

где J_α ($\alpha=x, y, z$) являются компонентами оператора углового момента, определённого в молекулярно-фиксированной системе координат; $J_{xy}^2 = J_x^2 - J_y^2$; [..., ...]₊ обозначает антикоммутатор; E является центром полосы (колебательная энергия); A^v , B^v и C^v - вращательные постоянные, связанные с данным колебательным состоянием (v); Δ_K , Δ_{JK} , Δ_J и остальные параметры являются параметрами центробежного искажения различных порядков.

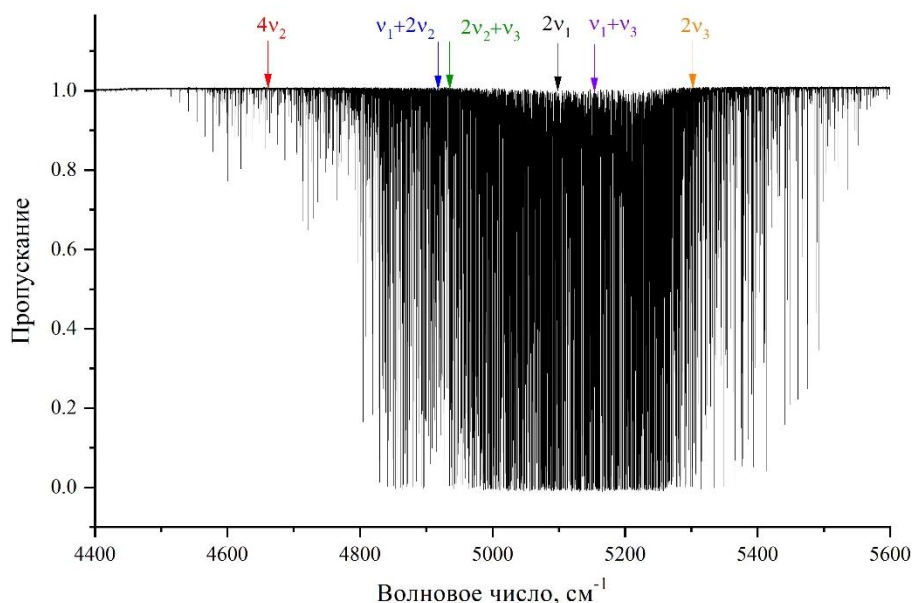


рис.1. Экспериментально зарегистрированный спектр в диапазоне 4400 – 5600 см^{-1} .

Интерпретация переходов была выполнена методом комбинационных разностей. По результатам анализа зарегистрированного спектра нами было проинтерпретировано 428 переходов, принадлежащих исследуемой полосе $4v_2$. Вращательные уровни основного колебательного состояния были рассчитаны с параметрами, взятыми из работы [5]. Максимальные значения квантовых чисел J и K_a для найденных в спектре линий равны 16 и 8. В результате решения обратной спектроскопической задачи был получен набор спектроскопических параметров.

Работа финансировалась за счет гранта РФФИ № 19-32-90069.

Список публикаций:

- [1] Bykov A. D., Lopasov V. P., Makushkin Yu. S., Sinitsa L. N., Ulenikov O. N., Zuev V. E. // *J. Mol. Spectrosc.* 1982. V. 94. P. 1-27.
- [2] Ulenikov O. N., He S. -G., Onopenko G. A., Bekhtereva E. S., Wang X. -H., Hu S. -M., Lin H., Zhu Q. -S. // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 204. P. 216-225.
- [3] Watson J. K. G. // *J. Chem. Phys.* 1967. V. 46. P. 1935-1949.
- [4] Flaud J. M., Perrin A., Salah L. M., Lafferty W. J., Guelachvili G. // *J. Mol. Spectrosc.* 1993. V. 160. P. 272-278.
- [5] Camy-Peyret C., Flaud J. -M., Lechuga-Fossat L., Johns J. W. C. // *J. Mol. Spectrosc.* 1985. V. 109. P. 300-333.

Исследование перекисного окисления аскорбиновой кислоты методом оптической спектроскопии

Чибинева Екатерина Сергеевна

Волгоградский государственный университет

Куценко Светлана Анатольевна, к.ф.-м.н.

chibineva2017@mail.ru

Известно, что аскорбиновая кислота, или витамин С легко окисляется кислородом воздуха. Особенно неустойчивы растворы этого соединения. Разработка методов повышения стабильности лекарственных препаратов на основе аскорбиновой кислоты и исследование процессов её окисления важная и актуальная задача. В данной работе приведены результаты исследования перекисного окисления аскорбиновой кислоты методом оптической спектроскопии.

