práci se spektroskopickými databázemi. Poskytuje sofistikované vyhledávání, archivaci a extrakci dat získaných pomocí optických nebo hmotnostních spektroskopických metod. Spectral ID 3.0 poskytuje možnost postupného prohledávání více knihoven. Kromě vyhledávání v lokálních knihovnách, může prohledávat i databáze umístěné na zvoleném serveru, uživatelsky importované databáze, či databáze třetích stran, obsahujících v součtu téměř milion spekter. Také umožňuje vytvářet vlastní knihovny optických a hmotnostních dat.

Každý záznam v knihovně obsahuje spektrální data spolu s informacemi v rozsahu až 2000 znaků. K práci s těmito záznamy používá několik vyhledávacích algoritmů, metod a nástrojů, poskytujících velmi efektivní hledání a praktické funkce k jejich editaci.

8.1 Prostředí programu Spectral ID 3.0



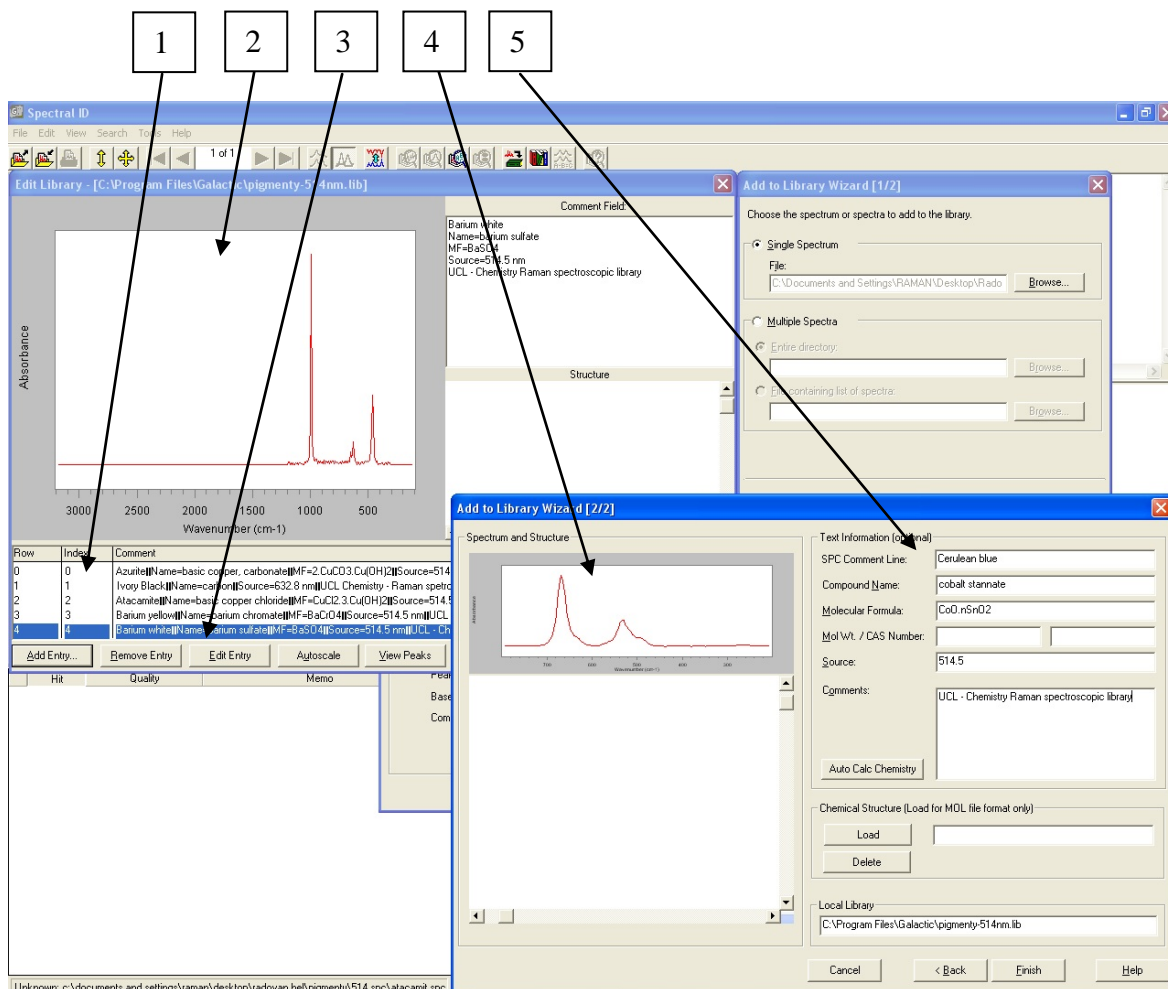
Obr. 40 – Prostředí programu Spectral ID 3.0

- 1 – Načtení a uložení spektra.
- 2 – Nabídka nástrojů.
- 3 – Zobrazené spektrum.
- 4 – Nástroje pro práci s grafem.
- 5 – Vyhledávací nástroje.
- 6 – Nástroje pro práci s knihovnamy.

9 VYTVOŘENÍ VLASTNÍ DATABÁZE

V programu Spectral ID 3.0 jsem vytvořil databázi padesáti čtyř Ramanových spekter pigmentů, převzatých ve formátu SPC z databáze Raman Spectroscopic Library - UCL Chemistry [35]. Celá databáze je dostupná v příloze pod názvem *Databáze pigmentů*.

9.1 Vložení záznamu



Obr. 41 – Vložení nového záznamu do databáze v programu Spectral ID 3.0

- 1 – Seznam záznamů v databázi.
- 2 – Zobrazení spektra označeného záznamu.
- 3 – Nástroje pro práci se záznamy, např. vložení, smazání, úprava atd.
- 4 – Zobrazení spektra vkládaného do databáze.
- 5 – Informace o spektru vkládaném do databáze.

9.2 Hledání v databázi



Obr. 42 – Identifikace spektra neznámého pigmentu prohledáním databáze

1 – Výpis hledání.

2 – Srovnání analyzovaného spektra s nejlepšími shodami v databázi.

3 – Informace o identifikovaném spektru.

ZÁVĚR

V teoretické části jsem se pokusil srozumitelně a jednoduše vysvětlit základní princip Ramanovy spektroskopie, jak funguje, jaké jsou její výhody a nevýhody a na čem je založena, tak, aby je mohl pochopit i čtenář, který se s tématem zatím nesešel. Uvedl jsem také možnosti uplatnění Ramanovy spektroskopie, které je díky jejím vlastnostem velmi široké a v mnoha různých oborech a odvětvích. Lze ji využít mimo jiné při kontrole výrobků v průběhu výrobního procesu, k analýze složení látek, či k vyšetřování zločinů a dopravních nehod. Důležitými aspekty, díky kterým Ramanova spektroskopie dosahuje takového širokého uplatnění, jsou rychlost, nekontaktnost a nedestruktivnost měření.

V praktické části jsem se zaměřil na průzkum internetových, volně přístupných, databází Ramanových spekter. S pomocí těchto databází můžeme identifikovat neznámou látku nebo ověřovat složení a vlastnosti měřeného vzorku. Ze zkoumaných databází jsem udělal seznam se základními informacemi a s ukázkou spektra z dané databáze pro přehlednou orientaci. Jako námět pro další možné pokračování výzkumu v této oblasti, bych uvedl průzkum specializovaných databází, s omezeným přístupem, např. registrací nebo zpoplatněným vstupem, jimiž jsem se já nezabýval.

Provedl jsem také vlastní měření zapůjčených minerálů a naměřená spektra srovnal se spektry dostupnými ze zmíněných databází. Z uvedených grafů je patrné, že i ve školních podmínkách lze dosáhnout odpovídajících výsledků, s ohledem na možné příměsi ve vzorku, jako jsou spektra dostupná v online knihovnách. Toto měření bylo provedeno s pomocí programu WiRE, kterému je věnována kapitola a v níž je prezentován. Představen byl také program Spectral ID, který slouží k práci se spektrálními databázemi. Tento program se ukázal jako velice schopný nástroj pro správu databází s velmi užitečnými nástroji a funkcemi. Mezi jiné k nim patří také možnost nahrát spektrum neznámé změřené látky a pomocí funkce vyhledávání prohledat databázi, zda se v ní nachází shoda.

Spektrální databáze v programu Spectral ID je však možné také vytvářet. Pro budoucí využití jsem vytvořil databázi padesáti čtyř spekter pigmentů, získaných z online databáze Ramanových spekter UCL Chemistry. Databáze je dostupná v příloze k této práci.

ZÁVĚR V ANGLIČTINĚ

In the theoretical part I tried to clearly and simply explain the basic principle of Raman spectroscopy, how it works, what are its advantages and disadvantages and what it is based on, so that the reader without previous knowledge can understand the topic. I claimed the possibilities of Raman spectroscopy, which is due to its properties in a wide variety of industries and branches. It can be used, inter alia, for the control of products during the manufacturing process, to analyze the composition of substances and to investigate crimes and traffic accidents. Important aspects which made Raman spectroscopy achieved such a broad application, are the quick, not-contacting and non-destructive measurement.

In the practical part, I focused on the exploration of online and freely available databases of Raman spectra. Using these databases, we can identify an unknown substance or verify the composition and properties of the sample. I made a list of the examined databases with basic information and with a spectra illustration for clear orientation. As another possible subject for continuous research in this area, I would point out the exploration of specialized databases with limited access, such as registration or paid-entry, which I haven't dealt with.

I also did my own measurement of borrowed minerals and compared the measured spectra with spectra available from the mentioned databases. From those graphs is obvious, that even at the school conditions it is possible to achieve adequate results, with regard to possible impurities in the sample, such as the spectrum available in online libraries. This measurement was done using the WiRE program. Software WiRE has a dedicated chapter, in which is presented. A program for working with spectral databases was also introduced – software Spectral ID. This program has proven as a very efficient tool to manage databases with many useful tools and features. Among others these include the ability to upload measured spectrum of an unknown substance and using the search function to scan the database for a match.

Program Spectral ID is also able to create a spectral databases. For future use, I made a database of fifty four spectra of pigments obtained from an online database of Raman spectra UCL Chemistry. The database is available in the Annex to this work.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] DEMUTH, D., et al. Improvement of Raman Spectra os SAPO-5 by Chromium(III)-Induced Luminiscence Quenching. *Journal of Physical Chemistry*. 1995, Vol. 21, No. 3, s. 000. ISSN 1348-2246.
- [2] MATĚJKA, P. Ramanova Spektrometrie: Úvod – princip Ramanovy spektrometrie. *Výukové materiály VŠCHT : Ústav analytické chemie VŠCHT Praha* [online]. 2002, [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: <<http://www.vscht.cz/anl/lach2/RAMAN.pdf>>.
- [3] SCHMITT, M.; POPP, J. Raman spectroscopy at the beginning of the twenty-first century. *Journal of Raman Spectroscopy*. 2006, Vol. 37, s. 20-28. ISSN 1097-4555.
- [4] *NNDB: Tracking the entire world* [online]. [cit. 2011-05-20]. Chandrasekhara Venkata Raman. Dostupné z WWW: <<http://www.nndb.com/people/724/000099427/>>.
- [5] *Princeton Instruments: CCD, ICCD, EMCCD Cameras, Spectrographs, Monochromators, Optics & Coatings* [online]. [cit. 2011-05-20]. Spectroscopy Applications. Dostupné z WWW: <<http://www.princetoninstruments.com/spectroscopy/raman.aspx>>.
- [6] MATĚJKA, P. Optika: Úvod – Závislost spekter na periodickém pohybu. *Výukové materiály VŠCHT : Ústav analytické chemie VŠCHT Praha* [online]. 2002, [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: <<http://www.vscht.cz/anl/matejka/ACH1-6-optika-c.pdf>>.
- [7] TRCHOVÁ, CSc., Doc. RNDr. M. Jak vibrují atomy v molekulách. *Ústav makromolekulární chemie Akademie věd ČR* [online]. [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: <<http://archiv.otevrena-veda.cz/users/Image/default/C1Kurzy/NH2006pdf/15.pdf>>.

