

Н.А. АВРАМЕНКО, В.В. ЛЕВЕНЕЦ, канд. физ.-мат. наук,
А.П. ОМЕЛЬНИК, Институт физики твердого тела, материаловедения и технологий ННЦ ХФТИ

ДЕТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЛИНИЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ 3,4-БЕНЗПИРЕНА И 1,12-БЕНЗПЕРИЛЕНА В ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Детально вивчені лінії в діапазоні 400 – 470 нм у квазілінійчатих спектрах флуоресценції поліциклических ароматических вуглеводнів 3,4-бензпірена й 1,12-бензперілена в н-гексані й ацетоні при температурі 77К. Описано методику й установку стаціонарної люмінесцентної спектроскопії на основі двох монохроматорів. Установлений ступінчастий вигляд мультиплетів у контурах смуг ліній. Наведено таблиці енергій в окремих контурах БФЛ+ФК ліній, амплітудних і інтегральних величин інтенсивностей для даних умов вимірів.

Lines over the range 400 – 470 nanometers in quasilinear spectra of fluorescence of polycyclic aromatic hydrocarbons 3,4-benzpirena and 1,12-benzperilena in n-geksane and acetone are in details studied at temperature 77K. The technique and installation of stationary luminescent spectroscopy on the basis of two monochromators is presented. It is installed stepping an aspect of multiplets in contours of strips of lines. Tables energy in separate contours NFL+FW of lines, peak and integrated magnitudes intensities for the given conditions of measurements are resulted.

Введение.

Необходимость изучения ПАУ связана с широким распространением этих веществ в окружающей среде и влиянием их на здоровье человека. Главный источник ПАУ в экологии – сжигание органических веществ в производственной сфере и автотранспорт.

Среди ПАУ выделяется ряд веществ по степени снижения канцерогенности, подробно рассмотренной в [1], где причины канцерогенности связываются с определенными центрами биохимической активности молекул этих веществ.

Одним из самых опасных считается 3,4-бензпирен (БП) (1-й класс опасности) из-за степени канцерогенности и широким распространением в окружающей среде.

В связи с этим для БП выработаны предельно допустимые концентрации (ПДК), составляющие для атмосферного воздуха 0,001 мкг/м³, воздуха рабо-

чей зоны – 0,15 мкг/м³, воды – 0,005 мкг/л, почвы – 20 мкг/кг [2, 3]. Широко известным эффективным методом [4 – 6] для изучения структуры сложных органических молекул в задачах экологического мониторинга и исследования канцерогенности является метод измерения индуцированной люминесценции. В частности, значительное распространение получил метод на основе эффекта Шпольского [7, 8] – получение квазилинейчатых спектров (КЛС) флуоресценции и фосфоресценции молекул в твердых растворах при низких температурах (например, температурах жидкого азота и гелия).

На основе измерений в таких условиях с помощью этого эффекта в литературе приводятся виды спектров, данные по длинам волн и интенсивностям люминесценции различных органических молекул. Например, хорошо известен атлас [9], а также работа [10], где для большого числа ПАУ приведена информация об основных положениях линий и их примерных интенсивностях в КЛС при низких температурах. Приведенная в [9, 10] информация позволяет проводить удовлетворительный качественный и количественный анализ, при котором вначале проводится идентификация вещества ПАУ по двум-четырем линиям люминесценции, после чего методами внешнего стандарта или внутренних добавок вычисляется концентрация по величине интенсивности одной из этих линий. Однако для решения задачи изучения молекулярных механизмов степени канцерогенности ПАУ необходимо детальное исследование строения молекул этих веществ.

Одной из сторон решения этой задачи является изучение люминесцентных и абсорбционных характеристик для определения различных физических параметров сложной органической молекулы. Поэтому в данной работе поставлена задача уточнения местоположения и интенсивностей линий люминесценции ПАУ на примере флуоресценции БП и 1,12-бензперилена (БПЛ) в органических растворителях при 77 К.

Экспериментальная часть.

Для измерения флуоресценции использованы растворы стандартов 3,4-бензпирена и 1,12-бензперилена (Quality Assurance Materials Bank) с концентрацией 0,125 мкг/мл ($\sim 5 \cdot 10^{-7}$ моль/л БП(C₂₀H₁₂) и $\sim 4,5 \cdot 10^{-7}$ моль/л БПЛ(C₂₂H₁₂)).

В качестве растворителей использовались н-гексан и ацетон. Измерения флуоресценции проведены на установке стационарной люминесцентной спектроскопии на основе двух монохроматоров МДР-23, первый из которых

был возбуждающим (осуществлял монохроматизацию возбуждающего излучения), второй – измеряющим.

Подробное описание установки приведено в [11].

Источник возбуждения – ультрафиолетовая лампа ДРТ-230, линия ртути 365,5 нм которой выделялась первым монохроматором для возбуждения флуоресценции стандартного раствора ПАУ в пробирке, находящейся в стеклянном сосуде Дьюара в жидком азоте.

Спектр флуоресценции регистрировался на выходе второго монохроматора с помощью ФЭУ-100 (200 – 800 нм). В первом монохроматоре применена дифракционная решетка 1200-I (200 – 500 нм) с максимальной концентрацией энергии в районе 250 нм, во втором – 1200-II (350 – 1000 нм) с концентрацией энергии в районе 500 нм. Входная и выходная щели первого монохроматора для получения максимальной интенсивности линии возбуждения были полностью открыты (2,2 мм).

