



«Оптические методы и приборы контроля
качества продукции»

— *«Поляризметрический анализ»* —

доцент кафедры ФХМСП Стасевич О.В.

План лекции

- Физические основы поляризметрического метода. Основные понятия: поляризованный луч, плоскость поляризации, оптически активные вещества, зависимость угла вращения от строения веществ и условий измерения.
- Дисперсия оптического вращения. Спектрополяризметрический метод. Принципиальные схемы, функции и устройство основных узлов приборов для осуществления поляризметрического и спектрополяризметрического анализа. Применение поляриметрии и спектрополяриметрии при контроле качества продукции.

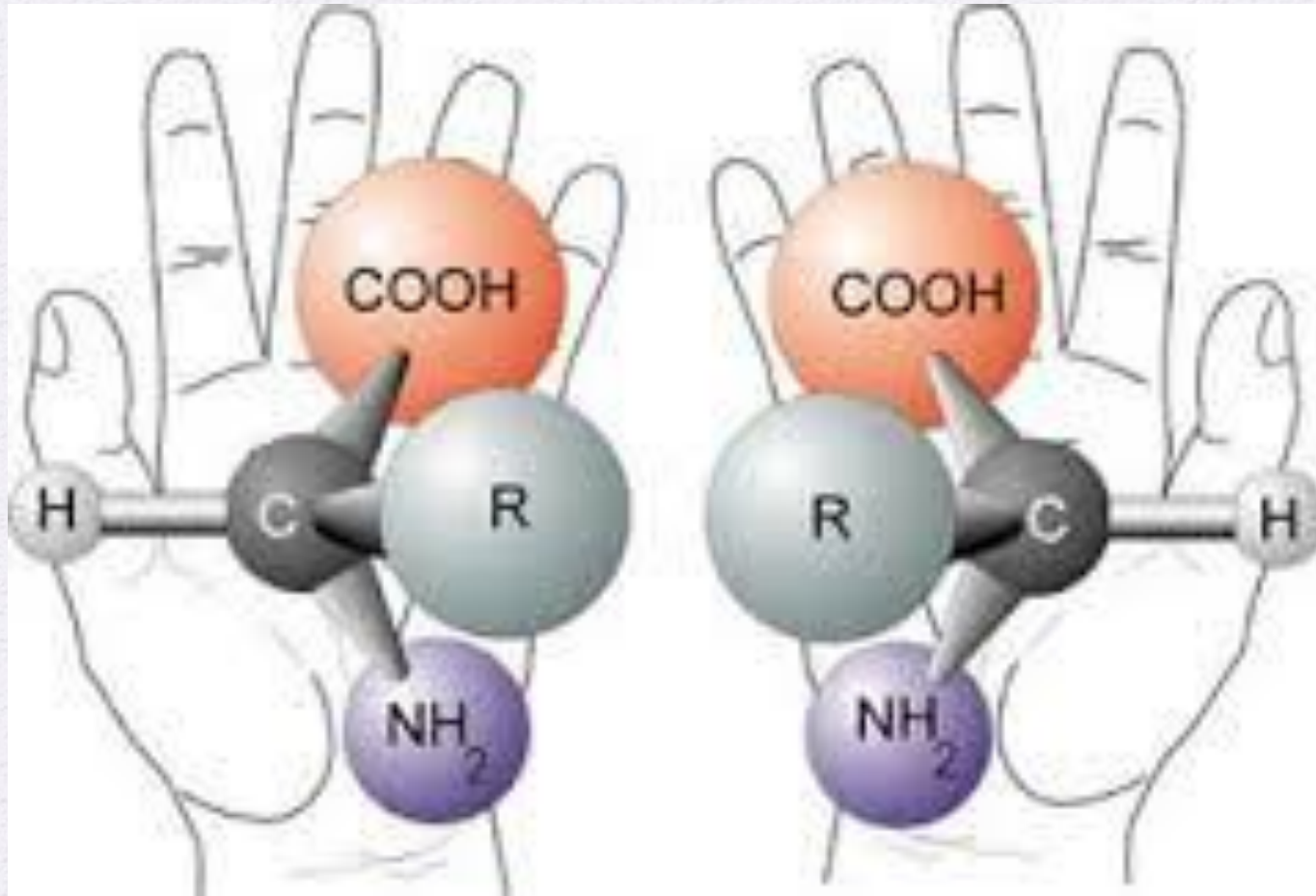
ВВЕДЕНИЕ

Оптические методы анализа основаны на измерении характеристик оптических свойств вещества (испускание, поглощение, рассеивание, отражение, преломление, дифракция, интерференция, поляризация света), проявляющихся при его взаимодействии с электромагнитным излучением.