В процессе реакции перекисного окисления: $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{C}_6\text{H}_6\text{O}_6$ восстанавливается кислород: $2\text{O}^- + 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{O}^{2-}$, окисляется углерод: $2\text{C}^+ - 2\text{e}^- \rightarrow 2\text{C}^{2+}$, и образуется дегидроаскорбиновая кислота, которая в

дальнейшем также распадется [1]. Изменение структуры молекул приводит к изменению спектра поглощения их растворов.

Экспериментально исследованы изменения спектров поглощения аскорбиновой кислоты в процессе перекисного окисления. Исследования проводились на двухканальном автоматизированном спектральном комплексе на базе монохроматора МДР-23. Измерения были выполнены в следующих условиях: объем кюветы $V_k=5$ мл, длина $l=10$ мм. Химически чистая аскорбиновая кислота растворялась в дистиллированной воде. Измерялись спектры пропускания водных растворов аскорбиновой кислоты и этих же растворов с добавлением перекиси водорода. В результате обработки спектров пропускания получены зависимости показателей поглощения растворов от длины волны излучения с учётом френелевских потерь на отражение от стенок кюветы и спектра пропускания источника. Изменение спектров представлено на рис. 1. Из рисунка видно, что при добавлении к водному раствору аскорбиновой кислоты перекиси водорода появляется полоса поглощения в области 208 нм, величина максимума которой увеличивается с ростом концентрации перекиси водорода.

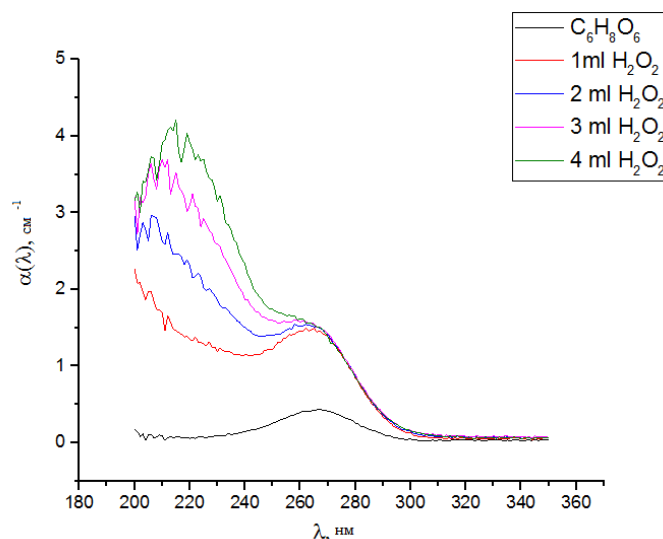


рис.1 УФ-спектр поглощения 0,0008% раствора аскорбиновой кислоты с добавлением перекиси водорода.

Электронные спектры этих же растворов были рассчитаны с использованием пакета программ для квантовохимических расчётов.

На рис. 2 и рис. 3 показаны электронный спектр водного раствора перекиси водорода и водного раствора аскорбиновой кислоты и наложенные на них экспериментальные спектры поглощения.

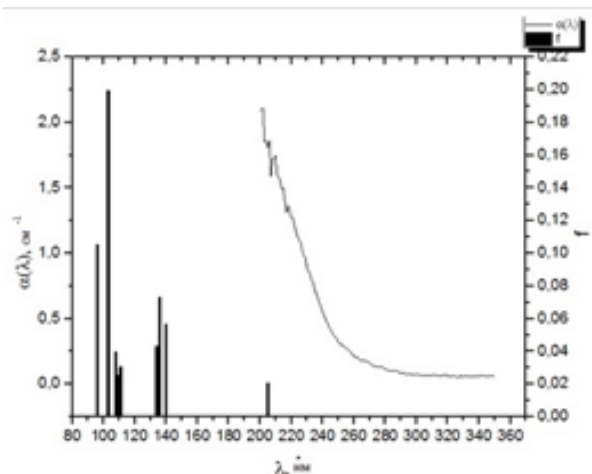


рис.2.Электронный спектр водного раствора перекиси водорода.