Входная щель второго монохроматора – 1 мм, выходная для наилучшей детализировки спектра – 0,04 мм, то есть спектральная линейная ширина щели составляла 0,052 нм, а энергетическая ширина щели на линии 400 нм равна $3,25 \text{ см}^{-1}$, на линии 450 нм – $2,57 \text{ см}^{-1}$. Шаг сканирования был выбран 0,1 нм для оптимального соответствия по порядку величины со щелью.

Управление исполнительными механизмами, блоками питания и регистрирующими блоками осуществлялось программно-аппаратным комплексом, в состав которого входит модуль на основе микроконтроллера и программного обеспечения ПК. В связи с необходимостью в экологических задачах проводить измерения концентрации ПАУ в широком диапазоне от предела обнаружения $\sim 10^{-11}$ г/мл до высоких концентраций $\sim 10^{-5}$ г/мл программное обеспечение позволяет оперативно изменять число выборок аналого-цифрового преобразователя на каждом шаге решетки в диапазоне $N_{\text{АЦП}} = 1 \div 30000$. Время на одну выборку АЦП составляет $\sim 0,1$ мсек.

В наших измерениях выбрано $N_{\text{АЦП}} = 5000$, что является оптимальным компромиссом между чрезмерным увеличением времени набора спектра и достижением наилучшей детализировки контуров линий и увеличения соотношения «сигнал-шум». С учетом диапазонов времени, необходимого на полный цикл измерения на одном шаге, реальная скорость сканирования для $N_{\text{АЦП}} = 5000$ составляла ~ 2 нм/мин. Спектральный фон измерялся на чистых растворителях при идентичных со стандартными растворами условиях и при полном исключении фоновых подсветок.

Результаты и обсуждение.

Общий вид полученных типичных спектров флуоресценции БП и БПЛ представлен на рис. 1 и рис. 2.

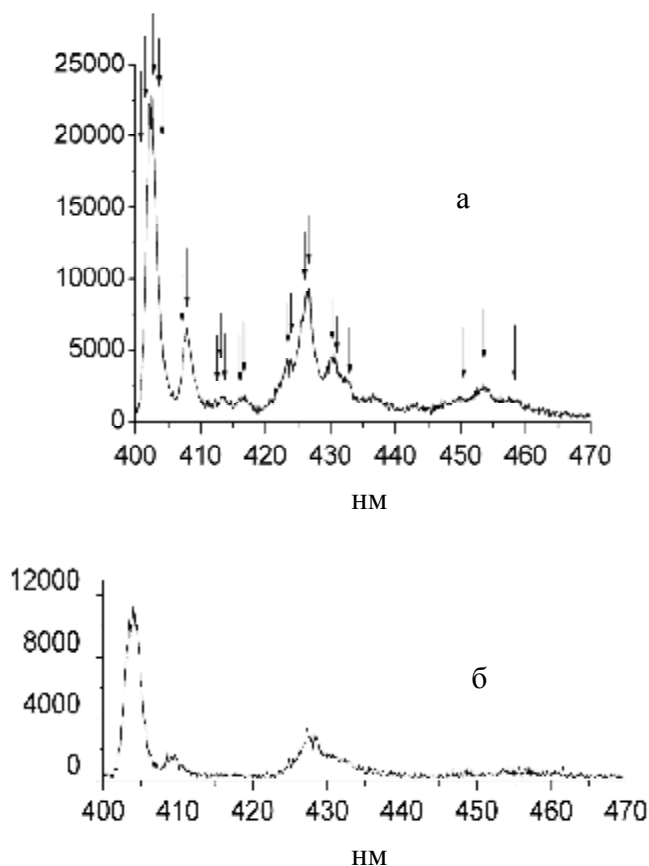


Рис. 1. Спектры флуоресценции при 77 К: БП в н-гексане (а), БП в ацетоне (б).
Стрелками отмечены положения линий согласно [9, 10].
Ось ординат – относительная интенсивность.

На всех приведенных рисунках стрелками указаны положения основных линий, приведенных в [9, 10].

Видно, что в приводимых в данной работе спектрах с достижением максимально возможной статистики набора для увеличения соотношения «сигнал-шум» получена более полная численность полос линий, их детализировка и интенсивность.

При идентификации положения линий выбраны следующие критерии.

Первый: критерий Рэлея, при котором две линии-полосы равной интенсивности считаются разрешенными, если величина «провала» между ними составляет не менее половины максимальных значений [6].

Второй: для разрешения линий достаточно просто наличие «провала» между ними [6].

Третий: представление одной линии-полосы на склоне другой в виде «ступеньки». Все три критерия часто реализуются на практике, в качестве примера можно привести [12, 13].