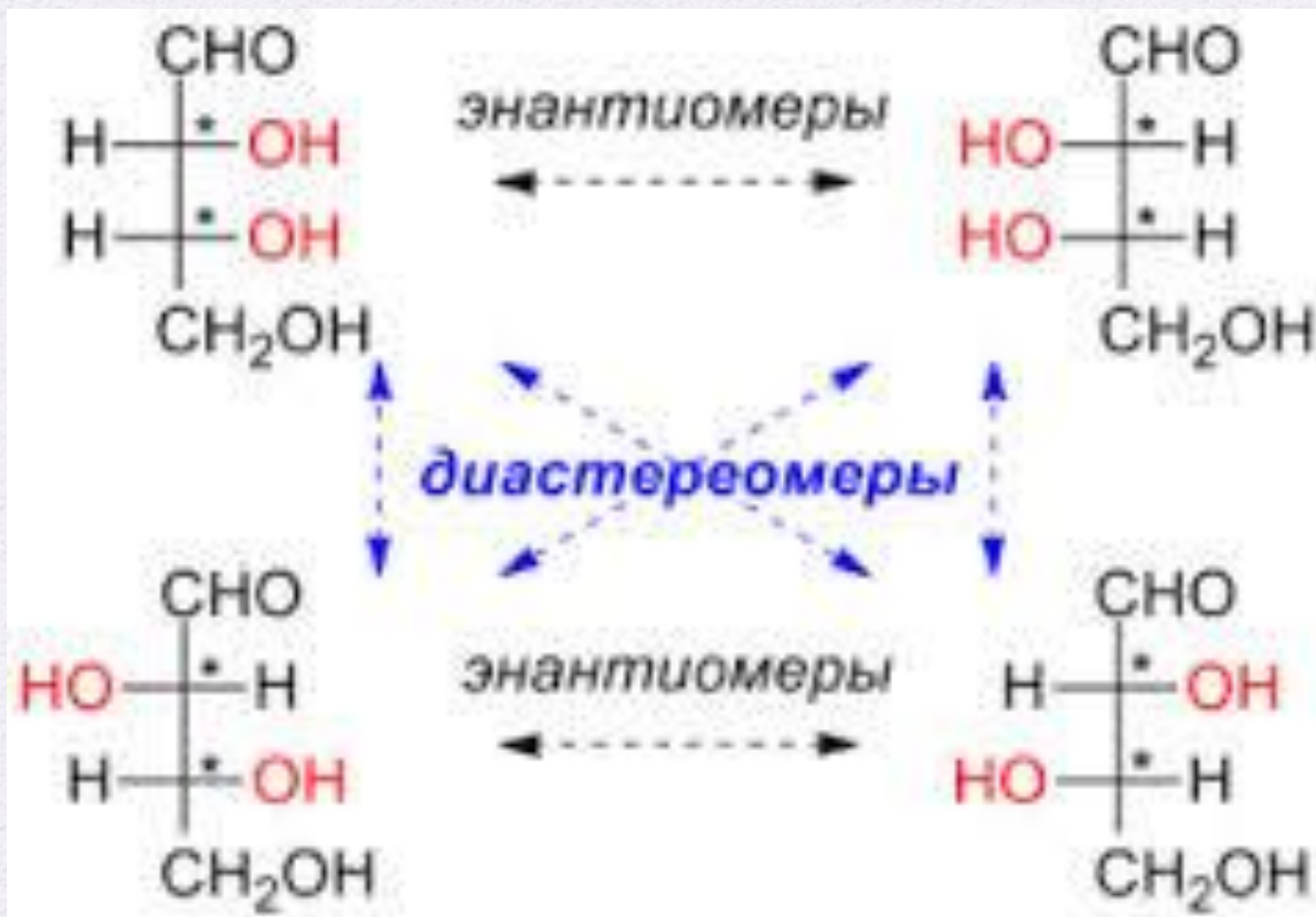
СУЩНОСТЬ МЕТОДА

- Поляриметрический метод анализа основан на использовании оптической активности анализируемого вещества, т. е. На способности раствора этого вещества изменять угол вращения плоскости поляризации света. Такой способностью обладают органические вещества, в молекулу которых входит один или несколько асимметрических атомов углерода.