- [8] PLACZEK, G. Rayleigh Streeung und Raman Effekt. *Hdb. der Radiologie*. 1934, Vol. 6. No. 2, s. 209.
- [9] *www.raman.de : Dr. Bernd Dippel* [online]. 2011 [cit. 2011-05-20]. Advantages and Disadvantages of Raman spectroscopy. Dostupné z WWW: <<http://www.raman.de/htmlEN/home/advantageEn.html>>.
- [10] LAKOWICZ, J. R. *Principles of fluorescence spectroscopy* [online]. 3rd edition. Springer, 2006 [cit. 2011-05-20]. Dostupné z WWW: <<http://tinyurl.com/googlebooks-fluorescence>>. ISBN 9780387312781.
- [11] *Invitrogen by Life Technologies* [online]. 2011 [cit. 2011-05-22]. Introduction to Fluorescence. Dostupné z WWW: <<http://probes.invitrogen.com/resources/education/tutorials/1Intro/player.html>>.
- [12] Raman Scattering and Fluorescence. *Jobin Yvon Raman Applications Note* [online]. [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://www.jobinyvon.com/usadivisions/Raman/applications/Fluorescence01.pdf>>.
- [13] Photo-Bleaching and Automatic Baseline Correction for Raman Spectroscopy. *PerkinElmer Technical Note* [online]. [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <http://www.perkinelmer.com/CMSResources/Images/44-74254APP_RamanPhoto-BleachingAutoCorrection.pdf>.
- [14] JBARAH, A., et al. The electrosorption of 1,2,3-triazole on gold as studied with surface-enhanced Raman spectroscopy. *Journal of Raman Spectroscopy* [online]. 2006, Vol. 37, [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jrs.1476/abstract>>. ISSN 1097-4555.
- [15] PITT, G. D. Engineering aspects and applications of the new Raman instrumentation. *IEE Proc.-Sci. Meas. Technol.* 2006, Vol. 152, No. 6.
- [16] *Kaiser Optical Systems, Inc. - A Rockwell Collins Company* [online]. 2011 [cit. 2011-05-21]. Raman Spectroscopy : Raman Applications : Nanotechnology. Dostupné z WWW: <http://www.kosi.com/Raman_Spectroscopy/nanotechnology.php?ss=100>.

- [17] BUZZINI, P.; MASSONNET, G. On the Contribution of Raman Spectroscopy to Forensic Science. [online]. [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://www.icors2010.org/abstractfiles/ICORS20100288.7250VER.1.pdf>>.
- [18] MATĚJKA, P. Rozptylové a emisní metody. *Výukové materiály VŠCHT : Ústav analytické chemie VŠCHT Praha* [online]. 2002, [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: <<http://www.kubusz.net/Anala/Matejka-Prednasky/ACH-09Ramanfluo.pdf>>.
- [19] BUZZINI, P.; MASSONNET, G.; SERMIER, F. M. The micro Raman analysis of paint evidence in criminalistics: case studies. *Journal of Raman Spectroscopy* [online]. 2006, 37, [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jrs.1522/pdf>>.
- [20] Raman Spectroscopy for Geological Materials Analysis. *Horiba Scientific : Raman application note* [online]. [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://www.horiba.com/fileadmin/uploads/Scientific/Documents/Raman/Geo01.pdf>>.
- [21] WEBSTER, S.; BALDWIN, K. J. Raman Spectroscopy for Pharma. Part 1: Principles and Applications. *Pharmaceutical Technology Europe* [online]. 2005 [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://pharmtech.findpharma.com/pharmtech/article/articleDetail.jsp?id=162600&pageID=1>>.
- [22] LAMBERT, P. J., et al. Raman spectroscopy: the gateway into tomorrow. *Virology Journal* [online]. 2006, 3:51, [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <<http://www.virologyj.com/content/3/1/51>>.
- [23] MATĚJKA, P. Přehled technik – molekulová analýza. *Výukové materiály VŠCHT : Ústav analytické chemie VŠCHT Praha* [online]. 2002 [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: < <http://www.vscht.cz/anl/matejka/09-Raman-mikroRaman-07.pdf> >.
- [24] *Sicilae Studium Generale - Luminiscence Dating Laboratory* [online]. 2007 [cit. 2011-05-17]. ColoRaman Project. Dostupné z WWW: <<http://oldweb.ct.infn.it/~archo/>>.

- [25] MINČEVA-ŠUKAROVA, B., et al. Micro-Raman spectroscopic studies of Byzantine cultural heritage in republic of Macedonia. *Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* [online]. 2007, Vol. 26, No. 2, [cit. 2011-05-21]. Dostupný z WWW: <http://www.mjcce.org.mk/PDF/26_2_374.pdf>.

SEZNAM INTERNETOVÝCH DATABÁZÍ

- [26] *Database of Raman spectroscopy, X-ray diffraction and chemistry of minerals* [online]. 2006 [cit. 2011-05-17]. RRUFF. Dostupné z WWW: <<http://rruff.info/>>.
- [27] *AIST:RIO-DB Spectral Database for Organic Compounds, SDBS* [online]. 2004 [cit. 2011-05-17]. Spectral Database for Organic Compounds. Dostupné z WWW: <<http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/>>.
- [28] *AIST:RIO-DB Raman Spectra Database of Minerals and Inorganic Materials* [online]. 2004 [cit. 2011-05-17]. Raman Spectra Database of Minerals and Inorganic Materials. Dostupné z WWW: <http://riodb.ibase.aist.go.jp/rasmin/E_index.htm>.
- [29] *IRUG Spectral Database* [online]. 2002 [cit. 2011-05-17]. Infrared and Raman Users Group. Dostupné z WWW: <<http://www.irug.org/default.asp>>.
- [30] *Phevix - Laboratory of Photoinduced Effects, Vibrational and X Spectroscopies - UniPr* [online]. 2007 [cit. 2011-05-17]. Raman Database. Dostupné z WWW: <<http://www.fis.unipr.it/phevix/ramandb.php>>.
- [31] *Société Française de Minéralogie et de Cristallographie* [online]. 2009 [cit. 2011-05-17]. Index of the RAMAN spectroscopy data set. Dostupné z WWW: <<http://wwwobs.univ-bpclermont.fr/sfmc/ramandb2/index.html>>.
- [32] *Handbook of Minerals Raman Spectra* [online]. 2000 [cit. 2011-05-17]. ENS de Lyon. Dostupné z WWW: <<http://www.ens-lyon.fr/LST/Raman/index.php>>.
- [33] *Dipartimento di Scienze della Terra in Siena* [online]. 2003 [cit. 2011-05-17]. Fluid and melt inclusions Raman Siena. Dostupné z WWW: <<http://www.dst.unisi.it/geofluids-lab/Raman%20intro.htm>>.
- [34] *Romanian Database of Raman Spectroscopy - Home for minerals and pigments Raman spectra* [online]. 2009 [cit. 2011-05-17]. Romanian Database of Raman Spectroscopy. Dostupné z WWW: <<http://rdrs.uaic.ro/index.html>>.
- [35] *UCL Chemistry - Chemistry Resources - Raman Spectroscopic Library* [online]. 1999 [cit. 2011-05-17]. Raman Spectroscopic Library. Dostupné z WWW: <<http://www.chem.ucl.ac.uk/resources/raman/index.html>>.

- [36] *McCreery Group - Raman Materials* [online]. 2009 [cit. 2011-05-17]. McCreery research group National Institute of Nanotechnology, University of Alberta. Dostupné z WWW: <<http://www.chem.ualberta.ca/~mccreery/ramanmaterials>>.
- [37] *Sicilae Studium Generale - Luminiscence Dating Laboratory* [online]. 2007 [cit. 2011-05-17]. ColoRaman Project. Dostupné z WWW: <<http://oldweb.ct.infn.it/~archo/>>.
- [38] VANDENABEELE, P., et al. Raman spectroscopic database of azo pigments and application to modern art studies. *Journal of Raman Spectroscopy* [online]. 2000, č. 31, [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: <[http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/1097-4555\(200006\)31:6%3C509::AID-JRS566%3E3.0.CO;2-0/abstract](http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/1097-4555(200006)31:6%3C509::AID-JRS566%3E3.0.CO;2-0/abstract)>.
- [39] DE VEIJ, M., et al. Reference database of Raman spectra of pharmaceutical excipients. *Journal of Raman Spectroscopy* [online]. 2008 [cit. 2011-05-20]. Dostupný z WWW: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jrs.2125/pdf>>.

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

c	Fázová rychlost šíření vlnění.
E	Energie.
\mathbf{E}	Vektor intenzity elektrického pole.
f	Frekvence.
h	Planckova konstanta.
k	Boltzmannova konstanta
m	Hmotnost.
\mathbf{p}	Vektor indukovaného dipólového momentu.
q	Vnitřní souřadnice molekuly.
T	Perioda.
α	Polarizovatelnost.
λ	Vlnová délka
μ	Redukovaná hmotnost.
ω	Vlnočet.

SEZNAM OBRÁZKŮ

<i>Obr. 1 – C. V. Raman</i>	12
<i>Obr. 2 – Schéma přechodů</i>	15
<i>Obr. 3 – Křivka potenciální energie</i>	17
<i>Obr. 4 – Fluorescenční proces</i>	21
<i>Obr. 5 – Ramanovo spektrum pro Morfium a Heroin</i>	24
<i>Obr. 6 – Srovnání Ramanových spekter modré metalické barvy, k určení přesného místa kontaktu při nehodě těchto dvou automobilů</i>	25
<i>Obr. 7 – Ramanovo spektrum pro Aspirin a Ibuprofen</i>	26
<i>Obr. 8 - Ramanova spektra tkání</i>	27
<i>Obr. 9 – Keramický vzorek, odpovídající Ramanovo spektrum a jeho průřez</i>	28
<i>Obr. 10 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze RRUFF</i>	31
<i>Obr. 11 – Náhled měřeného vzorku z databáze RRUFF</i>	31
<i>Obr. 12 – Ramanovo spektrum Benzonitrilu z databáze SDBS</i>	32
<i>Obr. 13 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze RASMIN</i>	33
<i>Obr. 14 – Náhled měřeného vzorku z databáze RASMIN</i>	33
<i>Obr. 15 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze IRUG</i>	34
<i>Obr. 16 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze University of Parma</i>	35
<i>Obr. 17 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze SFMC</i>	36
<i>Obr. 18 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze ENS de Lyon</i>	37
<i>Obr. 19 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze DST in Siena</i>	38
<i>Obr. 20 – Ramanovo spektrum Dolomitu z databáze RDRS</i>	39
<i>Obr. 21 – Ramanovo spektrum Azuritu z databáze UCL Chemistry</i>	40
<i>Obr. 22 – Ramanovo spektrum Benzonitrilu z databáze McCreery Group</i>	41
<i>Obr. 23 - Zobrazení spektra pigmentu isoindolo orange, použitým Fresco technikou a měřeném laserem s vlnovou délkou 531.5 nm</i>	42
<i>Obr. 24 – Zobrazení výběru pigmentu</i>	43
<i>Obr. 25 – Ramanova spektra sloučenin z Tab. 2</i>	44
<i>Obr. 26 – Schéma spektrometru od firmy Renishaw</i>	46
<i>Obr. 27 – Prostředí programu WiRE 3.2</i>	47
<i>Obr. 28 – Nástroj pro nastavení parametrů měření</i>	48
<i>Obr. 29 – Měření Ametyst</i>	49

<i>Obr. 30 – Naměřené Ramanovo spektrum Ametystu</i>	<i>49</i>
<i>Obr. 31 – Naměřené spektrum Ametystu z databáze RRUFF</i>	<i>49</i>
<i>Obr. 32 – Měřený Křišťál</i>	<i>50</i>
<i>Obr. 33 – Pohled na měřený křišťál mikroskopem, resp. kamerou</i>	<i>50</i>
<i>Obr. 34 – Naměřené Ramanovo spektrum Křišťálu</i>	<i>51</i>
<i>Obr. 35 – Ramanovo spektrum Křišťálu z databáze RASMIN</i>	<i>51</i>
<i>Obr. 36 – Naměřené Ramanovo spektrum Aragonitu.....</i>	<i>52</i>
<i>Obr. 37 – Ramanovo spektrum Aragonitu z databáze University of Parma</i>	<i>52</i>
<i>Obr. 38 – Naměřené Ramanovo spektrum Uhličitanu sodného</i>	<i>53</i>
<i>Obr. 39 – Ramanovo spektrum Uhličitanu sodného z databáze RDRS</i>	<i>53</i>
<i>Obr. 40 – Prostředí programu Spectral ID 3.0</i>	<i>54</i>
<i>Obr. 41 – Vložení nového záznamu do databáze v programu Spectral ID 3.0.....</i>	<i>56</i>
<i>Obr. 42 – Identifikace spektra neznámého pigmentu prohledáním databáze.....</i>	<i>57</i>