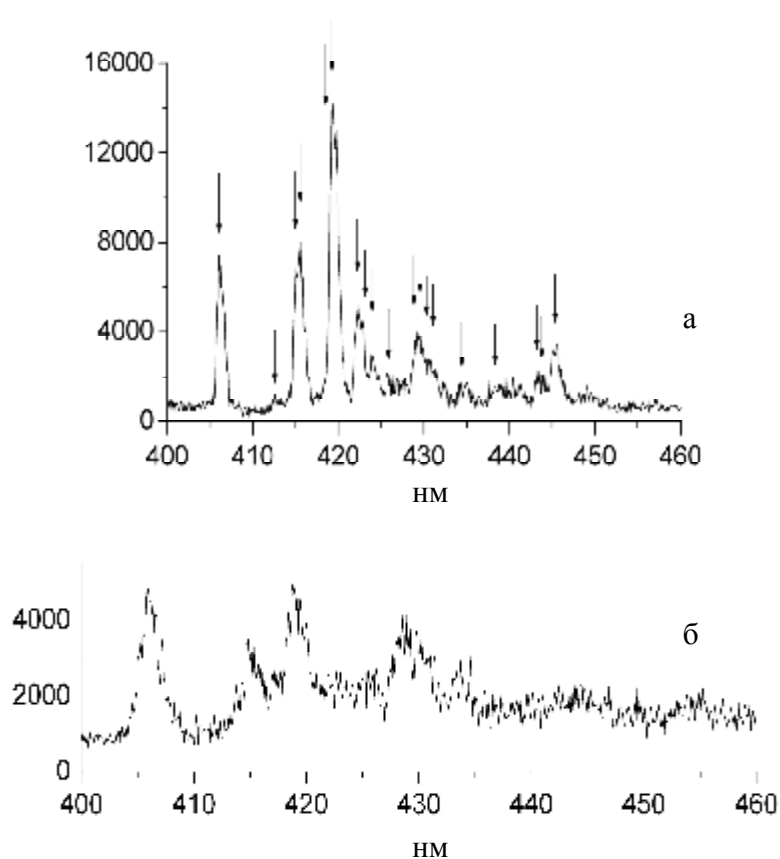


Рис. 2. Спектры флуоресценции при 77 К:
БПЛ в н-гексане (а), БПЛ в ацетоне (б).
Стрелками отмечены положения линий согласно [9, 10].
Ось ординат – относительная интенсивность.

Наличие пика выбрано как превышение сигнала над фоном согласно критерию:

$$A_{\text{пик}} \geq 3 \sqrt{A_{\text{фон}}},$$

где $A_{\text{пик}}$ – интенсивность полезного сигнала над фоном, $A_{\text{фон}}$ – интенсивность фона.

Для более удобного подробного рассмотрения спектры разбиты на отдельные участки, в рамках которых ограничиваются или отдельные полосы с мультиплетной структурой и явно выраженным максимумом, или широкие полосы с несколькими локальными близко расположенными максимумами, или широкие полосы с линиями малой и примерно равной интенсивности.

3,4-бензпирен.

Спектр БП в н-гексане (рис. 1а) разбит на 7 участков (что показано на рис. 3).

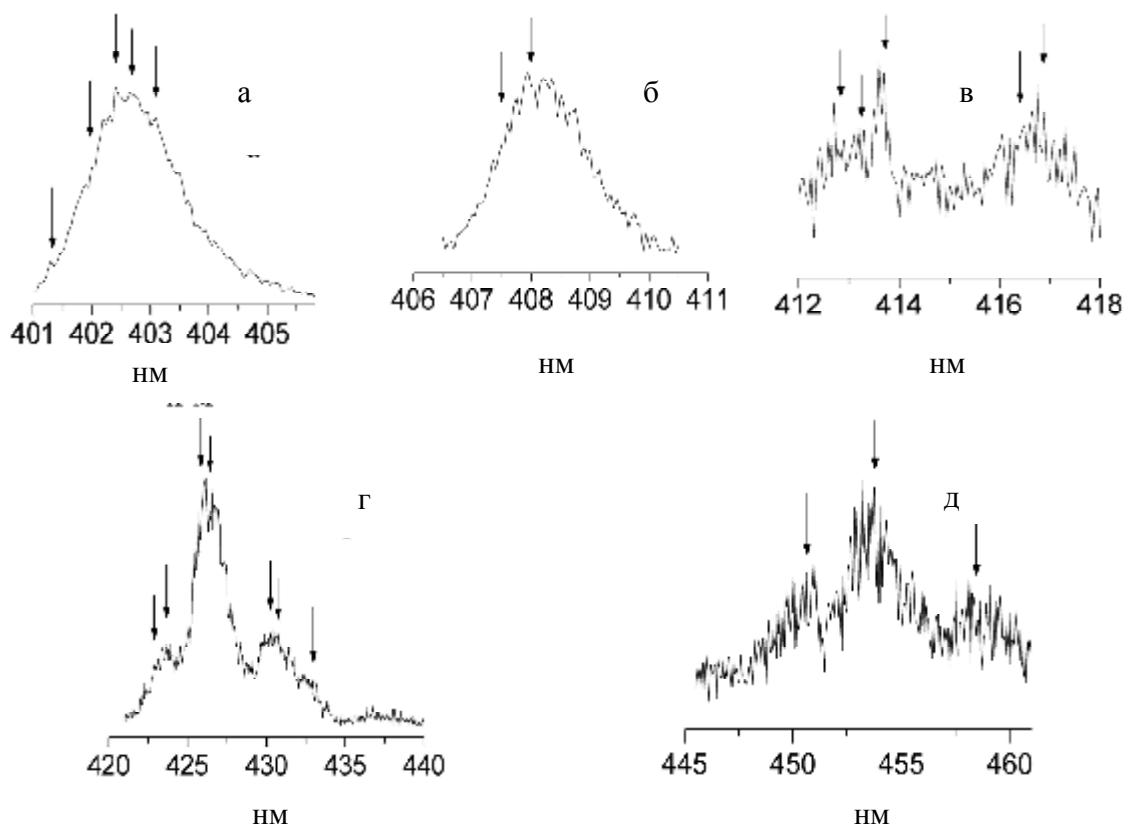


Рис. 3. Подробные с проявленными «ступеньками» типичные контуры полос линий БП в н-гексане на разных участках:

а – участок 1; б – участок 2; в – участки 3 и 4; г – участки 5 и 6; д – участок 7.