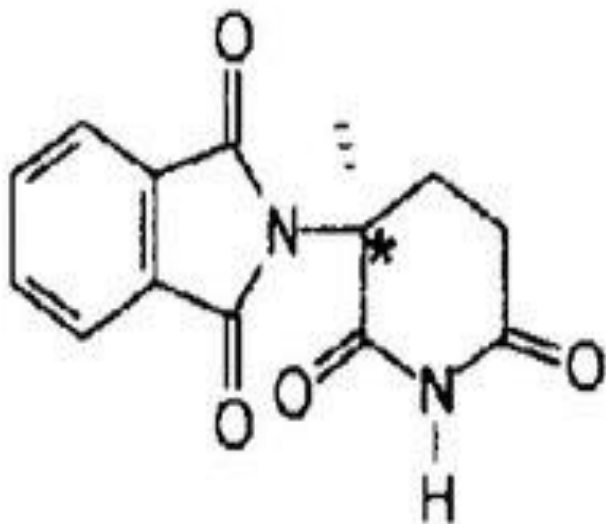
Оптически активная молекула



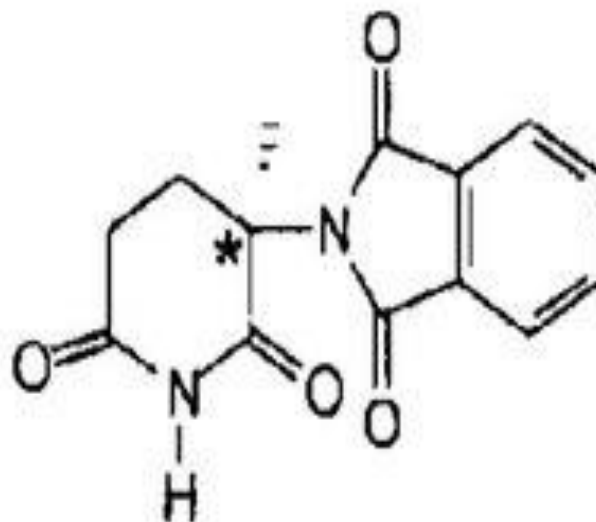
Энантиомеры и диастереомеры



Оптические изомеры талидомида



(-)-S-талидомид

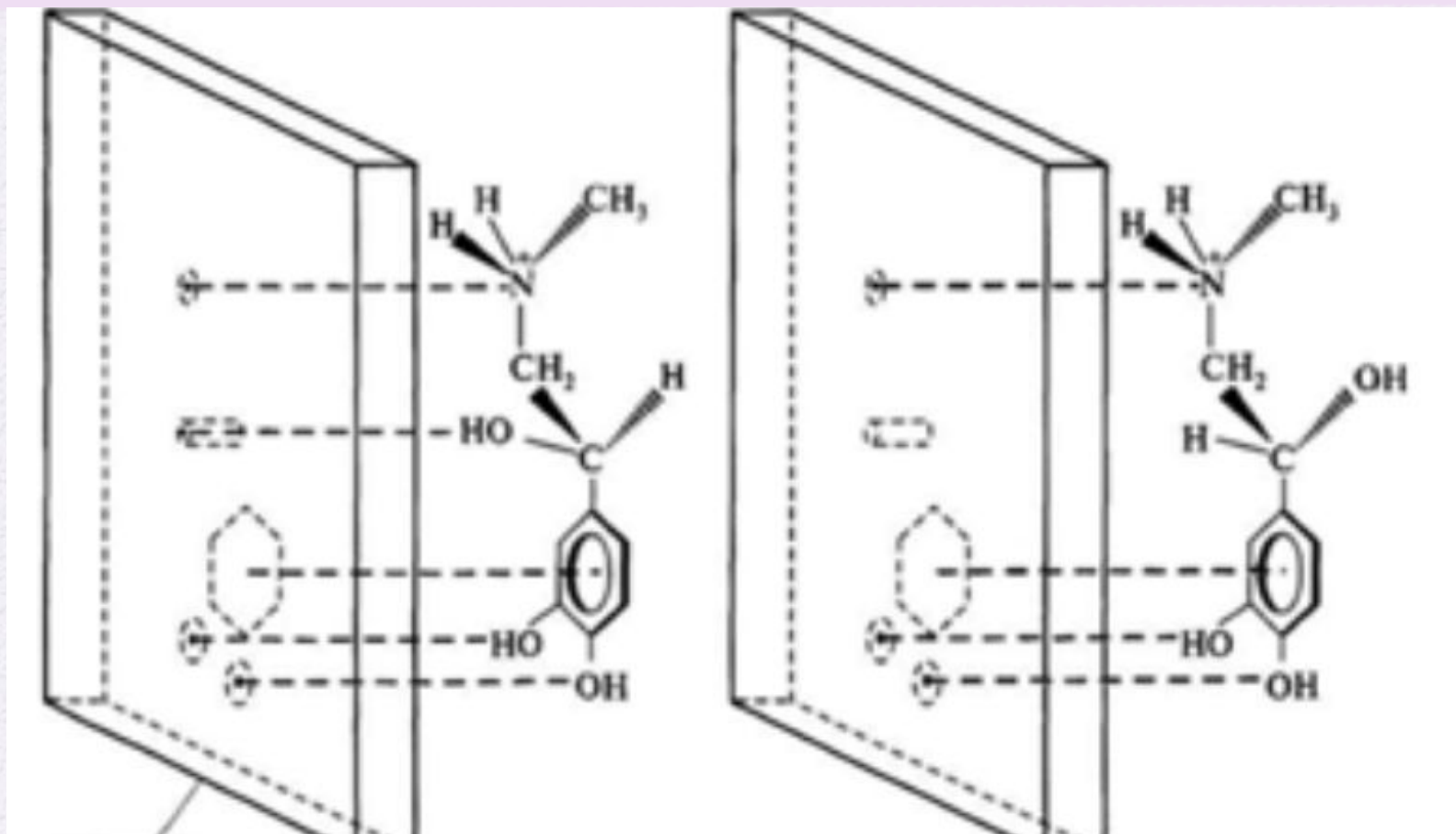


(+)-R-талидомид

Тератогенные свойства

Седативные свойства