SEZNAM TABULEK

<i>Tab. 1 – Vlnočty některých charakteristických vibrací vazeb a skupin v Ramanových spektrech</i>	19
<i>Tab. 2 – Ukázka tištěné databáze</i>	43
<i>Tab. 3 – Přehled informací o databázích 1/2</i>	45
<i>Tab. 4 – Přehled informací o databázích 2/2</i>	45

SEZNAM PŘÍLOH

PŘÍLOHA I – Vlnočty charakteristických vibrací některých vazeb a skupin v Ramanových spektrech

PŘÍLOHA II – Databáze Ramanových spekter azo pigmentů

PŘÍLOHA III – Databáze Ramanových spekter farmaceutických pomocných látek

PŘÍLOHA IV – Databáze pigmentů – externí soubory přiložené na CD k bakalářské práci

PŘÍLOHA P I: VLNOČTY CHARAKTERISTICKÝCH VIBRACÍ NĚKTERÝCH VAZEB A SKUPIN V RAMANOVÝCH SPEKTRECH [2]

Vlnočet, cm^{-1}	Intenzita	Přiřazení	Funkční skupina	Další charakteristický pás
<u>voda – v organickém rozpouštědle</u>				
3760-3580	vw-w	$\nu_{\text{as}}(\text{H}_2\text{O})$	H_2O	3640-3500
3640-3500	w-m, br	$\nu_{\text{s}}(\text{H}_2\text{O})$	H_2O	1640-1605
1640-1605	vw	$\delta(\text{H}_2\text{O})$	H_2O	-
<u>voda – krystalová, rozpouštědlo</u>				
3600-3100	m, br	$\nu(\text{OH})$	H_2O	1645-1615
1645-1600	v	$\delta(\text{H}_2\text{O})$	H_2O	-
<u>alkoholy, fenoly</u>				
3670-3580	vw-w,	$\nu(\text{OH})$ – bez vlivu vodíkových můstků, úzký	-OH, izolované	1420-1260
3600-3400	vw	$\nu(\text{OH})$ – významný vliv intramolekulárních vodíkových můstků, vlnočet koncentračně nezávislý, širší než pro izolované –OH, užší než v případě intermolekulárních můstků	-OH, intramol. H-vazba	1440-1300
3600-3150	vw-w, br	$\nu(\text{OH})$ -OH, pevné či kapal. l. – významný vliv intermolekulárních vodíkových můstků , vlnočet s rostoucí koncentrací klesá		1440-1290
3200-2500	w, br	$\nu(\text{OH})$ -OH, pevné či kapal. l . - chelatovaná –OH skupina		1440-1290
1440-1310	m-w	$\delta(\text{COH})$ (pozor na překryv pásů)	terc.-OH, Ar-OH	1260-1100
1400-1260	m-w	$\delta(\text{COH})$	ROH, R_2OH , (prim. a sek.)	1150-1000
1260-1170	m-w	$\nu(\text{CO})$	Ar-OH	-
1215-1100	m-s	$\nu(\text{CO})$	$\text{R}_3\text{C-OH}_x$ (terc.)	800-750
1150-1070	s-m	$\nu(\text{CO})$	$\text{R}_2\text{CH-OH}$, (sekund.)	900-800
1090-1000	s-m	$\nu(\text{CO})$	R-OH_x (primar.)	900-800
900-800	s-m	$\nu(\text{CCO})$	R-OH , (primar.)	-
900-800	s	$\nu(\text{CCO})$	R-OH_x (sekund.)	-
800-750	s	$\delta(\text{CO})$	$\text{R}_3\text{C-OH}$, (terc.)	-

karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, izolované molekuly

3580-3500	vw	$\nu(\text{OH})$ -COOH, monomer		1800-1740
		neasociované molekuly		
1800-1740	w-m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	-COOH, monomerní	1380-1280
1380-1280	m-w	$\delta(\text{OH})$	-COOH, monomerní	1190-1075
1190-1075	w	$\nu(\text{CO})$	-COOH, monomerní forma -	

karboxylové kyseliny – nedisociovaná forma, asociované molekuly

3200-2230	vw-w, br	$\nu(\text{OH})$ -COOH, dimerní, asoc.		1725-1700
		vlnočet s rostoucí koncentrací klesá,		intermol. H-vazba
1725-1700	w-m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	-COOH, dimerní forma	1440-1395
		1725-1700 – nasycené kys.,		
		1710-1680 – nenasycené a Ar kys.		
1440-1395	w-m	$\delta(\text{OH}) + \nu(\text{CO})$	-COOH, dimerní forma	1320-1210
1320-1210	v (m-s)	$\nu(\text{CO})$	-COOH, dimerní forma	970-875
			dimerní forma, někdy dublet	
970- 875	m,br	$\gamma(\text{OH})$	-COOH, dimerní forma -	

karboxylové kyseliny – disociovaná forma (anion), asociované molekuly

1655-1540	w	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$	-COO ⁻	1440-1335
1440-1335	m-s	$\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$	-COO ⁻	-
		širší pás s raménky (dva až tři píky)		

aminy – primární

3550-3280	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$	-NH ₂	3450-3160
		vlnočet s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba,		vliv menší než u -OH
		širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi		
3450-3160	vw-w	$\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$	-NH ₂	1650-1580
		vlnočet s rostoucí koncentrací klesá, intermol. H-vazba,		vliv menší než u -OH
		širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi		
1650-1580	w	$\delta(\text{NH}_2)$	-NH ₂	Ar: 1360-1240
				R : 1295-1145
1360-1240	m-w	$\nu(\text{CN})$	ArNH ₂	1120-1020
1295-1145	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	RNH ₂ , často překryv pásů	1240-1020
1240-1020	m-s	$\nu(\text{CN})$	RNH ₂ , často překryv pásů	-
1120-1020	m-w	$\rho(\text{NH}_2)$	ArNH ₂ , často překryv pásů	1120-1020

aminy – sekundární

3500-3300	w	v(NH)	-NH-	1580-1490
1580-1490	w	δ (NH)	-NH - pro ArNH riziko překryvů	R: 1190-1170 Ar: 1360-1250
1360-1250	m-w	v(CN)	Ar ₂ NH, Ar-NH-R	1280-1180
1280-1180	m-w	v(C _R N)	Ar-NH-R	-
1190-1170	m	v _{as} (CNC)	R ₂ NH	1145-1130
1145-1130	m-w	v _s (CNC)	R ₂ NH	1145-1130
750- 700	w,br	ω (NH)	-NH-	-

amidy - primární

3540-3320	m-w	v _{as} (NH ₂)	-CO-NH ₂	3420-3180
nižší vlnočet při vlivu H-vazby, širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
3420-3180	m-w	v _s (NH ₂)	-CO-NH ₂	1690-1640
nižší vlnočet při vlivu H-vazby, širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
1690-1640	m-w	v(C=O)	-CO-NH ₂ , amid I	1640-1590
1640-1590	w-m	δ (NH ₂)	-CO-NH ₂ , amid II	1420-1400
1420-1400	m	v(CN)	-CO-NH ₂ , amid III	1170-1130
1170-1130	vw	ρ (NH ₂)	-CO-NH ₂ , nezřetelný	600-550
600- 550	m	δ (N-C=O)	-CO-NH ₂	-

amidy - sekundární

3460-3270	m-w	v(NH)	-CO-NH-, trans	1700-1665, 3100-3070
širší pás v případě chemicky čisté látky v kondenzované fázi				
3180-3140	m-w	v(NH)	-CO-NH-, cis	1700-1630
3100-3070	vw	svrchní tón	-CO-NH-, trans	1700-1665
od amid.p.II, velmi slabý, často nezřetelný				
1700-1630	w-m	v (C=O)	-CO-NH-, amid I	1570-1510
1570-1510	m-w	δ (NH)	-CO-NH-, amid II	1305-1200
1350-1310	s	v(CN)	-CO-NH-, amid III, cis	820-780
1305-1200	s	v(CN)	-CO-NH-, amid III, trans	770-620
obvykle okolo 1260 cm ⁻¹				
820-780	m-s,br	γ (NH)	-NH-CO-, cis	-
770- 620	w,br	γ (NH)	-NH-CO-, trans	-

amidy - terciární

1670-1630	w-m	$\nu(\text{C=O})$	$-\text{CO-N}<$	870-700
870-700	s	$\nu_{\text{as}}(\text{C-N-C})$	$-\text{CO-N}<\text{C}$	620-570
620-570	m	$\delta(\text{N-C=O})$	$-\text{CO-N}<\text{C}$	-

alkyny (alkiny) – alkylacetylény

3340-3280	w-m	$\nu(\text{CH})$	$-\text{C}\equiv\text{C-H}$	2150-2100
2150-2100	s-m	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$	$-\text{C}\equiv\text{C-H}$	1020-905
1020-905	w-m	$\nu(\text{C-C}\equiv\text{C})$	$\text{H-C}\equiv\text{C-C}$	370-220
370-220	w-m	$\delta(-\text{C}\equiv\text{C-H})$	$-\text{C}\equiv\text{C-H}$	-

alkyny (alkiny) – dialkylacetylény

2260-2190	vs-s	$\nu(\text{C}\equiv\text{C})$	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	
-----------	------	-------------------------------	----------------------------	--

u symetrické molekuly vs někdy doprovázen pásem okolo 2310 cm^{-1}

alkeny – vinyl a vinyliden deriváty (koncová dvojná vazba)

3120-3050	m	$\nu_{\text{as}}(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	3050-2960
3050-2960	m	$\nu_{\text{s}}(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1685-1620
1685-1620	s	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1440-1360
1440-1360	m-s	$\delta(\text{CH}_2)$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1320-1250
			pozor na překryvy pásů	
1320-1250	m-w	$\delta(\text{CH})$	$>\text{C}=\text{CH}_2$	1180-1010
1180-1010	m	$\delta(\text{CH})$	$>\text{CH}=\text{CH}_2$	980- 810
980- 810	w	$\gamma(\text{CH})$	$>\text{CH}=\text{CH}_2$	-

alkeny, cykloalkeny a jejich deriváty – (vnitřní dvojná vazba, dvojně vazby)

3060-2995	m	$\nu(\text{CH})$	$=\text{CH}-$	izolované: 1685-1620 konjugované: 1660-1580
1685-1620	s-vs	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$>\text{C}=\text{C}<$, izolované	1440-1190
1660-1580	s-m	$\nu(\text{C}=\text{C})$	$-\text{C}=\text{C}$, konjugované	1440-1190
			poloha pásu klesá se stupněm konjugace, konjugace s C=C, Ar, C=O	
1440-1340	s-m	$\nu(\text{C}=\text{C})$	cyklické, více C=C vazeb	-
			vibrace nenasycených kruhů	
1350-1340	w	$\delta(\text{CH})$	$>\text{C}=\text{CH}-$, trisub.	850-790
1350-1260	w-vw	$\delta(\text{CH})$	$-\text{HC}=\text{CH}-$, trans	1000- 910
1295-1190	s-m	$\rho(\text{CH})$	$-\text{HC}=\text{CH}-$, cis	980- 880
1000- 910	m	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R-CH}=\text{CH-R}$, trans	630- 430
980- 880	m	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R-CH}=\text{CH-R}$, cis	730- 660
850- 790	w	$\gamma(\text{CH})$	$\text{RR}'>\text{C}=\text{CH-R}''$	-
730- 660	w	$\gamma(\text{CH})$	$\text{R-CH}=\text{CH-R}$, cis	-
630- 430	w	$\gamma(\text{CH})$ $\delta(\text{CH})$	$\text{R-CH}=\text{CH-R}$, trans	-

aromatické uhlovodíky

3105-3000	m-s	$\nu(\text{CH})$	Ar	1630-1590
několik pásů, počet klesá s růstem substituce jádra pro Ar-NO ₂ deriváty 1. maximum i nad 3105				
1630-1590	m-s	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle 1600	1590-1575
1590-1575	v	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar,	1525-1470
1525-1470	w	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar, obvykle okolo 1490	1470-1425
1470-1425	w	$\nu(\text{C}=\text{C})$	Ar	1290- 990
interval závisí na typu subst., pro Ar, 1,2,4,5-tetrasubstit., penta- a hexasub. přímý odkaz do oblastí v celkovém intervalu 575- 385				