Стрелками отмечены линии согласно [9].

Первый участок (400,7 – 405,8 нм) представлен мультиплетной структурой с максимальной интенсивностью на линии 402,4 нм. Согласно [9] на этом участке наблюдается мультиплет из пяти линий. С нашей точки зрения необходимо более детальное рассмотрение данного мультиплета. Основанием для этого служат два фактора.

Первый фактор: наличие на экспериментальной линии распределения

графика данного мультиплета регулярно проявляющихся на всех спектрах «ступенек» на определенных длинах волн фотонов, отстоящих друг относительно друга на $\Delta\lambda \sim 0,3$ нм.

Второй фактор: явная асимметрия и отклонение экспериментальной линии распределения от «гауссиана» – разница между длиной волны $\lambda = 402,4$ нм с максимальной амплитудой интенсивности и границей полосы с коротковолновой стороны равна $\Delta\lambda_{\text{к}} \sim 1,7$ нм, разница между $\lambda = 402,4$ нм и границей полосы с длинноволновой стороны $\Delta\lambda_{\text{д}} \sim 3,4$ нм, то есть при введении критерия асимметрии $K_{\text{ас}} = \Delta\lambda_{\text{д}} / \Delta\lambda_{\text{к}}$ этот параметр для первого мультиплета $K_{\text{ас}} \sim 2,0$.

Оба фактора можно объяснить существованием распределения внутри единого комплекса всех центров свечения бесфононной линии (БФЛ) и фононного крыла (ФК) при определенной температуре. Как известно [14], узкая БФЛ соответствует оптическим переходам в примесном центре (молекула растворенного вещества) в твердом замороженном кристаллическом растворе.

Совместно с БФЛ появляется более широкая полоса ФК, создаваемая фононами кристаллической решетки, которая примыкает при излучении люминесценции к БФЛ с длинноволновой стороны.

При $T \sim 0$ К БФЛ и ФК почти разрешаются, а при повышении температуры разрешаемость ухудшается, что приводит к неоднородному уширению и асимметрии общей полосы БФЛ + ФК.

С повышением температуры интенсивность БФЛ перераспределяется в полосу ФК, при этом их суммарная интенсивность остается примерно постоянной [14]. Уширение собственно линии БФЛ с повышением температуры связывают с излучением разных центров – одинаковых молекул примеси, находящихся в разных локальных условиях в твердом кристаллическом растворе.

Наличие «ступенек» на общем контуре БФЛ + ФК, по всей видимости, связано с дискретным распределением по энергиям внутри совокупности как центров излучения БФЛ, так и в полосе ФК. Понижение температуры, например до 4,2 К, приводит к сужению распределения полосы БФЛ и увеличению высоты пика, подтверждая определение «квазилинейчатость» для температурной зависимости люминесценции. Таким образом, по этой причине должны «вымораживаться» «ступеньки» полосы БФЛ и появляться более

четко разрешенный мультиплет с меньшим числом линий по сравнению с числом «ступенек» [15], и это должно быть характерно как для синглетных, так и триплетных состояний. В ряде работ [13 – 20] приводятся примеры спектров флуоресценции и фосфоресценции органических молекул при разных низких температурах с группами мультиплетов с большим числом линий внутри полос отдельных мультиплетов. Кроме того, причиной недостаточной разрешенности «ступенек» при 77К может являться общая аппаратная функция конкретной установки. С появлением установок с более узкой аппаратной функцией следует ожидать улучшение разрешения между «ступеньками».

Контур линий мультиплетов на всех участках исследованных спектров БП в н-гексане показаны на рис. 3, а в таблице 1 представлены данные по интенсивностям линий в относительных единицах. Обращает на себя внимание подобие двух широких и сложных полос пятого и седьмого участков и их примерно одинаковая протяженность (~12,3 нм – пятого; ~13,5 нм – седьмого), равенство $K_{ас}$ (1,37) и расстояния по длинам волн между тремя соответствующими локальными максимумами этих участков, что может указывать на принадлежность обеих полос к одной колебательной структуре молекулы БП. Таким образом, увеличением статистического экспозиционного набора спектров удалось лучше проявить структуру полос линий в сравнении с [9], а на шестом участке выделить ранее не проявлявшуюся слабоинтенсивную структуру.

В таблице 1 приведены два вида данных интенсивностей – интенсивности A_{λ} в точке сканирования на определенной длине волны λ после вычета интенсивности фона и общей интегральной интенсивности I_i после вычета площади фона i -мультиплета (где это возможно). Такое разделение полезно использовать при количественных расчетах концентрации вещества или определения молекулярных структур. Здесь также приведены энергии (в $см^{-1}$) фотонов линий с соответствующей длиной волны, длины волн и энергии основных линий согласно [9], коэффициенты асимметрии $K_{ас}$.

В таблице 1 выделены данные для линий с максимальными интенсивностями на участках.

Анализ спектров БП в ацетоне (рис. 1б) показывает следующее.

В целом характер спектров не изменился.