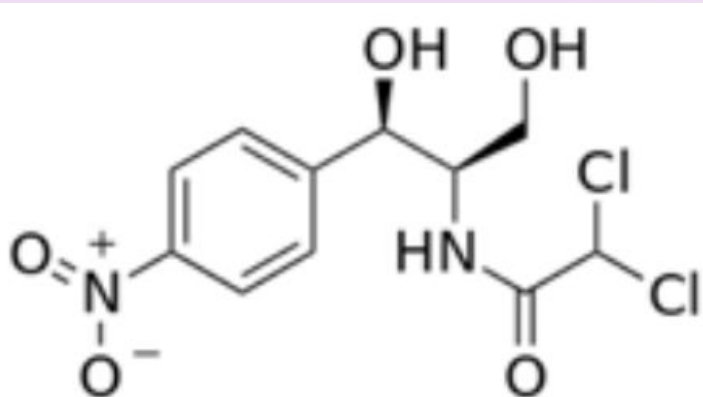
Оптические изомеры адреналина



S (-) адреналин

R (+) адреналин

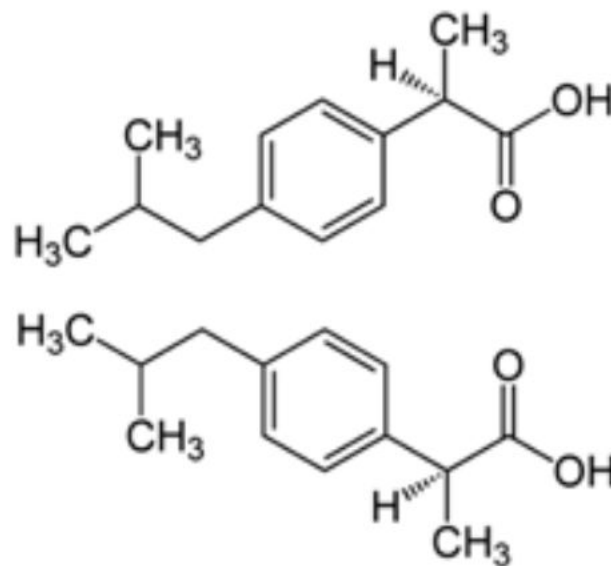
Оптические изомеры ибупрофена и левометицина

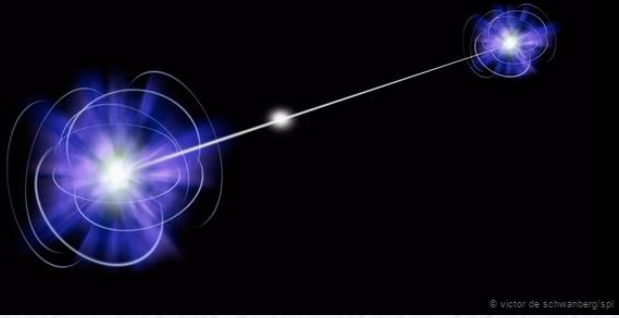


Левометицин: активен только левовращающий(-)