1290-1130	m	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,4-disubstit.	880- 790
1270-1220	m	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,4-trisubstit.	680- 610
1190-1070	w	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,3,4-tetrasubstit.	585- 565
1170-1120	m	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,3,5-tetrasubstit.	580- 505
1150-1030	m-s	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2,3-trisubstit.	670- 500
1140-1020	m-s	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,2-disubstit.	790-650
1050-990	m-vs	$\delta(\text{CH})$	Ar, monosubstit.	710-605
1025-990	vs	$\delta(\text{CH})$	Ar, 1,3-disubstit., Ar, 1,3,5-trisubstit.	800-660 535-495
880- 790	s	$\gamma(\text{CH})$	Ar, 1,4-disubstit.	-
800- 660	m-s	$\gamma(\text{CH})\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,3-disubstit.	-
790- 650	s	$\gamma(\text{CH})\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2-disubstit.	590- 510
710- 605	m-w	$\gamma(\text{CC}),\gamma(\text{CH})$	Ar, monosubstit.	-
680- 610	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,4-trisubstit.	-
670- 500	s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,3-trisubstit.	-
590- 510	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2-disubstit.	-
585- 565	s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,3,4-tetrasubstit.	-
580- 505	v	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,3,5-tetrasubstit.	-
575- 545	s-vs	$\gamma(\text{CC})$	Ar, pentasubstit.	-
535- 495	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,3,5-trisubstit.	280- 250
470- 420	s-m	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,2,4,5-tetrasubstit.	-
415- 385	s-m	$\gamma(\text{CC})$	Ar, hexasubstit.	-
280- 250	m-s	$\gamma(\text{CC})$	Ar, 1,3,5-trisubstit.	-

alkany, alkylové řetězce

2995-2940	m	$\nu_{as}(\text{CH}_3)$	$-\text{CH}_3$	2895-2840
2955-2915	m	$\nu_{as}(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-$	2880-2835
2895-2840	m-s	$\nu_s(\text{CH}_3)$	$-\text{CH}_3$	1470-1385
2880-2830	m-s	$\nu_s(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-$	1480-1385
1480-1440	w-m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-(\text{C})-\text{CH}_2, -(\text{O})-\text{CH}_2-$ (může se překrývat s pásem Ar, $-\text{CH}_3$)	1305-1295 (odkaz platí pouze pro $-(\text{CH}_2)_n-$ $n>2$)
1470-1440	m	$\delta_d(\text{CH}_3)$	$-(\text{C})-\text{CH}_3, -(\text{O})-\text{CH}_3$ (může se překrývat s pásem Ar, $-\text{CH}_2-$)	1395-1345
1450-1390	w	$\delta_d(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-, \text{CH}_3-\text{N}<, \text{CH}_3-(\text{C}=\text{O})-\text{C}-, \text{CH}_3-(\text{S}=\text{O})-\text{C}-$	1385-1300
1445-1385	m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-\text{X}, \text{X}:-(\text{C}=\text{O})-, -\text{COOR}, -\text{C}=\text{C}-, -\text{C}\equiv\text{C}-, \text{Ar}, -\text{CN}, \text{NO}_2, \text{Cl}, \text{Br}$	785-720
1395-1345	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{C})-, \text{CH}_3-(\text{O})-$ dublet typický pro rozvětvení	1255-1130 (odkaz platí pouze pro dublet)
1385-1330	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{C}=\text{O})-, \text{CH}_3-(\text{C}=\text{O})-\text{O}-$	-
1370-1310	w-m	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{N}<)$	-
1360-1320	w	$\delta(\text{CH})$	$-\text{C}-\text{H}, \text{nasyc.}$	-
1340-1300	w	$\delta_s(\text{CH}_3)$	$\text{CH}_3-(\text{S}=\text{O})-\text{C}-$	-
1305-1295	m	$\delta(\text{CH}_2)$	$-(\text{CH}_2)_n-$ $n>2$, intenzita roste s n	1100-1040
1255-1245	m	$\nu(\text{CC})$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_3$	1225-1165
1225-1165	m	$\nu(\text{CC})$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_3$	1020- 980
1175-1165	w	$\nu(\text{CC})$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	1150-1130
1150-1130	w		$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	955- 900
1100-1040	m-s	$\nu(\text{CCC})$	$-(\text{CH}_2)_n-$	900-800
1020- 980	m-s	$\nu(\text{CC})$	$-\text{C}(\text{CH}_3)_3$	930- 925
930- 925	m		$-\text{C}(\text{CH}_3)_3$	360-270
955- 900	m	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CCH})$	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	840-790
900-800	m-s	skeletální	$-(\text{CH}_2)_n-$	750-720
840- 790	m	skeletální	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	495-490
785- 750	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	$-\text{CH}_2-\text{CH}_x, x\neq 2$	-
750- 735	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	propyl, $(\text{CH}_2)_n-(\text{O})-, n>4$	-
735- 720	vw	$\rho(\text{CH}_2)$	$(\text{CH}_2)_n-(\text{C})-, n>3$	-
495-490	m	skeletální	$-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	-
360- 270	m		$-\text{C}(\text{CH}_3)_3$	-

aldehydy

2850-2800	w	v(CH)	-CHO	2745-2650
			někdy raménko pásu pod 2745 cm ⁻¹	
2745-2650	s-m	v(CH)	-CHO	1745-1650
			efekt Fermiho resonance	
1745-1650	w-m	v(C=O)	-CHO	1440-1325
			vyšší hodnota vlnočtu pro nasycené alifatické aldehydy	
			hodnota vlnočtu se snižuje vlivem konjugace C=O vazby s C=C, Ar apod. v okolí	
1440-1325	s-m	δ(CH)	-CHO	975-780
975-780	m	γ(CH)	-CHO	-

thioly

2600-2520	s	v(SH)	-SH	750-570
750-570	s	v(CS)	-C-SH	410-200
410-200	v	δ(CS)	-C-SH	-

fosfiny

2460-2100	m-w	v(PH)	-PH	1150-965
1150-965	m-w	δ(PH)	-PH	-

isokyanáty

2295-2250	w	v _{as} (N=C=O)	-N=C=O,	1460-1340
1460-1340	s	v _s (N=C=O)	-N=C=O	650-580
650-580	w	δ(N=C=O)	-N=C=O	-

nitrily

2270-2200	s	v(C≡N)	-C≡N	390-340
			velmi úzký pás	odkaz platí pouze pro alifatické nitrily
390-340	s	δ (C-C≡N)	-C-C≡N	200-160
200-160		skeletální	-C-C≡N	-

thiokyanáty

2185-2135	m-s	v(C≡N)	-S-C≡N	1090-925
			velmi úzký pás	
1090-925	m-s	v _s (S-C≡N)	-S-C≡N	700-670
700-670	s	v _{as} (-C-S-C)	-C-S-C≡N	660-610
660-610	s	v _s (-C-S-C)	-C-S-C≡N	-

isothiokyanáty

2150-1990	m,br	v _{as} (N=C≡S)	-N=C=S	1250-925
1250-925	s	v _s (N=C≡S)	-N=C=S	690-650
690-650	s	δ _s (N=C≡S)	-N=C=S	-

β,γ -laktony

1840-1770	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	β,γ -laktony	1370-1160
1370-1160	w	$\nu(\text{CO})$	β,γ -laktony	-

estery

1800-1750	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	vinyl a fenylestery	1310-1250
1750-1720	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	nasyčené estery	1300-1150
1740-1705	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$-\text{CO}-\text{O}-$, α,β -nenas. estery	1335-1250
1730-1705	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$, estery aromátů	1330-1250
1335-1250	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	$-\text{CO}-\text{O}-$, α,β -nenas. estery, pás širší než u ketonů	1200-1130
1330-1250	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$, širší než u ketonů	1150-1080
1300-1150	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$, nasyc. (obvykle širší než u ketonů)	1160-1050
1200-1130	w	$\nu_2(\text{COC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}'$, α,β -nenasyc.	-
1200-1180	m-s	$\nu_{\text{as}}(\text{COC})$	HCOOR	1165-1050
1165-1100	w	$\nu_2(\text{COC})$	HCOOR	775-620
1160-1050	w	$\nu_2(\text{COC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}'$, nasyc.	-
1150-1080	w	$\nu_2(\text{COC})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{O}-\text{R}$	-
775- 620	m	$\delta(\text{OCO})$	HCOOR	-

ketony

1750-1690	m	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$, nasyčené ketony	1325-1175
1705-1650	m-w	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\text{Ar}-\text{CO}-$, α,β -nenas. ketony	1320-1280
1325-1175	m-w	$\nu(\text{CC})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$ (často obtížně rozpoznatelný)	1170-1095
1320-1280	m	$\delta(\text{C}-\text{CO}-\text{C})$	$\text{Ar}-\text{CO}-\text{Ar}(-\text{R})$, obecně několik pásů	1225-1075
1225-1075	m	$\nu(\text{C}_{\text{Ar}}\text{C})$	$\text{Ar}-\text{CO}-$	-
1170-1095	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$, několik pásů při delších řetězcích	800-700
800-700	m-s	$\nu_2(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$	630-580
630-580	s-m	$\delta(\text{CC}(=\text{O})\text{C})$	$\text{R}-\text{CO}-\text{R}'$	-

nitrosloučeniny

1570-1485	m-w	$\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2)$	$-\text{NO}_2$	1385-1315
1385-1315	s-vs	$\nu_2(\text{NO}_2)$	$-\text{NO}_2$	1180-850
1180- 850	s-m	$\nu(\text{CN})$	$-\text{C}-\text{NO}_2$	-

Poznámka: ⁽¹⁾ Valenční vibrace $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$ by měla být správně označena $\nu_{\text{d}}(\text{CH}_3)$. Označení ν_{as} se však běžně používá, a bylo proto zachováno i v této tabulce.

Použité zkratky:

Intenzita: vs - velmi silná, s - silná, m - střední, w - slabá, vw – velmi slabá, v - proměnná, br - široký pás, sh - raménko (anglicky shoulder).

Popis vibračních kmitů: ν - valenční, δ - deformační, γ - mimorovinný, ω - kývavý (anglicky wagging), ρ - kolébavý (angl. rocking), as - antisymetrický, s - symetrický, d - degenerovaný,

amid I - III - označení amidických pásů I - III, vystihující silné spřažení vibrací v amidech, komb.p. - kombinační pásy. R - alkyl, Ar - aryl.