Параметр разрешения – полная ширина на полувысоте (ПШПВ) (в данном случае из-за неоднородного уширения полос БФЛ + ФК этот параметр

Таблица 1

Интенсивности линий БП в н-гексане и коэффициенты асимметрии полос

№ участка	Диапазон участка	Атлас [9]		Полученные данные				
		$\lambda(\text{нм})$	$E(\text{см}^{-1})$	$\lambda(\text{нм})$	$E(\text{см}^{-1})$	A_λ	I	K_{ac}
1	400,7 - 405,8	401,4	24913	401,4	24913	0,535	1,00	2,00
		402,0	24876	402,0	24876	0,893		
		402,4	24851	402,4	24851	1,000		
		402,7	24832	402,7	24832	0,912		
		403,0	24814	403,0	24814	0,690		
				403,9	24759	0,252		
				404,1	24746	0,178		
				404,4	24728	0,150		
				404,8	24704	0,110		
2	406,6 - 410,5			405,1	24685	0,090	0,200	1,79
				407,0	24570	0,060		
		407,5	24540	407,5	24540	0,149		
				407,7	24528	0,186		
		407,9	24516	408,0	24510	0,209		
				408,3	24492	0,195		
				408,7	24468	0,154		
				409,0	24450	0,111		
				409,3	24432	0,076		
3	412,0 - 414,0			409,7	24408	0,046	0,024	
				410,1	24384	0,033		
		412,6	24237	412,6	24237	0,031		
4	416,0 - 417,0	413,2	24201	413,2	24201	0,034	0,022	
		413,5	24184	413,5	24184	0,034		
		416,3	24021	416,3	24021	0,033		
5	421,3 - 433,6	416,7	23998	416,7	23998	0,029	0,685	1,37
				421,6	23719	0,045		
		422,8	23652	422,9	23646	0,099		
		423,2	23629	423,8	23596	0,112		
				424,7	23546	0,136		
				425,5	23502	0,257		
		425,9	23480	426,1	23469	0,333		
		426,3	23458	426,6	23441	0,300		
				427,8	23375	0,128		
				429,4	23288	0,075		
		430,0	23256	429,8	23267	0,103		
		430,4	23234	430,3	23240	0,112		
				431,2	23191	0,077		
6	434,6 - 440,0			432,4	23127	0,062	0,032	
				435,9	22941	0,023		
				437,7	22847	0,017		
7	447,5 - 461,0			447,8	22331	0,025	0,114	1,37
				449,2	22262	0,024		
		450,7	22188	450,9	22178	0,032		
				452,3	22109	0,046		
		453,3	22060	453,2	22065	0,047		
				454,4	22007	0,036		
		458,4	21815	457,3	21867	0,030		
				459,2	21777	0,020		
				460,8	21701	0,018		

носит несколько условный характер) для БП в н-гексане для первого мультиплета был равен 1,8 нм, а для БП в ацетоне - 2,9 нм, то есть разрешение ухудшилось примерно в 1,5 раза.

Длины волн максимумов мультиплетов сдвинулись в ацетоне в длинноволновую сторону – для первого мультиплета сдвиг равен $\Delta\lambda = 1,5$ нм.

Интенсивности значительно снизились, для первого мультиплета падение интенсивности в ацетоне составило для максимума амплитуды $A_\lambda \sim 2$ раза, для интегральной $I_1 - 1,9$ раза.

В целом спектр БП в ацетоне оказался менее информативным, поэтому для поставленной задачи в таблице 1 приводятся только данные БП в н-гексане.

1,12-бензперилен.

Спектр БПЛ в н-гексане (рис. 2а) разбит на 15 участков (рис. 4).

Анализ участков проведен аналогично 3,4-бензпирену.

Обычно для количественного определения концентрации БПЛ используются данные первого мультиплета.

Кроме того, БПЛ часто применяется и для определения концентрации БП сравнением интенсивностей первых мультиплетов БП и БПЛ. В нашем случае отношение интенсивностей БП и БПЛ для первых мультиплетов составило: для интенсивностей A_λ на $\lambda_{БП} = 402,4$ нм и $\lambda_{БПЛ} = 406,0$ нм – $A_\lambda(БП) / A_\lambda(БПЛ) = 4,8$; для интегральной $I_1(БП) / I_1(БПЛ) = 7,1$.

Такое заметное различие связано с разной степенью распределения интенсивностей по “ступенькам” для БП и БПЛ на первом мультиплете, в результате чего для БПЛ ПШПВ=1,1 нм в сравнении с более размытой полосой для БП (ПШПВ = 1,8 нм), поэтому это необходимо учитывать при выборе A_λ или I_1 в качестве основного параметра расчета концентрации БП с использованием БПЛ.

Контурные полос линии БПЛ по участкам показаны на рис. 4, а в таблице 2 представлены данные интенсивностей линий.

Как видно из рисунков контуров (стрелками отмечены линии согласно [9]) и данных таблицы, по сравнению с данными атласа [9] удалось проявить более богатый и детальный набор полос линий практически на всех участках.

Анализ спектра БПЛ в ацетоне (рис. 2б) показывает ухудшение разрешения почти в два раза: в н-гексане ПШПВ = 1,1 нм, а в ацетоне ПШПВ = 2,1 нм.