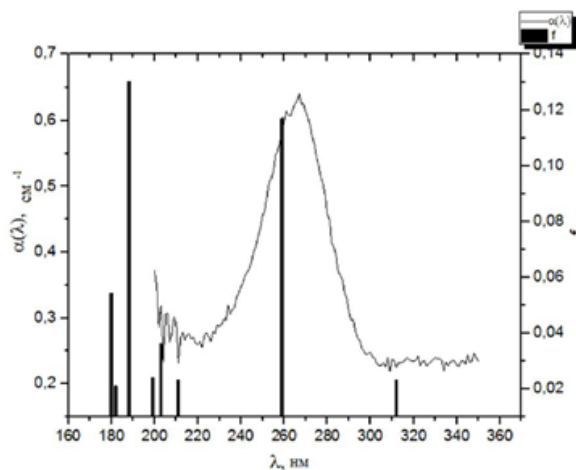


рис.3.Электронный спектр водного раствора аскорбиновой кислоты.

Результаты численного исследования подтвердили, что при превращении аскорбиновой кислоты в дегидроаскорбиновую, изменяется ее электронный спектр: наиболее интенсивная полоса на длине волны 260 нм смещается в область меньших длин волн, появляется интенсивная линия на 208 нм, свидетельствующая об образовании 2,3-дикето-L-гулоновой кислоты.

Таким образом, методы спектроскопии поглощения могут быть использованы для контроля процессов окисления растворов аскорбиновой кислоты и разработки способов повышения стабильности препаратов, содержащих аскорбиновую кислоту [2].

Список публикаций:

[1] Девис М., Остин Дж., Патридж Д. // Витамин С: Химия и биохимия, М.: Мир, 1999.с. 179.

[2] Danyeva J.S., Kutsenko S.A. Changes in the spectral characteristics of preparations containing ascorbic acid with the addition of stabilizers. // Proc. SPIE 11065, Saratov Fall Meeting 2018: Optical and Nano-Technologies for Biology and Medicine, Saratov, 2018.

Метод определения параметров анизотропии поляризационных систем

Чупин Илья Александрович

Бибикова Эвелина Анатольевна^{1,2}, Кундикова Наталия Дмитриевна^{1,2}

¹Институт электрофизики УрО РАН

²Южно-Уральский государственный университет

Бибикова Эвелина Анатольевна, к.ф.-м.н.

hh.hghg@mail.ru

Любая поляризационная среда или система по своим поляризационным свойствам эквивалентна системе из четырех последовательно расположенных простейших элементов [1]: вращателя плоскости поляризации (CP), линейного фазосдвигающего элемента (LP), циркулярного (CA) и линейного (LA) поляризаторов. В результате такая среда однозначно характеризуется шестью эффективными параметрами анизотропии: линейным фазовым сдвигом Δ , азимутом медленной оси линейного фазосдвигающего элемента α , коэффициентом линейного дихроизма P , коэффициентом циркулярного дихроизма R , оптической активностью ϕ и азимутом оси пропускания θ линейного поляризатора. Определение шести эффективных параметров позволит получить полную информацию об анизотропных свойствах конкретной среды или поляризационной системы, и это в свою очередь даст возможность идентифицировать ее, а также найти закономерности и провести сравнительный анализ анизотропных свойств сред различной природы.

В настоящее время поляризационные методы исследования материалов нашли широкое применение в различных областях науки и техники, благодаря неинвазивности методики и точности полученных результатов.

Целью данной работы явилось разработка простого метода определения эффективных параметров анизотропии поляризационной среды.

Предлагаемый метод является по существу поляриметрическим. Суть его заключается в следующем. Свет от когерентного источника распространяется через поляризатор, исследуемую среду и анализатор. Мощность света на выходе измерительной схемы определяется при различных ориентациях осей пропускания поляризатора γ и анализатора β . Выберем произвольную систему координат и опишем преобразование поляризации света через такую схему на основе формализма матриц Джонса, представленная формулой (1):

$$\mathbf{T}^{\text{AN}}(\gamma) \times \mathbf{T}^{\text{SR}} \times \mathbf{J}_0(\beta) = \mathbf{J}_{\text{out}} \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{T}^{\text{AN}}$ – матрица Джонса анализатора, выражающаяся формулой (2):

$$\mathbf{T}^{\text{AN}} = \begin{pmatrix} \cos^2 \gamma & \cos \gamma \sin \gamma \\ \cos \gamma \sin \gamma & \sin^2 \gamma \end{pmatrix} \quad (2)$$

$\mathbf{J}_0$ – вектор-столбец прошедшего через поляризатор линейно поляризованного излучения с плоскостью поляризации, ориентированной под углом β к оси OX , определяемый по формуле (3):

$$\mathbf{J}_0 = \begin{pmatrix} \cos \beta \\ \sin \beta \end{pmatrix}. \quad (3)$$

$\mathbf{J}_{\text{out}}$ – вектор-столбец выходного излучения, представленный формулой (4):

$$\mathbf{J}_{\text{out}} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (4)$$