PŘÍLOHA P II: DATABÁZE RAMANOVÝCH SPEKTER AZO PIGMENTŮ [38]

CI name	Supplier	Raman band wavenumbers $\bar{\nu}/\text{cm}^{-1}$ (between 1800 and 50 cm^{-1})	Fig.
PY 1	SunChemicals	1670(w), 1621(vs), 6101(m-w), 1564(w), 1533(w), 1485(vs), 1450(vw), 1406(w), 1386(m), 1337(m-w), 1323(m), 1310(vs), 1255(m), 1216(m), 1192(w), 1178(w), 1168(w), 1138(vs), 1068(vw), 999(m), 951(m-w), 925(w), 845(w), 824(w), 786(m), 616(w), 511(w), 460(w), 410(vw), 390(m-w), 361(w), 353(vw), 186(w)	1(a)
PY 3	Schmincke, SunChemicals	1671(vw), 1612(m), 1593(w,sh), 1566(vw), 1545(vw), 1494(m), 1442(vw), 1386(m), 1336(m-s), 1309(m), 1275(vw), 1243(w), 1189(w), 1153(vw), 1138(vs), 1105(vw), 1061(vw), 1036(vw), 957(vw), 915(vw), 848(vw), 824(vw), 791(vw), 745(w), 707(vw), 675(vw), 649(m-w), 621(w), 542(vw), 486(vw), 449(vw), 434(vw), 411(w), 394(w), 370(vw), 355(vw), 345(vw), 296(vw), 272(vw), 201(w), 184(w), 136(w), 111(vw)	1(a)
PY 65	SunChemicals	1670(w), 1623(m), 1601(m-w), 1576(vw), 1543(w), 1534(w,sh), 1488(vs), 1460(vw), 1441(w), 1424(m-w), 1392(m-s), 1344(m), 1326(s), 1316(m,sh), 1295(vw), 1275(vw), 1252(m), 1229(vs), 1190(w), 1171(w), 1135(vs), 1072(vw,sh), 1062(vw), 1049(vw), 1027(vw), 951(w), 932(w), 916(vw), 829(w), 794(m-s), 777(vw), 759(vw), 705(vw), 689(vw), 672(vw), 622(m-w), 607(w), 580(vw), 558(vw), 535(w), 512(vw), 497(vw), 480(vw), 447(w), 411(w), 398(vw), 377(w), 340(vw), 325(w), 229(vw), 184(w), 150(vw), 112(vw)	1(a)
PY 74	Kremer, SunChemicals	1667(vw), 1593(m), 1549(vw), 1511(w), 1489(w), 1438(vw), 1404(w), 1352(m), 1327(vs), 1298(w), 1263(s), 1202(vw), 1170(vw), 1159(w), 1125(vw), 1117(vw), 1089(w), 1067(vw), 1046(vw), 1019(vw), 954(vw), 917(vw), 846(vw), 826(vw), 802(w), 781(vw), 741(vw), 717(vw), 646(vw), 624(vw), 601(vw), 525(vw), 498(vw), 464(vw), 441(vw), 404(vw), 360(vw), 319(vw), 259(vw), 225(vw), 186(vw)	1(a)
PR 3	Kremer	1619(m), 1604(w,sh), 1554(w), 1524(vw), 1496(m), 1444(m-s), 1394(m), 1332(vs), 1320(s,sh), 1251(w), 1225(w,sh), 1216(m), 1186(m-s), 1127(m), 1076(w), 986(m), 923(w), 842(m-w), 796(m), 723(m-w), 616(m), 503(w), 479(vw), 454(m-w), 422(vw), 402(vw), 384(w), 340(m-s), 168(w)	1(b)
PY 12	SunChemicals	1661(vw), 1597(vs), 1554(vw), 1517(vw), 1490(vw), 1449(vw), 1399(m), 1320(vw), 1294(w), 1255(w), 1228(vw), 1179(vw), 1140(vw), 1065(vw), 1050(vw), 1001(vw), 952(vw), 917(vw), 871(vw), 817(vw), 718(vw), 661(vw), 623(vw), 613(vw), 515(vw), 475(vw), 449(vw), 407(vw), 365(vw), 330(vw), 308(vw), 284(vw), 256(vw), 204(vw), 183(vw), 125(vw)	2
PY 13	SunChemicals	1673(vw), 1598(vs), 1553(vw), 1522(vw), 1491(vw), 1448(vw), 1399(m-w), 1315(vw), 1287(w), 1258(m-w), 1248(w,sh), 1183(vw), 1144(vw), 1067(vw), 1049(vw), 953(vw), 938(vw), 907(vw), 874(vw), 829(vw), 780(vw), 720(vw), 707(vw), 674(vw), 658(vw), 620(vw), 564(vw), 541(vw), 492(vw), 443(vw), 420(vw), 398(vw), 345(vw), 272(vw), 225(vw), 199(vw), 171(vw), 114(vw)	2
PY 14	SunChemicals	1670(vw), 1597(vs), 1557(vw), 1524(vw), 1481(vw), 1458(vw), 1400(w), 1313(vw), 1287(w), 1258(m), 1180(vw), 1145(vw), 1068(vw), 1049(vw), 954(vw), 918(vw), 798(vw), 769(vw), 709(vw), 659(vw), 623(vw), 539(vw), 512(vw), 477(vw), 444(vw), 422(vw), 396(vw), 344(vw), 280(vw), 203(vw), 172(vw), 120(vw)	2
PY 17	SunChemicals	1668(vw), 1599(vs), 1546(vw), 1518(vw), 1489(vw), 1461(vw), 1436(vw), 1399(m), 1334(vw), 1292(vw), 1268(w), 1256(w), 1183(vw), 1162(vw), 1067(vw), 1049(vw), 953(vw), 918(vw), 832(vw), 794(vw), 712(vw), 665(vw), 618(vw), 508(vw), 453(vw), 409(vw), 349(vw), 268(vw), 215(vw), 176(vw), 124(vw)	2
PY 83	Schmincke, SunChemicals	1659(vw), 1595(vs), 1540(vw), 1523(vw), 1511(vw), 1449(vw), 1399(m), 1333(w), 1289(w), 1253(m), 1218(vw), 1148(vw), 1136(vw), 1067(vw), 1049(vw), 956(vw), 920(vw), 692(vw), 661(vw), 638(vw), 538(vw), 421(vw), 394(vw), 342(vw), 265(vw), 211(vw), 176(vw), 158(vw)	2
PR 49:1	SunChemicals	1617(m), 1602(m-w), 1557(w), 1483(m-s), 1465(m), 1450(w), 1425(m-s), 1413(m-s), 1349(m-s), 1278(vw), 1257(w), 1232(m-w), 1215(m-s,sh), 1206(vs), 1172(vw), 1136(w), 1097(m-w), 1057(vw), 1035(vw), 993(vw), 946(vw), 917(vw), 873(vw), 826(vw), 800(vw), 775(vw), 720(s), 661(vw), 645(w), 604(w), 542(vw), 529(m), 515(vw), 481(vw), 469(w), 411(m-w), 357(w), 343(m-w), 304(vw), 280(vw), 254(vw), 236(vw), 216(vw), 199(vw), 172(vw)	3

CI name	Supplier	Raman band wavenumbers ν/cm^{-1} (between 1800 and 50 cm^{-1})	Fig.
PR 53:1	SunChemicals	1596(m-w), 1571(w,sh), 1552(m), 1482(m), 1451(w), 1401(vs), 1378(w), 1333(m), 1316(w), 1291(vw), 1259(m-w), 1236(vs), 1199(m-s), 1159(vw), 1138(vw), 1095(m), 1040(vw), 993(vw), 978(w), 871(vw), 805(w), 741(vw), 719(w), 667(vw), 630(m-w), 612(m-w), 577(vw), 557(vw), 540(vw), 515(vw), 497(w), 436(w), 426(w,sh), 338(m-w), 311(m-w), 242(vw), 205(w), 173(vw)	3
PR 52:1	SunChemicals	1598(m), 1575(w,sh), 1554(m), 1488(m), 1456(vw), 1440(vw), 1403(vs), 1362(vs), 1336(vw), 1324(vw), 1294(vw), 1265(m-w), 1237(s), 1179(s), 1159(vw), 1106(w), 1045(w), 1020(vw), 961(s), 871(vw), 802(vw), 786(vw), 744(m-w), 718(vw), 711(vw), 668(vw), 653(vw), 627(vw), 599(vw), 562(w), 528(m-w), 463(w), 434(w), 418(vw), 406(vw), 360(m), 346(m,sh), 325(vw), 240(vw), 210(vw), 182(vw), 138(vw)	3
PR 57:1	SunChemicals	1602(m), 1550(vw), 1490(m-s), 1409(vw), 1365(vs), 1336(vw), 1325(vw), 1294(vw), 1265(m-w), 1230(m-w), 1182(m), 1130(w), 1118(vw,sh), 1038(vw), 1020(vw), 964(vw), 888(vw), 876(vw), 822(vw), 785(vw), 746(w), 714(vw), 701(vw), 597(vw), 559(vw), 520(w), 497(w), 466(vw), 417(vw), 362(vw), 335(w), 309(vw), 253(vw), 150(vw)	3
PR 8	Kremer	1673(w), 1572(vw), 1519(vs), 1449(w), 1356(vw), 1296(vw), 1227(w), 1180(w), 1119(w), 825(w), 771(w), 620(m-w), 533(w), 492(m), 421(w), 347(m-s), 329(w), 235(vw), 140(vw)	4
PR 9	Kremer	1604(w), 1579(m-s), 1549(w), 1485(m), 1448(vw), 1362(vs), 1337(w), 1283(m-w), 1257(vw), 1237(m), 1204(vw), 1153(w), 1135(vw), 1108(vw), 1041(w), 1017(vw), 968(w), 853(vw), 807(w), 769(w), 728(w), 665(vw), 642(vw), 609(vw), 565(m-w), 520(vw), 490(w), 448(vw), 432(w), 339(w), 326(vw,sh), 149(w)	4
PR 17	SunChemicals	1610(m), 1592(vw), 1550(w), 1519(vw), 1488(m), 1454(vw), 1425(m-w), 1362(vs), 1319(vw), 1284(w), 1240(m-w), 1204(vw), 1164(w), 1107(w), 1041(vw), 1015(vw), 997(vw), 966(w), 943(vw,sh), 898(vw), 854(vw), 826(vw), 807(vw), 756(w), 727(w), 666(vw), 620(vw), 539(vw), 516(vw), 483(w), 445(vw), 426(w), 401(vw), 363(w), 343(w)	4
PR 22	SunChemicals	1611(m-w), 1590(vw,sh), 1550(w), 1519(vw), 1485(m-w), 1453(w), 1424(m-w), 1362(vs), 1347(w), 1318(w), 1283(m-w), 1267(vw), 1238(m-w), 1206(vw), 1161(w), 1107(w), 998(vw), 966(w), 939(w), 856(vw), 826(vw), 798(vw), 771(vw), 734(w), 665(vw), 623(vw), 548(vw), 528(vw), 512(vw), 476(w), 425(w), 399(vw), 363(w), 342(w), 224(vw), 176(vw)	4
PR 23	SunChemicals	1613(m-w), 1600(w,sh), 1550(w), 1499(vs), 1483(w), 1443(w), 1366(m-s), 1346(vs), 1329(w), 1293(m), 1259(m-w), 1238(m-w), 1172(w), 1160(w), 1108(w), 1078(vw), 1038(vw), 1015(vw), 969(w), 940(w), 837(w), 796(vw), 774(vw), 742(w), 632(w), 610(vw), 496(w), 413(w), 397(w), 370(w), 345(w), 319(vw), 300(vw), 277(vw), 236(vw), 214(vw)	4
PR 112	Schmincke, Kremer	1604(vw), 1578(s), 1551(w), 1482(m), 1460(w), 1448(w,sh), 1423(vw), 1391(m), 1374(m), 1357(vs), 1331(vw), 1281(s), 1258(vw), 1242(w), 1229(m-s), 1204(vw), 1160(m-w), 1108(w), 1061(w), 1014(vw), 967(w), 892(vw), 865(vw), 813(w), 744(w), 728(w), 679(m-w), 615(w), 571(w), 527(m), 467(vw), 442(w), 429(w), 391(vw), 346(m), 296(vw), 279(vw), 245(vw), 150(vw)	4
PR 170	Kremer	1605(m-s), 1593(w,sh), 1549(w), 1512(m-w), 1488(w), 1452(vw), 1423(vw), 1388(w), 1363(vs), 1332(w), 1288(m-w), 1244(w), 1164(m), 1142(vw), 1119(vw), 1047(vw), 1013(vw), 964(m-w), 859(vw), 802(vw), 775(vw), 729(m), 665(vw), 610(vw), 573(w), 537(w), 512(vw), 490(w), 479(vw,sh), 423(w), 371(vw), 331(vw), 266(vw), 236(vw), 208(vw), 188(vw), 146(vw)	4

^a Relative intensities: vs = very strong; s = strong; m-s = medium to strong; m = medium; m-w = medium to weak; w = weak; vw = very weak; sh = shoulder.