Синтомицин - рацемат

Ибупрофен: активен только S (-),
существует чистый препарат дексипрофен

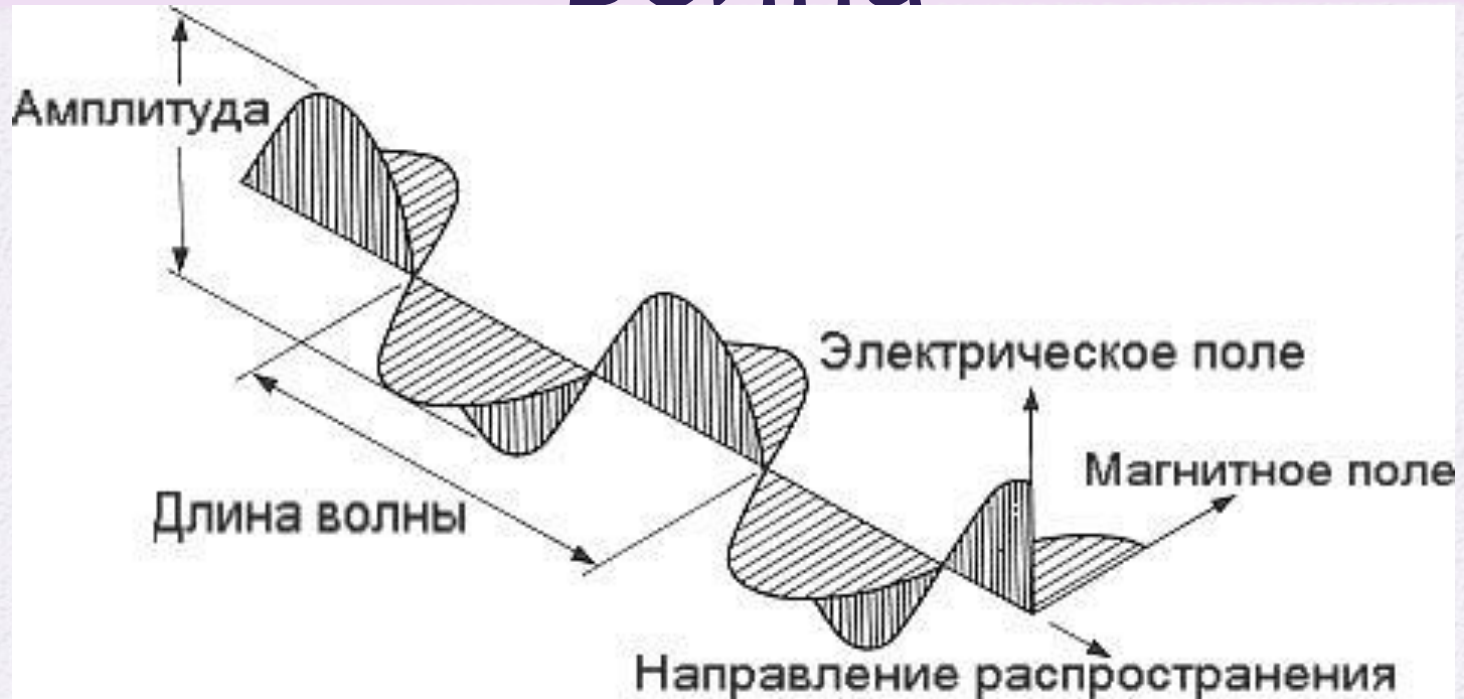




Свет

- Свет имеет дуальную природу. Свет может рассматриваться либо как электромагнитная волна (изучает волновая оптика), скорость распространения в вакууме которой постоянна, либо как поток фотонов — частиц, обладающих определённой энергией, импульсом, собственным моментом импульса и нулевой массой (нулевой массой покоя) (изучает геометрическая оптика).
- Свет представляет собой суммарное электромагнитное излучение множества атомов. Испускание кванта света происходит в результате перехода электрона из возбужденного состояния в основное.
- Электромагнитная волна, испускаемая в результате этого перехода, является поперечной, то есть вектора E (электрического поля) и H (магнитного поля) взаимно перпендикулярны и перпендикулярны направлению распространения.

Электромагнитная волна



- Для описания поляризации будем рассматривать световой вектор E , вектор напряженности электрического поля.

Естественный и

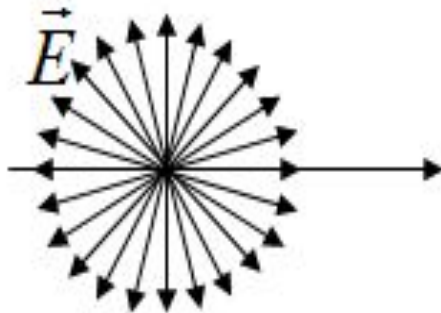
поляризованный свет

- Атомы излучают световые волны независимо друг от друга, поэтому световая волна, излучаемая телом в целом, характеризуется всевозможными равновероятными колебаниями светового вектора $\vec{E}$. Свет со всевозможными равновероятными ориентациями вектора называется **естественным**. Свет, в котором имеется преимущественное направление колебаний вектора $\vec{E}$ и незначительная амплитуда колебаний вектора $\vec{E}$ в других направлениях, называется **частично поляризованным**. В плоско поляризованном свете плоскость, в которой колеблется вектор $\vec{E}$, называется плоскостью поляризации.

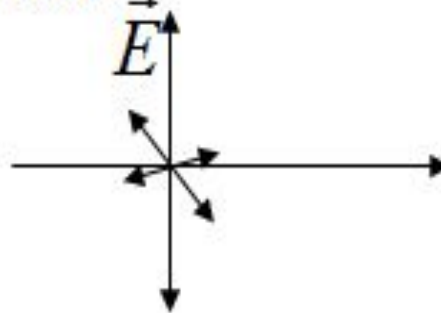
Поляризованный луч

- Поляризованный луч света - луч, у которого колебания происходят в одной плоскости. Для получения поляризованного луча света, естественный свет пропускают через призму Николя.

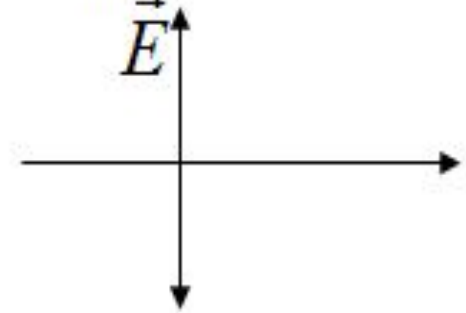
Естественный
свет



Частично
поляризованный
свет

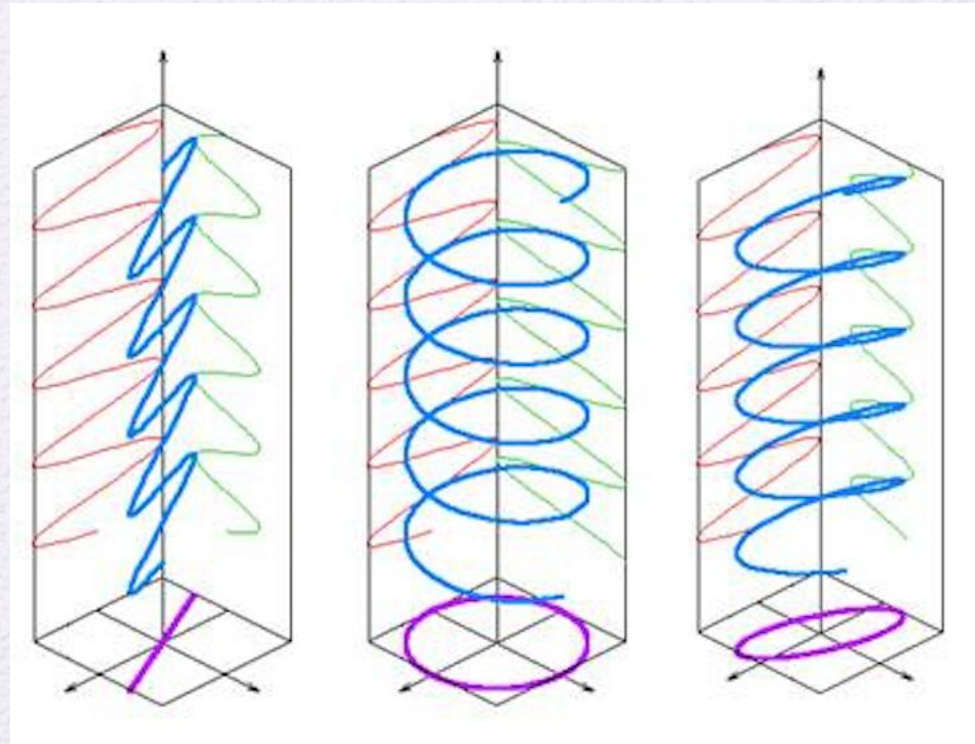


Плоско
поляризованный
свет



Виды поляризации

- В частности, различают **линейную, круговую и эллиптическую поляризации** в зависимости от формы кривой, которую описывает конец вектора амплитуды.