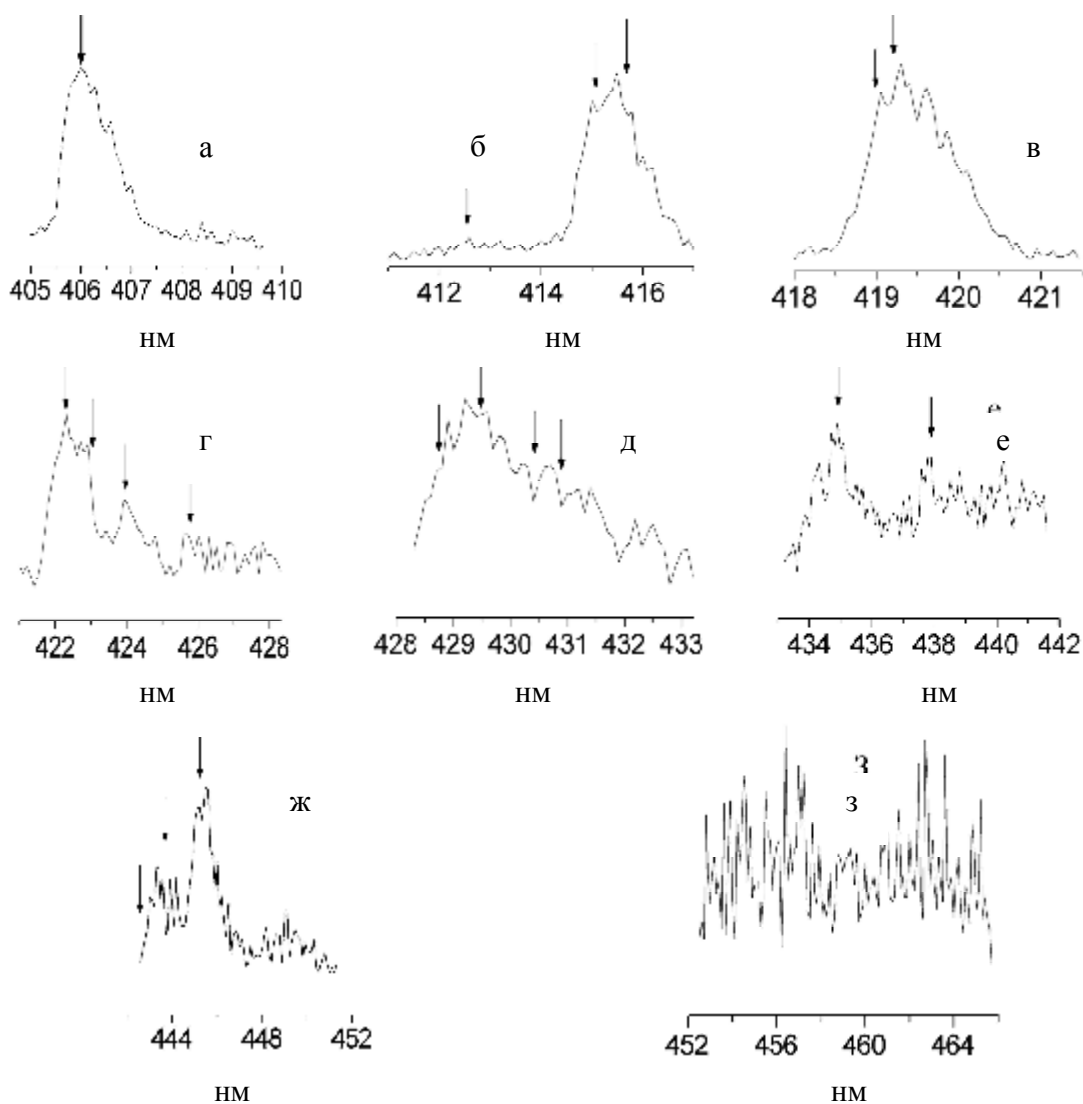


Рис. 4. Подробные с проявленными «ступеньками» типичные контуры полос линий
БПЛ в н-гексане на разных участках:

а – участок 1; б – участки 2 и 3; в – участок 4; г – участки 5,6 и 7; д – участок 8;
е – участки 9 и 10; ж – участки 11, 12 и 13; з – участки 14 и 15.

Стрелками отмечены линии согласно [9].

Наблюдается небольшой сдвиг длин волн максимумов всех мультиплетов в ацетоне в коротковолновую сторону – для первого мультиплета сдвиг $\Delta\lambda = 0,1$ нм, для остальных мультиплетов сдвиги имеют по порядку такие же величины. Снижение интенсивности в ацетоне происходит заметно больше для максимумов амплитуд, чем для интегральной интенсивности.

Так, для первого мультиплета $A_{\lambda \text{ гексан}} / A_{\lambda \text{ ацетон}} \sim 1,7$, в то время как $I_{1 \text{ гексан}} / I_{1 \text{ ацетон}} \sim 1,1$.