Type of azo compound	Structure	Remarks	Examples	Fig.
Mono-azo pigments (Hansa yellow)		Subst. = CH ₃ , OCH ₃ , OC ₂ H ₅ , Cl, Br and/or NO ₂	PY 1, PY 3, PY 65, PY 74	1(a)
β -Naphthol pigments		R ₁ = H, Cl, NO ₂ , CH ₃ , OCH ₃ and/or OC ₂ H ₅ R ₂ = H, Cl, NO ₂ , CH ₃ , OCH ₃ and/or OC ₂ H ₅	PR 3	1(b)
Diazo pigments (diarylide)		Subst. = CH ₃ , OCH ₃ , OC ₂ H ₅ , Cl, Br and/or NO ₂ R = Cl, CH ₃ , OCH ₃ ; R' = H or R' = R' = Cl	PY 12, PY 13, PY 14, PY 17, PY 83	2
Azo pigment lakes: type β -naphthol pigment lakes		Ar = benzene or naphthalene Subst. = CH ₃ , OCH ₃ , OC ₂ H ₅ , Cl, Br, COO ⁻ and/or NO ₂ M ⁿ⁺ = Ca ²⁺ , Mn ²⁺ , Na ⁺ , Ba ²⁺ , ...	PR 49: 1, PR 53: 1	3
Azo pigment lakes: type 2-hydroxy-3- naphthoic acid pigment lakes (BON pigments)		Ar = benzene or naphthalene Subst. = CH ₃ , OCH ₃ , OC ₂ H ₅ , Cl, Br, COO ⁻ and/or NO ₂ M ²⁺ = Ca ²⁺ , Mn ²⁺ , Ba ²⁺ , ...	PR 52: 1, PR 57: 1	3
Naphthol AS pigments		Subst. = CH ₃ , OCH ₃ , OC ₂ H ₅ , Cl, Br, NO ₂ , NHCOCH ₃ , COOCH ₃ , CONHC ₆ H ₅	PR 8, PR 9, PR 17, PR 22, PR 23, PR 112, PR 170	4

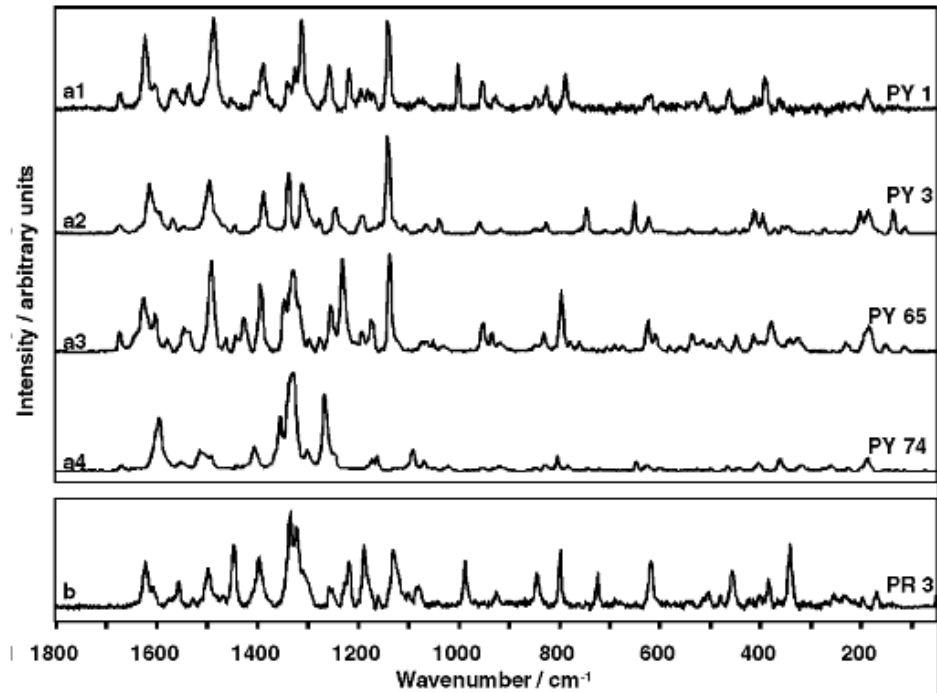


Figure 1. Raman spectra (1800–50 cm⁻¹) of (a) Hansa Yellow pigments and (b) β -naphthol pigment.

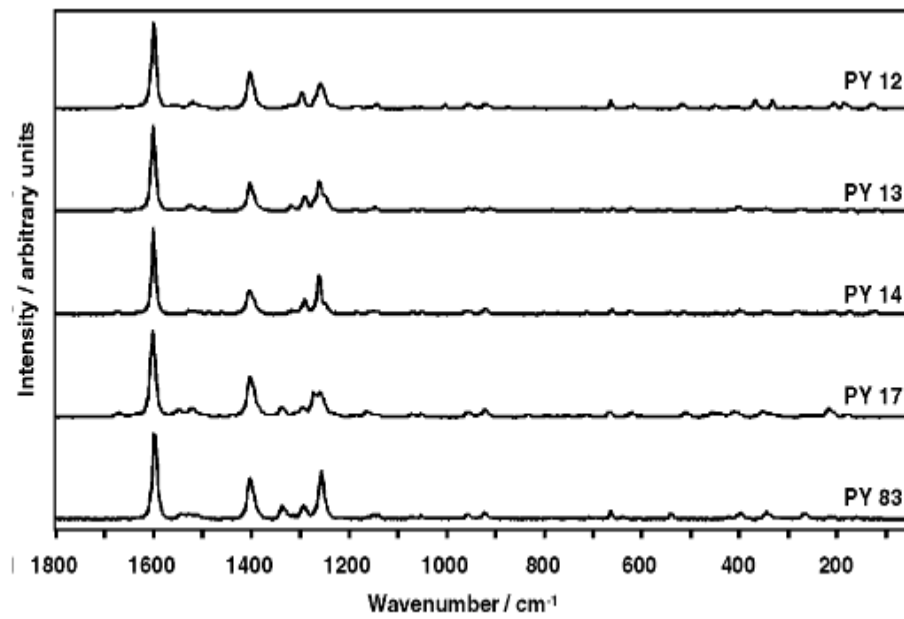


Figure 2. Raman spectra (1800–50 cm⁻¹) of diarylide pigments.

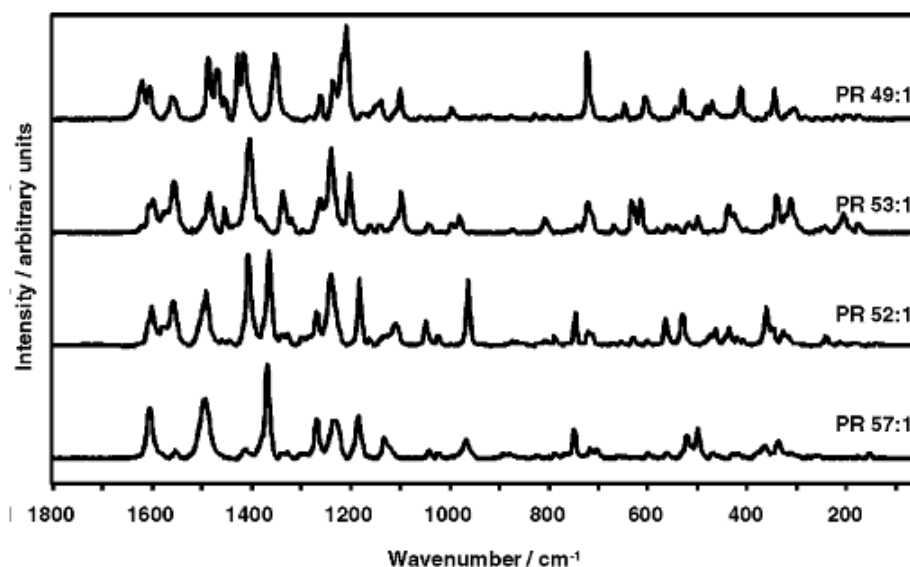


Figure 3. Raman spectra ($1800\text{--}50\text{ cm}^{-1}$) of azo pigment lakes.

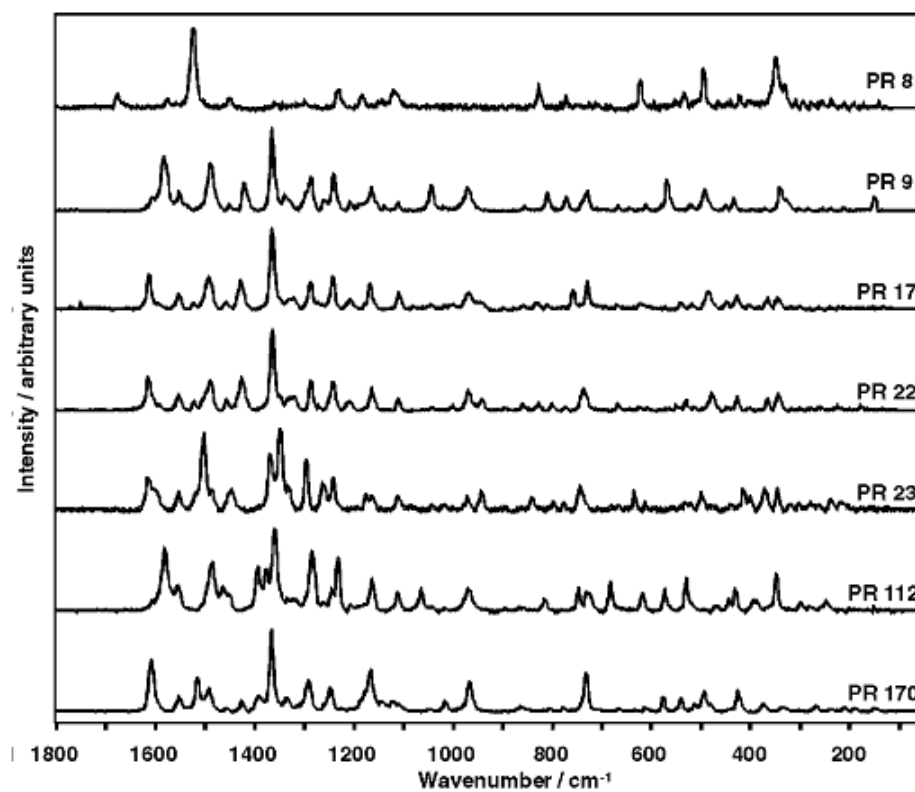


Figure 4. Raman spectra ($1800\text{--}50\text{ cm}^{-1}$) of Naphthol AS pigments.

PŘÍLOHA P III: DATABÁZE RAMANOVÝCH SPEKTER FARMACEUTICKÝCH POMOCNÝCH LÁTEK [39]

Name	Company	Functional category ^a	Figure
Dextrose	Vel	Tablet and capsule diluent, therapeutic agent	1(a)
Lactitol	Danisco	Sweetening agent, tablet and capsule diluent	1(b)
Maltitol	Roquette	Coating agent, diluent	1(c)
Lactose	DMV International	Binding agent, directly compressible tableting excipient	1(d)
Sucrose	Merck	Coating agent, granulating agent	1(e)
Microcrystalline cellulose	Sigma-Aldrich	Absorbent, suspending agent	2(a)
Methylcellulose	Fluka	Coating agent, emulsifying agent	2(b)
Carboxymethylcellulose	Sigma-Aldrich	Stabilizing agent, suspending agent	2(c)
Hydroxypropyl cellulose	Klucel	Coating agent, emulsifying agent	2(d)
Hydroxypropyl methylcellulose	Shin-Etsu	Suspending agent, viscosity-increasing agent	2(e)
Wheat starch	Alpha Pharma	Glidant, tablet and capsule diluent	3(a)
Maltodextrin	Roquette	Coating agent, tablet and capsule diluent	3(b)
Primojel	Avebe	Tablet and capsule disintegrant	3(c)
Tragacanth	Sigma-Aldrich	Suspending agent, viscosity-increasing agent	3(d)
Pectin	Federa	Absorbent, emulsifying agent	3(e)
Propylene glycol	Merck	Antimicrobial preservative, disinfectant	4(a)
Erythritol	Cerestar	Sweetening agent, tablet and capsule diluent	4(b)
Xylitol	Roquette	Antimicrobial preservative, coating agent	4(c)
Mannitol	Cerestar	Diluent, sweetening agent	4(d)
Sorbitol	Cerestar	Humectant, plasticizer	4(e)
Alginic acid	Sigma-Aldrich	Stabilizing agent, suspending agent	5(a)
Glycine	Acros	Bulking agent in freeze-dried formulations ^b	5(b)
Magnesium stearate	Sigma-Aldrich	Tablet and capsule lubricant	5(c)
Sodium acetate	Federa	Antimicrobial preservative, buffering agent	5(d)
Sodium benzoate	Sigma-Aldrich	Antimicrobial preservative, tablet and capsule lubricant	5(e)
Arachis oil	Delhaize	Oleaginous vehicle, solvent	6(a)
Lubritab	Mendell	Tablet and capsule lubricant, tablet binder	6(b)
Dibutyl sebacate	BASF	Plasticizer	6(c)
Triacetin	Sigma-Aldrich	Humectant, plasticizer	6(d)
Eudragit E 100	Rohm Pharma	Film former, tablet binder	6(e)
Eudragit RL 100	Rohm Pharma	Film former, tablet binder	6(f)
Calcium phosphate	Sigma-Aldrich	Tablet and capsule diluent	7(a)
Talc	Pleuger	Anticaking agent, glidant	7(b)
Anatase (TiO ₂)	Sennlier Paris	Coating agent, pigment	7(c)
Rutile (TiO ₂)	UCB	Coating agent, pigment	7(d)
Calcium carbonate	Merck	Buffering agent, coating agent	8(a)
Magnesium carbonate	Riedel-de-Haen	Absorbent, antacid	8(b)
Sodium bicarbonate	RPL	Alkalinizing agent, therapeutic agent	8(c)
Calcium sulfate	Fluka	Tablet and capsule diluent	8(d)
Gelatin	Merck	Coating agent, film-former	9(a)
Macrogol 4000	Fagron	Ointment base, plasticizer	9(b)
Polyvinyl pyrrolidone	Sigma-Aldrich	Disintegrants, dissolution aid	9(c)
Sodium lauryl sulfate	Alpha Pharma	Anionic surfactant, detergent	9(d)