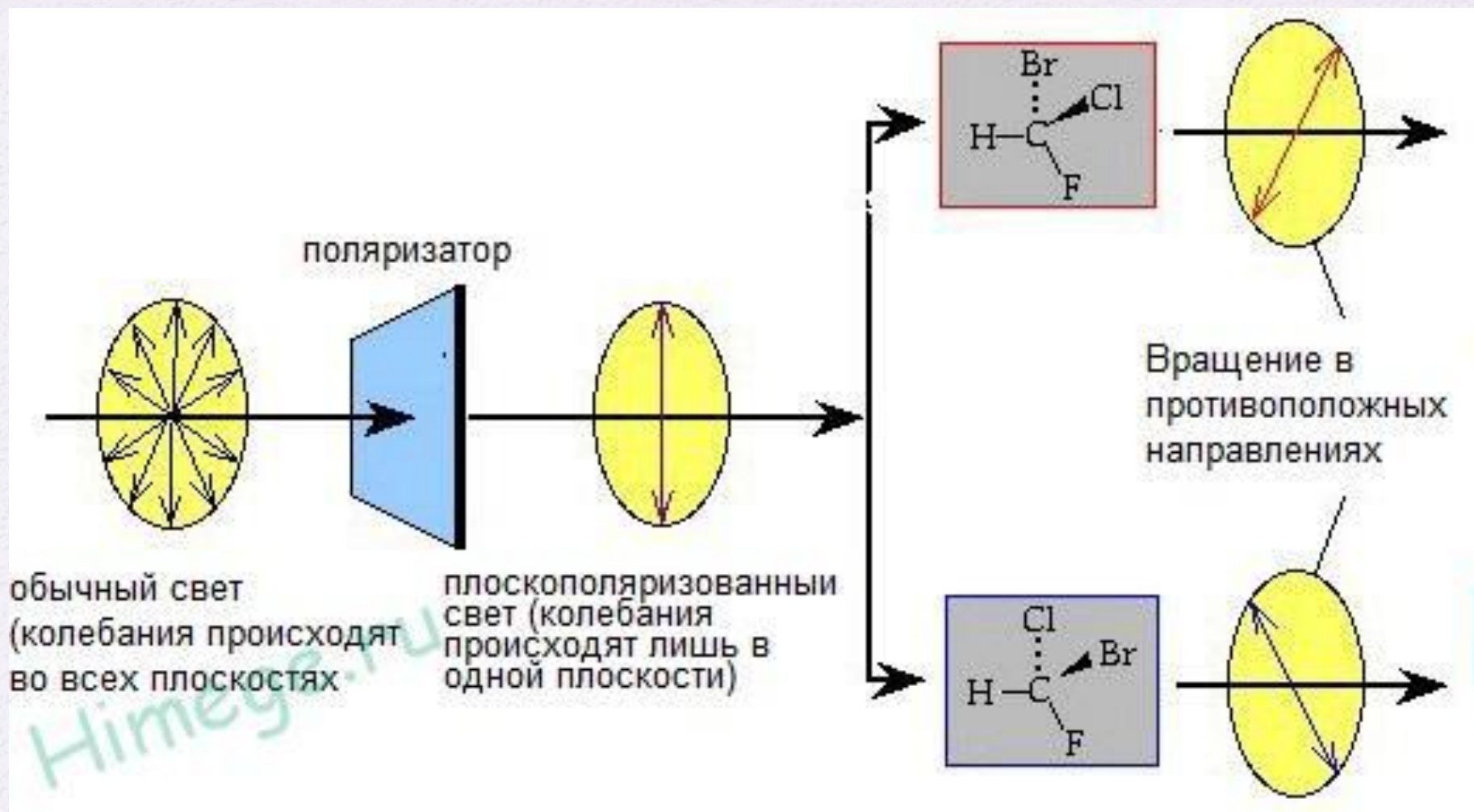
Плоскость поляризации

- Плоскость поляризации — плоскость, проходящая через направление распространения линейно поляризованного оптического излучения и направление его электрического вектора.

