

# Raman spektroskopi - et vindue til den molekylære verden

“Optical Sensors Based on Raman Effects” – Ph.D. project by K. D. Jernshøj

Molekyler, der er atomer bundet sammen af elektriske kræfter, findes overalt i vore omgivelser og i os selv. Der findes et næsten uendeligt antal forskellige molekyler, lige fra de mindste, såsom vandmolekylet, til de allerstørste forskellige typer proteinmolekyler. Det protein, der f.eks. giver vores blod den røde farve, er proteinet hæmoglobin. Den røde farve skyldes tilstedeværelsen af jern visse steder i proteinet, som bevirker, at elektronerne i hæmoglobin absorberer energi i den grønne del af lyset i solens spektrum. Udover hæmoglobin indeholder blod mange forskellige proteiner i små mængder, som hver har deres biofysiske /biokemiske funktion. Et forhøjet indhold af visse proteiner kan være et signal om, at man lider af en eller anden sygdom eller har en bakteriel infektion. Forskellige analyser af en blodprøve udgør derfor en vigtig informationskilde for lægen. Et eksempel på molekyler, som man skal være meget forsigtig med at anvende, er den store gruppe af pesticider, der anvendes i sprøjtemidler indenfor landbrug og frugtavl for at bekæmpe forskellige skadedyr og sygdomme. Mange af disse er skadelige for mennesket og der er store begrænsninger for, hvordan de anvendes og mange er simpelthen blevet forbudt. Molekylernes form (eller konfiguration) samt ændringerne i denne er bestemmende for deres egenskaber samt deres biofysiske funktion. Det er derfor vigtigt, at have målemetoder, der uden at påvirke eller i værste fald ødelægge molekylerne, kan give information om molekylernes konfiguration og ændringer i konfigurationen samt metoder, der f.eks. kan måle tilstedeværelsen af et bestemt uønsket pesticid på overfladen af en tomat. Med andre ord værktøjer eller sensorer, der kan gøre det muligt at identificere et givet molekyle eller ”observere” molekylers opførsel i deres naturlige omgivelser. Raman spektroskopi er et sådant værktøj eller sagt anderledes Raman spektroskopi fungerer som et vindue til den molekylære verden. I Raman spektroskopi studeres populært sagt, farveskiftet af lyset spredt fra prøven, f. eks. en tomat. Dette farveskift udgør unik information, man kunne sige en strekkode, om de molekylære forbindelser, der findes på overfladen eller i prøven. Dette molekylære signal er imidlertid meget svagt og forsøges derfor ofte forstærket på forskellig vis. I ph.d.-projektet udforskes overfladeforstærket Raman spektroskopi, hvor det er muligt at få en meget stor forstærkning, hvis molekylet er bundet til en nano struktureret guld- eller sølvoverflade. I ph.d. projektets første del er der gennemført teoretiske studier af overfladeforstærket Raman spredning (SERS) med fokus på den opnåelige molekylære information. Det er vist, at den store forstærkning sker på bekostning af det molekylære informationsindhold i Raman spektrene med mindre, at de nano strukturerede overflader designes med henblik på at opnå både høj forstærkning og informationsindhold. Projektets anden del omfatter teoretiske studier af resonans Raman spredning på frie molekyler, hvor informationen, som er givet ved molekylernes ændring af polariseringen af det indkommende lys, kombineres med multivariat analyse af de polariserede Raman data. Det vises bl.a., at en biomolekylær aggregering kan påvises ved multivariat analyse af de polariserede data, hvilket har stor betydning i studiet af hæmoglobin molekylers aggregering i røde blodlegemer. Denne proces er afgørende for de røde blodlegemers funktion. Projektets tredje del omfatter eksperimentelle studier af forekomsten af pesticider ved anvendelse af et bærbart Raman spektrometer og overfladeforstærket Raman spektroskopi. Det har været muligt, at konstatere pesticidets tilstedeværelse ved anvendelse af omtalte spektrometer samt dertil designede nano strukturerede sølv overflader. En videreudvikling af denne teknik vil i nær fremtid blive anvendt i forskningsprojektet ”Bæredygtig fremtid for dansk konsumfrugt”, hvor målet er en ikke-destruktiv, on-site kortlægning af pesticid rester på frugt og grønt.