Name	Raman bands (cm ⁻¹)	Time & acc ^a	Figure
Dextrose	232(w), 288(w), 363(w), 396(m), 404(s), 422(w), 439(w), 539(vs), 653(w), 770(w), 841(m), 913(w), 1020(w), 1053(w), 1073(m), 1106(w), 1119(w), 1147(w), 1272(w), 1331(w), 1343(w), 1458(w)	3 × 30 s	1(a)
Lactitol	249(m), 299(w), 327(w), 356(vs), 405(w), 426(w), 475(vs), 544(w), 614(w), 857(w), 878(m), 895(m), 929(m), 945(w), 1010(m), 1025(m), 1045(w), 1062(m), 1087(m), 1121(m), 1145(w), 1236(w), 1271(w)	5 × 120 s	1(b)
Maltitol	239(w), 302(m), 318(w), 373(s), 397(w), 414(s), 431(vs), 474(w), 507(vs), 541(m), 574(s), 635(w), 709(w), 743(w), 784(w), 844(m), 872(s), 900(s), 910(vs), 929(m), 969(w), 986(s), 1017(m), 1039(s), 1071(s), 1097(m), 1123(s), 1147(m), 1206(w), 1251(w), 1298(w), 1332(m), 1340(m), 1365(m), 1399(w), 1433(w), 1458(m)	5 × 60 s	1(c)
Lactose	256(w), 353(vs), 374(s), 395(m), 474(m), 551(w), 629(w), 847(m), 873(m), 912(w), 950(w), 1015(w), 1037(w), 1049(w), 1083(m), 1117(w), 1139(w), 1258(w), 1323(w), 1344(w), 1377(w)	5 × 120 s	1(d)
Sucrose	283(w), 314(w), 363(m), 400(vs), 441(m), 473(w), 495(w), 523(m), 553(m), 582(w), 639(m), 847(s), 867(w), 908(w), 920(w), 940(w), 1011(w), 1035(w), 1102(w), 1122(w), 1160(w), 1237(w), 1259(w), 1460(w)	20 × 30 s	1(e)
Microcrystalline cellulose	343(w), 378(s), 435(m), 457(m), 517(m), 894(w), 1093(vs), 1120(s), 1152(m), 1335(m), 1378(m), 1473(w)	10 × 30 s	2(a)
Methylcellulose	890(m), 943(s), 1024(m), 1118(vs), 1149(s), 1265(w), 1363(s), 1450(s)	15 × 60 s	2(b)
Carboxymethylcellulose	719(m), 804(w), 911(s), 1098(vs), 1265(m), 1325(s), 1372(s), 1408(s)	15 × 60 s	2(c)
Hydroxypropyl cellulose	848(vs), 923(m), 1086(s), 1124(s), 1249(m), 1361(s), 1454(vs)	15 × 60 s	2(d)
Hydroxypropyl methylcellulose	495(w), 637(w), 709(w), 829(m), 907(m), 944(m), 1008(m), 1119(s), 1152(m), 1208(w), 1263(w), 1366(vs), 1452(s), 1739(w)	15 × 60 s	2(e)
Wheat starch	302(w), 359(w), 409(w), 439(w), 477(vs), 576(w), 867(w), 940(m), 1050(w), 1081(m), 1126(m), 1261(w), 1338(w), 1379(w), 1458(w)	15 × 60 s	3(a)
Maltodextrin	319(w), 355(w), 402(w), 438(m), 477(vs), 575(w), 849(m), 938(m), 1040(m), 1079(m), 1119(m), 1259(w), 1333(m), 1381(m), 1456(w)	20 × 60 s	3(b)
Primojel	229(w), 303(w), 355(w), 439(w), 476(vs), 574(w), 864(m), 940(m), 1053(m), 1077(m), 1122(m), 1260(w), 1339(m), 1378(m), 1456(w)	20 × 30 s	3(c)
Tragacanth	260(w), 336(w), 368(m), 419(vs), 510(s), 561(m), 589(w), 770(w), 854(m), 913(m), 923(m), 1020(w), 1055(w), 1071(m), 1096(w), 1124(m), 1157(w), 1226(w), 1249(w), 1327(m), 1358(w), 1384(w), 1423(w), 1452(w)	30 × 30 s	3(d)
Pectin	452(m), 487(w), 550(w), 719(w), 836(m), 876(m), 972(w), 1073(s), 1261(m), 1355(vs), 1454(m)	15 × 60 s	3(e)
Propylene glycol	383(w), 522(m), 802(m), 838(vs), 921(w), 1045(w), 1079(w), 1457(w)	5 × 30 s	4(a)
Erythritol	246(w), 265(w), 384(w), 487(m), 698(vs), 862(m), 874(s), 918(s), 1029(w), 1040(w), 1107(m), 1125(m), 1236(w), 1414(w), 1468(w)	5 × 120 s	4(b)
Xylitol	238(w), 318(w), 353(vs), 424(m), 459(w), 851(s), 882(m), 913(w), 1000(w), 1056(m), 1069(m), 1089(m), 1105(m), 1276(w), 1313(w), 1330(w), 1459(m)	5 × 60 s	4(c)
Mannitol	240(w), 284(w), 365(w), 473(m), 490(w), 515(w), 644(w), 784(w), 872(vs), 1034(m), 1114(w), 1130(w), 1228(w), 1360(w), 1456(w)	5 × 120 s	4(d)
Sorbitol	246(w), 263(w), 342(w), 415(w), 478(w), 499(w), 642(w), 773(w), 876(vs), 936(w), 1054(m), 1091(w), 1129(w), 1250(w), 1325(w), 1369(w), 1446(w)	5 × 60 s	4(e)
Alginic acid	813(s), 890(m), 956(m), 1093(m), 1346(vs), 1409(vs)	15 × 60 s	5(a)
Glycine	357(w), 500(w), 599(w), 695(w), 890(vs), 1032(w), 1322(m), 1406(w), 1436(w)	15 × 30 s	5(b)
Magnesium stearate	888(w), 945(w), 1061(s), 1102(w), 1128(s), 1294(vs), 1437(s), 1458(m)	5 × 50 s	5(c)
Sodium acetate	656(w), 928(vs), 1414(w)	5 × 30 s	5(d)
Sodium benzoate	612(w), 676(w), 843(m), 1003(vs), 1028(w), 1156(w), 1180(w), 1434(w), 1601(w)	10 × 30 s	5(e)
Arachis oil	401(w), 477(w), 722(w), 844(m), 867(m), 908(w), 968(w), 1061(m), 1079(m), 1117(w), 1261(m), 1298(m), 1436(vs), 1653(vs), 1743(w)	20 × 60 s	6(a)
Lubritab	888(w), 1059(s), 1102(w), 1126(s), 1172(w), 1294(vs), 1415(w), 1438(m), 1461(m)	15 × 60 s	6(b)
Dibutyl sebacate	275(w), 527(w), 804(vs), 837(vs), 883(s), 1057(m), 1130(s), 1239(m), 1280(vs), 1387(m), 1468(vs)	20 × 30 s	6(c)
Triacetin	230(m), 425(w), 628(vs), 832(m), 858(m), 890(s), 991(w), 1013(w), 1053(w), 1098(w), 1312(w), 1366(w), 1437(w), 1736(m)	5 × 30 s	6(d)
Eudragit E 100	234(w), 361(w), 482(w), 555(w), 601(vs), 778(w), 817(s), 878(w), 963(m), 1121(w), 1153(w), 1231(w), 1444(m), 1723(w)	20 × 30 s	6(e)
Eudragit RL 100	362(m), 483(w), 552(w), 598(m), 715(m), 809(vs), 852(m), 962(w), 985(w), 1112(w), 1450(w), 1726(w)	20 × 30 s	6(f)
Calcium phosphate	390(m), 416(s), 557(m), 571(m), 587(m), 896(m), 983(vs), 1090(w), 1128(w)	5 × 30 s	7(a)
Talc	361(s), 466(w), 550(m), 675(vs), 1050(w), 1229(m), 1260(m), 1385(w), 1412(w)	50 × 60 s	7(b)

Anatase (TiO ₂)	395(m), 513(m), 636(vs)	1 × 30 s	7(c)
Rutile (TiO ₂)	234(w), 446(vs), 609(s)	1 × 30 s	7(d)
Calcium carbonate	281(m), 711(w), 1084(vs)	1 × 30 s	8(a)
Magnesium carbonate	1117(vs)	3 × 30 s	8(b)
Sodium bicarbonate	224(w), 683(w), 1043(vs), 1264(w)	10 × 30 s	8(c)
Calcium sulfate	1133 (w), 1005(vs)	20 × 30 s	8(d)
Gelatin	318(vs), 809(w), 854(m), 915(m), 998(m), 1029(w), 1098(w), 1246(m), 1338(s), 1384(s), 1448(s), 1663(m)	40 × 30 s	9(a)
Macrogol 4000	277(m), 360(m), 533(w), 579(w), 842(vs), 858(m), 1060(m), 1123(w), 1138(m), 1228(m), 1277(s), 1393(w), 1444(w), 1476(m)	10 × 30 s	9(b)
Polyvinyl pyrrolidone	362(w), 553(m), 606(w), 645(w), 753(s), 850(m), 892(m), 932(vs), 999(w), 1022(w), 1073(w), 1109(w), 1225(m), 1272(w), 1307(w), 1340(w), 1369(m), 1423(s), 1454(m), 1490(w), 1662(w)	20 × 30 s	9(c)
Sodium lauryl sulfate	404(w), 418(w), 595(w), 633(w), 833(m), 867(w), 887(m), 1060(s), 1082(vs), 1126(s), 1294(s), 1368(w), 1433(s), 1449(m)	10 × 30 s	9(d)

w, weak; m, medium; s, strong; mw, medium weak; vs, very strong.

The reference spectra can be requested at <http://www.analchem.ugent.be/Raman>.

^a The acquisition time in seconds and number of accumulations for each reference product are mentioned.