поляризации света в быту (поляризационные очки)



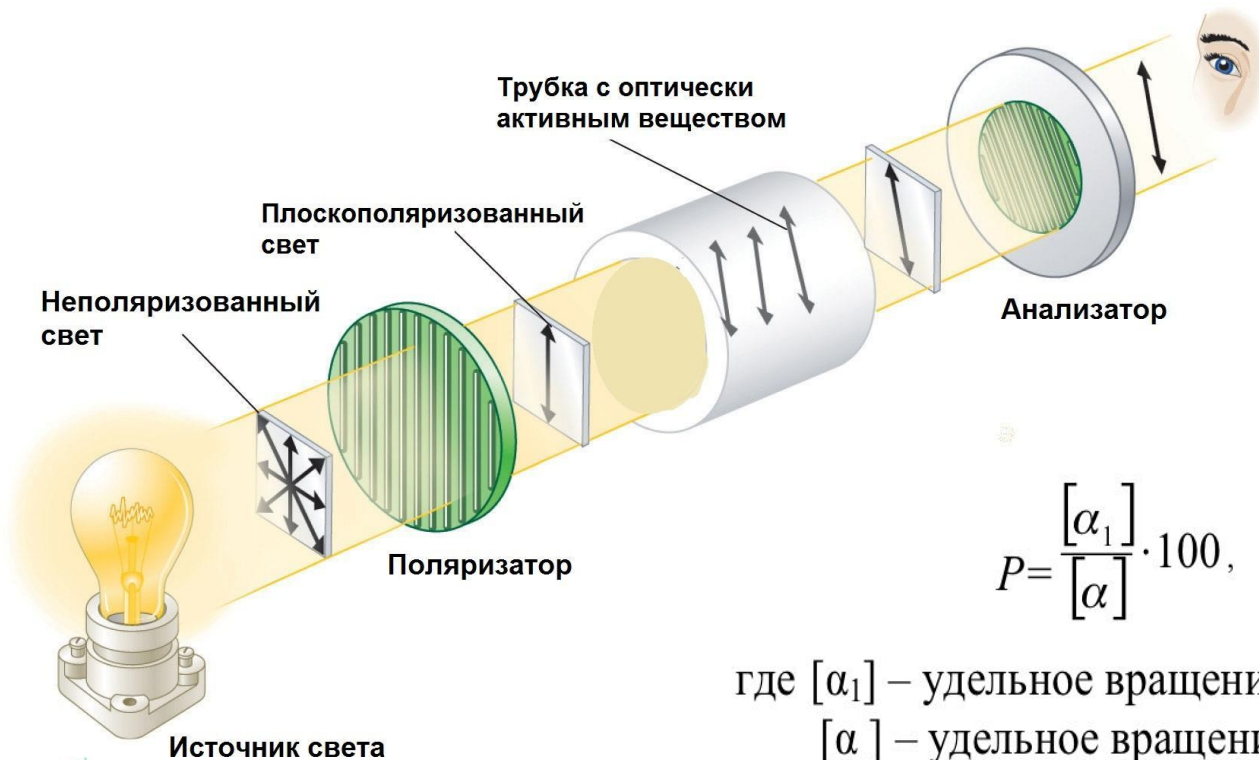
Оптическое вращение



Поляриметрия

- В основе лежит линейная поляризация.
- Подлинность определяют по определению показателя удельного оптического вращения.
- Энантиомеры, которые вращают плоскость поляризации вправо называют правовращающими и обозначают знаком «+»;
- Влево – называют левовращающими и обозначают знаком «-».

Определение оптического вращения



$$[\alpha]_D^{20} = \frac{\alpha}{l \cdot \rho_{20}}$$

$$[\alpha]_D^{20} = \frac{1000 \cdot \alpha}{l \cdot c},$$

$$P = \frac{[\alpha_1]}{[\alpha]} \cdot 100,$$

где $[\alpha_1]$ – удельное вращение данного образца,
 $[\alpha]$ – удельное вращение чистого энантиомера.

где:

α – угол вращения, измеренный при температуре $20 \pm 0,5^\circ\text{C}$, в градусах;

l – длина поляризметрической трубки, в дециметрах;

ρ_{20} – плотность при температуре 20°C , в граммах на кубический сантиметр. В фармакопейном анализе плотность заменяют относительной плотностью.

c – концентрация вещества в растворе, в г/л.

Поляриметрия (ОФС 42-0041-07)

- Чистоту определяют по величине удельного вращения, которое рассчитывается по формуле:

$$[\alpha]_D^{20} = \frac{\alpha \cdot 100}{C \cdot \ell}$$

- Количественное содержание оптически активного вещества в растворе рассчитывают по формуле:

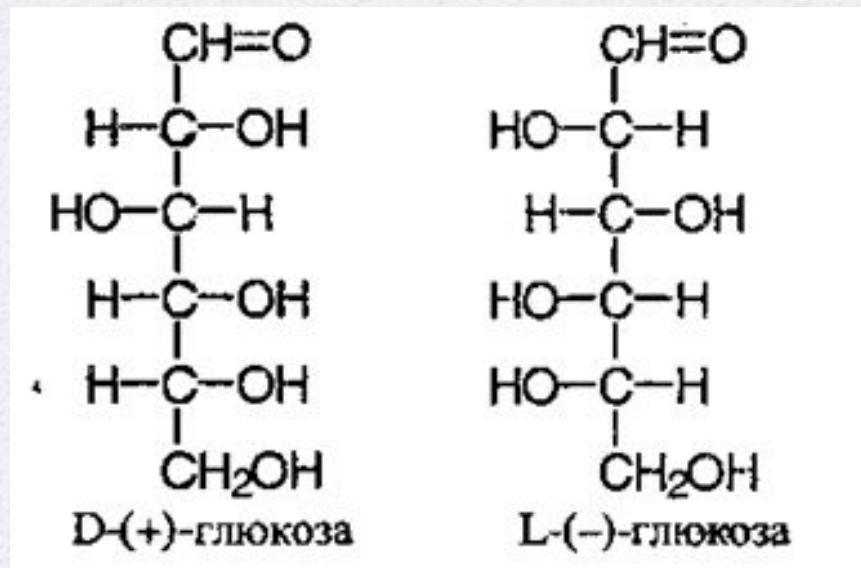
$$C = \frac{\alpha \cdot 100}{[\alpha]_D^{20} \cdot \ell}$$