Таблица 2

Интенсивности линий БПЛ в н-гексане и коэффициенты асимметрии полос

№ участка	Диапазон участка (нм)	Атлас [9]		Полученные данные				
		$\lambda(\text{нм})$	$E(\text{см}^{-1})$	$\lambda(\text{нм})$	$E(\text{см}^{-1})$	A_λ	I	K_{ac}
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	405,5 - 409,6			405,8	24643	0,837	1,000	3,0
		406,0	24631	406,0	24631	1,000		
				406,3	24612	0,902		
				406,6	24594	0,608		
				406,9	24576	0,391		
				407,2	24558	0,167		
				407,6	24534	0,123		
				408,3	24492	0,133		
2	411,9 - 414,3			408,8	24462	0,086	0,093	
				412,2	24260	0,104		
		412,5	24242	412,6	24237	0,121		
				413,2	24201	0,109		
3	414,2 - 416,9			414,0	24155	0,138	1,210	1,2
				414,3	24137	0,148		
		414,9	24102	414,8	24108	0,646		
				415,1	24091	0,907		
		415,6	24062	415,5	24067	1,092		
				415,8	24050	0,808		
4	418,3 - 420,9			416,1	24033	0,496	2,153	1,9
				416,6	24004	0,213		
		419,0	23866	419,0	23866	1,352		
		419,2	23855	419,2	23855	1,838		
				419,6	23832	1,655		
				419,9	23815	1,206		
				420,2	23798	0,829		
5	421,4 - 423,6			420,6	23776	0,295	0,579	1,8
				420,9	23759	0,169		
				421,9	23702	0,450		
		422,2	23685	422,2	23685	0,622		
				422,7	23657	0,545		
6	423,6 - 425,4	423,0	23641	422,9	23646	0,485	0,295	3,5
				423,4	23618	0,274		
				424,0	23585	0,303		
				424,3	23568	0,231		
7	425,4 - 428,3			424,7	23546	0,209	0,290	
				425,2	23518	0,153		
		425,8	23485	425,8	23485	0,244		
				426,2	23463	0,227		
				426,6	23441	0,202		
		426,9	23425	0,189				
		428,0	23367	0,185				

Продолжение табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9
8	428,3 - 433,4	428,7	23326	428,9	23315	0,479	1,019	3,6
		429,4	23288	429,4	23288	0,535		
				429,8	23267	0,444		
		430,3	23240	430,2	23245	0,373		
		430,8	23213	430,7	23218	0,366		
				431,1	23196	0,282		
				431,4	23180	0,310		
				432,2	23137	0,225		
9	433,6 - 436,7			433,7	23057	0,103	0,223	2,9
				434,1	23036	0,181		
		434,4	23020	434,4	23020	0,246		
				434,9	22994	0,221		
				435,6	22957	0,170		
				436,5	22909	0,106		
10	437,5 - 442,2	437,8	22841	437,8	22841	0,192	0,461	
				438,4	22810	0,189		
				439,0	22779	0,195		
				439,7	22743	0,199		
				440,4	22707	0,214		
				441,2	22665	0,176		
11	442,7 - 444,6	442,6	22594	443,1	22568	0,186	0,260	1,7
		443,5	22548	443,4	22553	0,265		
				443,6	22543	0,243		
				443,9	22528	0,247		
				444,2	22512	0,222		
12	444,6-447,4	445,2	22462	445,2	22462	0,378	0,515	1,8
				445,6	22442	0,410		
				446,0	22421	0,303		
				446,4	22401	0,199		
				446,9	22376	0,149		
13	447,4 - 451,5			448,2	22311	0,154	0,318	
				448,6	22292	0,150		
				449,0	22272	0,175		
				449,4	22252	0,168		
				450,3	22207	0,123		
				450,8	22183	0,136		
14	452,7 - 458,7			~456,6	21901	0,115		
15	460,0 - 465,7			~462,4	21626	0,108		

Как видно, в ацетоне по отношению к БП интенсивность отдельных линий БПЛ не столько уменьшается, сколько перераспределяется по «ступенькам» с ухудшением разрешения всей полосы мультиплета.

Выводы. Для установок стационарной люминесцентной спектроскопии измерения квазилинейчатых спектров люминесценции сложных органических веществ при низких температурах (эффект Шпольского) на примере твердых растворов 3,4-бензпирена и 1,12-бензперилена (представителей ПАУ) в н-гексане реализована возможность детализировки регистрации при температуре 77 К большего числа линий флуоресценции в диапазоне 400 – 470 нм в сравнении с известными данными за счет усовершенствования метода измерения. Выявлен ступеньчатый характер контуров линий флуоресценции. Составлены подробные таблицы энергий в отдельных контурах БФЛ+ФК линий, их амплитудных и интегральных величин интенсивностей. Данный подход может расширить возможности изучения в определении структур сложных органических молекул с помощью данных люминесцентного анализа при низких температурах.

