

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ДЛЯ АНАЛИЗА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Боханцева Е.В.<sup>1</sup>, Бобровский А.П.<sup>1</sup>, Михтеева Е.Ю.<sup>1</sup>, Яковлева Т.Ю.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный гидрометеорологический университет» Санкт-Петербург, Россия, e.bokhantseva@mail.ru

**Аннотация.** Статья посвящена разработке физико-химических методов обнаружения органических кристаллов полифенолов, являющихся загрязнителями окружающей среды. В качестве метода исследования была выбрана спектроскопия комбинационного рассеяния света в терагерцовом диапазоне частот. Спектральный анализ показал, что при механическом измельчении органических кристаллов (полифенолов) обнаружены линии комбинационного рассеяния света в терагерцовом диапазоне. Данные линии могут подтверждать взаимодействие кислородсодержащих анионов с поверхностными дефектами кристаллической решетки веществ, что свидетельствует о формировании комплексных дефектов кристаллических структур.

Ключевые слова: физико-химические методы, метод комбинационного рассеяния света, спектральный анализ, кристаллическая решетка, органические кристаллы (полифенолы), идентификация.

Физико-химические методы позволяют определять свойства веществ, не прибегая к классическим приемам. С целью контроля оптических свойств органических кристаллов полифенолов был выбран метод комбинационного рассеяния света в терагерцовом диапазоне частот.

Исследования спектров комбинационного рассеяния полифенолов выполнены на аналитической системе OPTEC-785TRS-1800, разработанной в АО «ОПТЭК» (СПб) и представляющей собой переносной прибор в одном блоке. Подготовленный образец освещается монохроматическим светом, при этом на дисплее прибора графически регистрируется спектр комбинационного рассеяния. Полученный спектр вещества позволяет проводить его идентификацию с использованием встроенных в прибор спектральных баз данных.

Из обработанных веществ наиболее значимые показания дали бензойная кислота; 1,3,5-тригидроксибензойная кислота (флороглицинол) и 1,2,3-гидроксибензол (пирогаллол А). Так у бензойной кислоты после измельчения вещества пик, находящийся в районе  $27,39 \text{ см}^{-1}$ , уменьшился по значению, остальные же пики заметно увеличили свои значения, при этом не происходило их смещений вправо или влево. Пики, находящиеся в точках  $43,04 \text{ см}^{-1}$  и  $89,69 \text{ см}^{-1}$  стали более резко выраженными, а пик, находящийся в точке  $110,94 \text{ см}^{-1}$ , наоборот, принял более пологий вид. При внесении измельченного вещества в поле постоянного магнита все смещения происходили в тех же точках, не меняя свои местоположения по длинам волн. В результате исследования обнаружено появление отсутствующих ранее линий комбинационного рассеяния света в терагерцовом диапазоне, при механическом измельчении органических кристаллов (полифенолов). Выявленные линии могут быть отнесены к вращательным и трансляционным переходам, которые отражают факт взаимодействия кислородсодержащих анионов с поверхностными дефектами кристаллической решетки веществ. Данные линии могут рассматриваться, как метод контроля дефектов кристаллических структур.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность генеральному директору АО «ОПТЭК» Челибанову В.П. и сотрудникам фирмы за предоставленную

возможность ознакомиться с работой аналитического оборудования и принять участие в изучении оптических свойств веществ в различном агрегатном состоянии.

### Литература

1. Полуботко А.М., Челибанов В.П. К теории эффекта первого слоя в поверхностно усиленной спектроскопии. Оптика и спектроскопия. 2015. Т. 119. № 4. С. 643-644.
2. Полуботко А.М., Челибанов В.П. Теория поверхностно усиленного гиперкомбинационного рассеяния (обзор). Оптика и спектроскопия. 2016. Т. 120. № 1. С. 99-123.

## USING THE COMBINATION SCATTERING LIGHT METHOD FOR ANALYSIS OF CRYSTALLINE STRUCTURES

**Bokhantseva E.V.<sup>1</sup>, Bobrovsky A.P.<sup>1</sup>, Mikhteeva E.Y.<sup>1</sup>, Yakovleva T.Y.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> – *Federal State Educational Institution of Higher Education "Russian State Hydrometeorological University" St. Petersburg, Russia*

**Abstract.** The article is devoted to the development of physical and chemical methods for detecting organic crystals of polyphenols, which are environmental pollutants. Raman spectroscopy of light in the terahertz frequency range was chosen as the research method. Spectral analysis showed that the lines of Raman scattering of light in the terahertz range were found during mechanical grinding of organic crystals (polyphenols). These lines can confirm the interaction of oxygen-containing anions with surface defects of the crystal lattice of substances, which indicates the formation of complex defects of crystal structures.

Key words: physical and chemical methods, method of Raman scattering of light, spectral analysis, crystal lattice, organic crystals (polyphenols), identification.