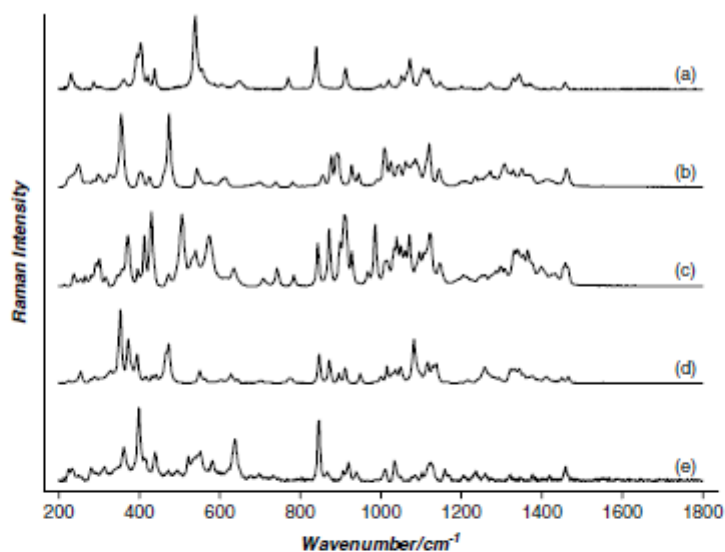


Figure 1. Raman spectra of mono- and disaccharides: (a) dextrose, (b) lactitol, (c) maltitol, (d) lactose, (e) sucrose.

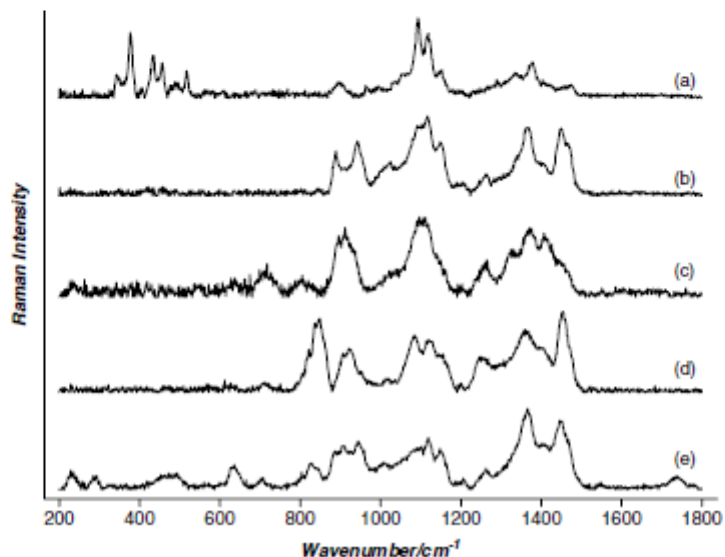


Figure 2. Raman spectra of polysaccharides: (a) microcrystalline cellulose, (b) methylcellulose, (c) carboxymethylcellulose, (d) hydroxypropyl cellulose (HPC), (e) hydroxypropyl methylcellulose (HPMC).

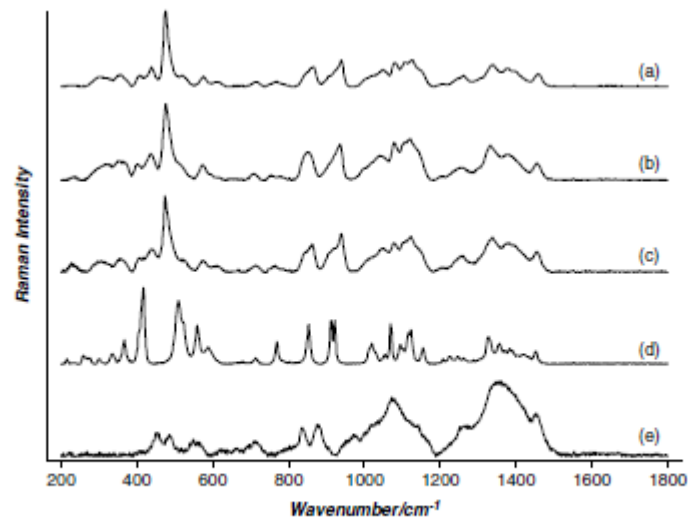


Figure 3. Raman spectra of polysaccharides: (a) wheat starch, (b) maltodextrin, (c) primojel, (d) tragacanth, (e) pectin.

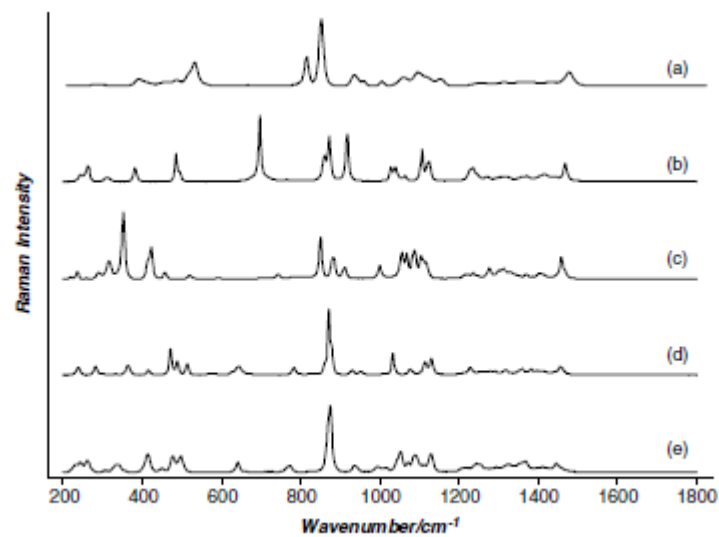


Figure 4. Raman spectra of polyalcohols: (a) propylene glycol, (b) erythritol, (c) xylitol, (d) mannitol, (e) sorbitol.

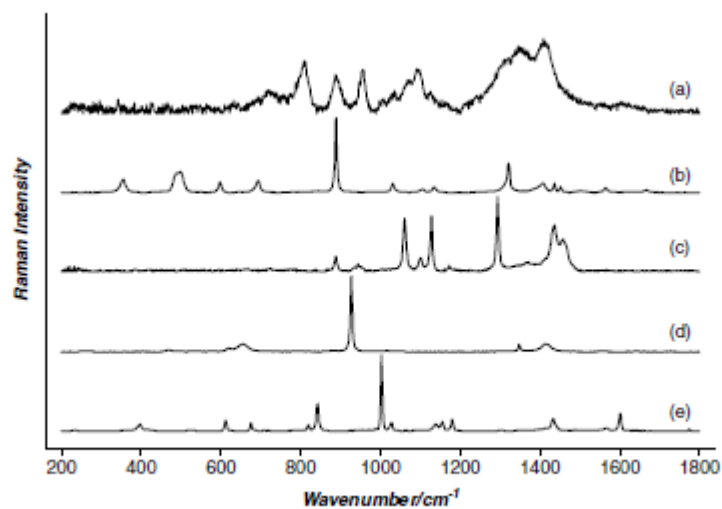


Figure 5. Raman spectra of carboxylic acids and salts: (a) alginic acid, (b) glycine, (c) magnesium stearate, (d) sodium acetate, (e) sodium benzoate.

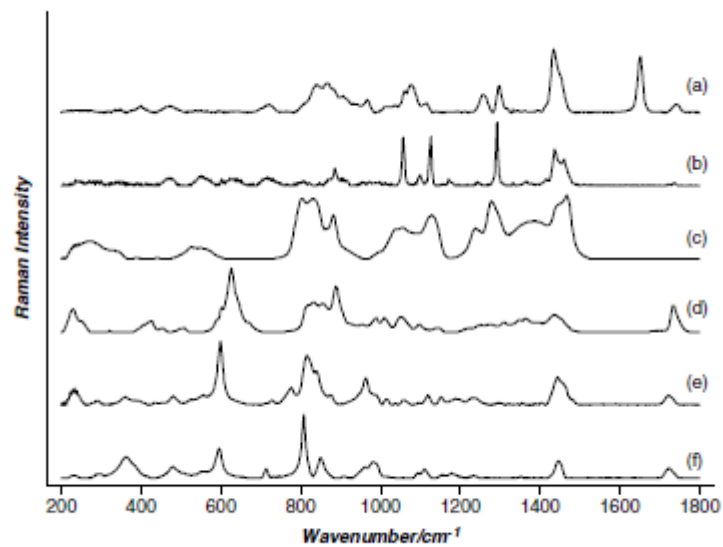


Figure 6. Raman spectra of esters: (a) arachis oil, (b) lubritab, (c) dibutyl sebacate, (d) triacetin, (e) Eudragit E100, (f) Eudragit RL100.

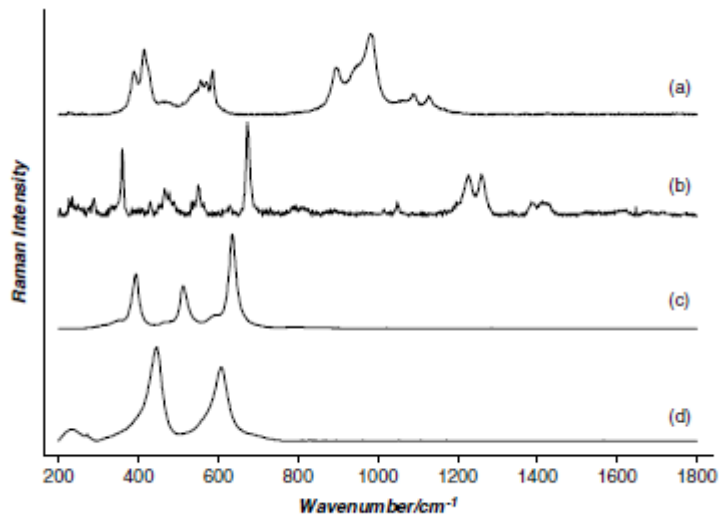


Figure 7. Raman spectra of inorganic substances: (a) calcium phosphate, (b) talc, (c) anatase (TiO_2), (d) rutile (TiO_2).

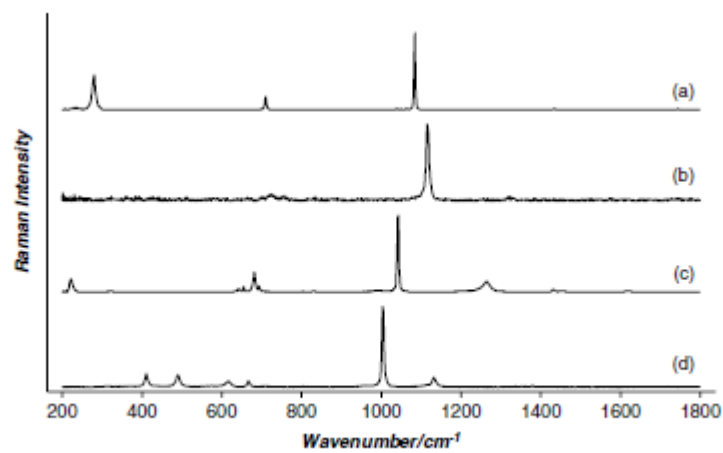


Figure 8. Raman spectra of inorganic substances: (a) calcium carbonate, (b) magnesium carbonate, (c) sodium bicarbonate, (d) calcium sulfate.

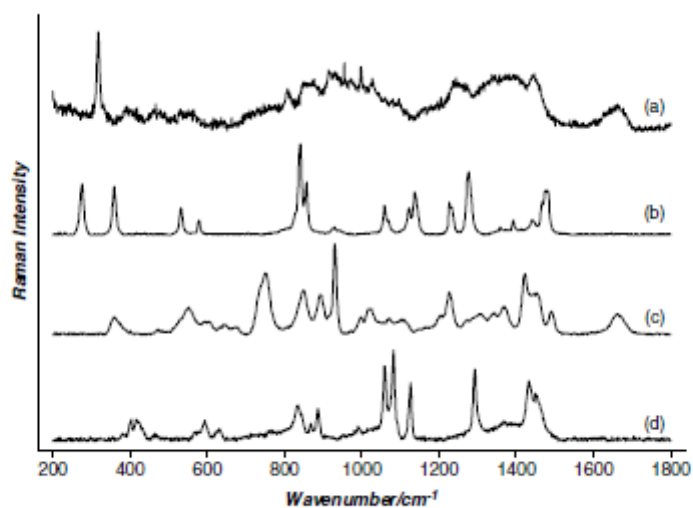


Figure 9. Raman spectra of other substances: (a) gelatin, (b) macrogol 4000, (c) polyvinyl pyrrolidone (PVP), (d) sodium lauryl sulfate.

PŘÍLOHA P IV: DATABÁZE PIGMENTŮ – EXTERNÍ SOUBORY