Список литературы: 1. *Пюльман Б.* Электронная биохимия / *Б. Пюльман*; [пер. с франц. Д. Арнольд]. – М.: «Наука», 1966. – 104 с. 2. *Диордица В.А.* Бенз(а)пирен и другие циклические ароматические углеводороды как загрязнители окружающей среды / *В.А. Диордица, В.В. Левенец*. – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2004. – 18 с. – (Препринт / НАН Украины, Нац. науч. центр “Харьк. физ.-техн. ин-т”; ХФТИ 2004-03). 3. *Усиков Н.П.* Спектрально-люминесцентный анализ бенз(а)пирена / [*Н.П. Усиков, Н.А. Авраменко, В.В. Левенец и др.*] // ВАНТ. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». – 1998. – Вып. 5 (71). – С.97. 4. *Владимиров Ю.А.* Физико-химические основы фотобиологических процессов / *Ю.А. Владимиров, А.Я. Потапенко*. – М.: «Наука», 1989. – 199 с. 5. *Акимов И.А.* Спектроскопия фотопревращений в молекулах / [под ред. *И.А. Акимов, Ф.И. Вилесов и др.*]. – Л.: «Наука», 1977. – 312 с. 6. *Булычев А.А.* Современные методы биофизических исследований / *А.А. Булычев, В.Н. Верхотуров, Б.А. Гуляев*. – М.: «Высшая школа», 1988. – 360 с. 7. *Шпольский Э.В.* Спектр флуоресценции коронена в замороженных растворах / *Э.В. Шпольский, А.А. Ильина, Л.А. Климов* // ДАН СССР. – 1952. – Т. 87, № 6. – С.935 – 938. 8. *Романовская Г.И.* Определение ароматических соединений в бинарных смесях по синхронным, асинхронным и контурным спектрам флуоресценции / *Г.И. Романовская, С.В. Королев, О.А. Узикова* // Журнал аналитической химии. – 1992. – Т. 47, Вып. 12. – С. 1976 – 1982. 9. *Теплицкая Т.А.* Атлас квазилинейчатых спектров люминесценции / *Т.А. Теплицкая, Т.А. Алексеева, М.М. Вальдман*. – М.: изд-во МГУ, 1978. – 177 с. 10. *Алексеева Т.А.* Спектро-флуориметрические методы анализа ароматических углеводородов в природных и техногенных средах / *Т.А. Алексеева, Т.А. Теплицкая*. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 216 с. 11. *Авраменко Н.А.* Люминесценция в экологических задачах определения полициклических ароматических углеводородов / [*Н.А. Авраменко, В.А. Диордица, А.П. Омельник и др.*]. // Вестник НТУ «ХПИ». – 2008 – № 10. – С.151 – 159. 12. *Ладыгин В.Г.* Флуоресценция, формы хлорофилла и число реакционных центров фотосистем I и II у CHLOROTICA мутантов *Pisum sativum L* / *В.Г. Ладыгин* // Биофизика. – 2002. – Т. 47, Вып. 6. – С. 1032 – 1043. 13. *Персонов Р.И.* Тонкая структура спектров люминесценции органических молекул при лазерном возбуждении и природа широких спектральных полос твердых растворов / [*Р.И. Персонов, Е.И. Альшиц, Л.А. Быковская и др.*] // ЖЭТФ. – 1973. – Т. 65, Вып. 5 (11). – С. 1825 – 1836. 14. *Соловьев К.Н.* Дискретные спектры люминесценции больших органических молекул и их применения / *К.Н. Соловьев, С.Ф. Шкирман* // Журнал прикладной

спектроскопии. – 1991. – Т. 54, № 3. – С.383 – 395. **15.** *Арабей С.М.* Электронные уровни и колебательная структура *цис*-формы цианпроизводного метилированного изобактериохлорина / *С.М. Арабей, К.Н. Соловьев, С.Ф. Шкирман* // Журнал прикладной спектроскопии. – 1992. – Т. 56, № 2. – С.192 – 199. **16.** *Персонов Р.И.* Возникновение тонкой структуры в спектрах флуоресценции сложных молекул при лазерном возбуждении / *Р.И. Персонов, Е.И. Альшиц, Л.А. Быковская* // Письма в ЖЭТФ. – 1972. – Т. 15, Вып. 10. – С. 609 – 612. **17.** *Романовская Г.И.* Определение ароматических соединений в смесях по синхронным квазилинейчатым спектрам фосфоресценции / *Г.И. Романовская, М.Л. Литвина, А.К. Чибисов* // Журнал аналитической химии. – 1991. – Т. 46, Вып. 4. – С. 702 – 708. **18.** *Клименко В.Г.* Квазилинейчатые спектры фосфоресценции диоксинов при 4,2К. Дибензо-*п*-диоксин / *В.Г. Клименко, Р.Н. Нурмухаметов, Е.А. Гаспилович* // Оптика и спектроскопия. – 1997. – Т. 83, № 1. – С. 92 – 96. **19.** *Клименко В.Г.* Тонкоструктурная фосфоресценция и колебания 2,3,7,8-тетрахлордибензо-*п*-диоксина / *В.Г. Клименко, Р.Н. Нурмухаметов, Е.А. Гаспилович* // Оптика и спектроскопия. – 1999. – Т. 86, № 2. – С.239 – 246. **20.** *Соловьев К.Н.* Фотохимическая NH-перестройка изобактериохлоринов в матрицах *n*-алканов / *К.Н. Соловьев, С.М. Арабей* // Оптика и спектроскопия. – 1997. – Т. 83, № 4. – С. 635 – 639.

Поступила в редколлегию 12.10.09

УДК 641.35.004.12:637.356

С.В. СОРОКИНА, канд. техн. наук, **В.В. ПОЛУПАН**, студент-магістр,
ХДУХТ, м. Харків

МОДЕЛЮВАННЯ КОМПЛЕКСНОГО ПОКАЗНИКУ ЯКОСТІ КИСЛОМОЛОЧНОГО ПРОДУКТУ

Проведено комплексну оцінку якості кисломолочних продуктів із використанням методів кваліметрії – побудови ієрархічного дерева оцінки якості. Доведено, що застосування запропонованого методу оцінки якості кисломолочних продуктів дає можливість об'єктивно з використанням методів кваліметрії визначити їх якість.

Complex estimation of qualities of soul-milk products is conducted with the use of methods of kvalymetry are constructions of hierarchical tree of estimation of qualities. It is proved that application of the offered method of estimation of qualities of soul-milk products enables objectively with the use of methods of kvalymetry to define their qualities.

Постановка проблеми у загальному вигляді. Серед найважливіших проблем, які повинні вирішувати сьогодні наука і практика, особливе місце займає забезпечення населення повноцінними продуктами харчування. Це стосується й кисломолочних продуктів. Для вирішення завдань підвищення