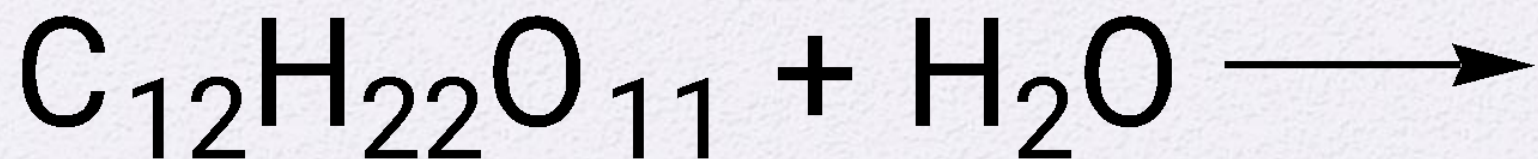
применение поляриметрического метода

- Поляриметрические методы анализа широко распространены, особенно для контроля производственных процессов в фармацевтической промышленности.
- (Для установления подлинности фарм. субстанции и ее энантиомерной чистоты)
- Однако наиболее широко применяются для контроля качества сахаров (количественное определение глюкозы, сахара (сахрометрия))

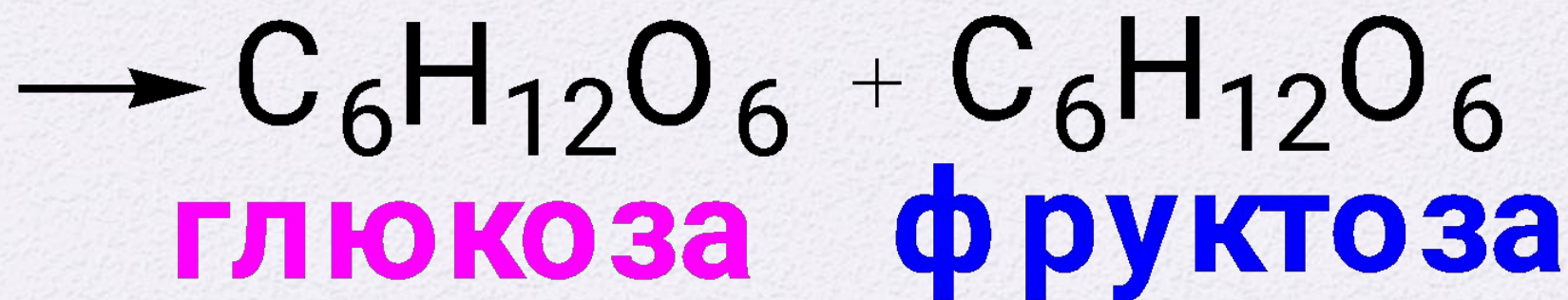
Поляриметрическое определение сахаров

- Глюкозы;
- Сахарозы.





сахароза



глюкоза

фруктоза

Спектрополяриметрические методы

- Дисперсия оптического вращения (ДОВ/ORD);
- Круговой дихроизм (КД/CD);
- ДИСПЕРСИЯ ОПТИЧЕСКОГО ВРАЩЕНИЯ (вращательная дисперсия) - зависимость угла поворота плоскости поляризации света в веществе от частоты (длины волны).
- Все вещества, вращающие плоскость поляризации, обладают ДОВ; она связана с круговым дихроизмом - различным поглощением света, поляризованного по кругу вправо и влево.

Круговой дихроизм

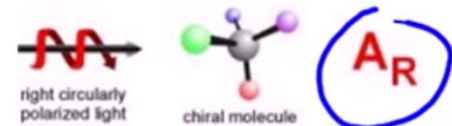
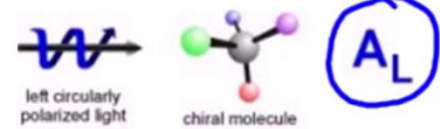
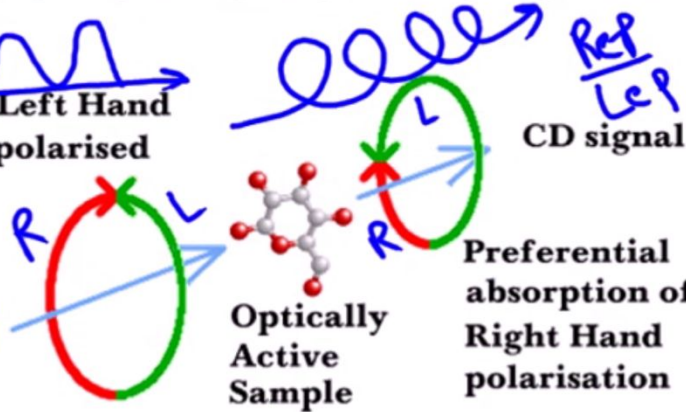
chroism

Circular dichroism

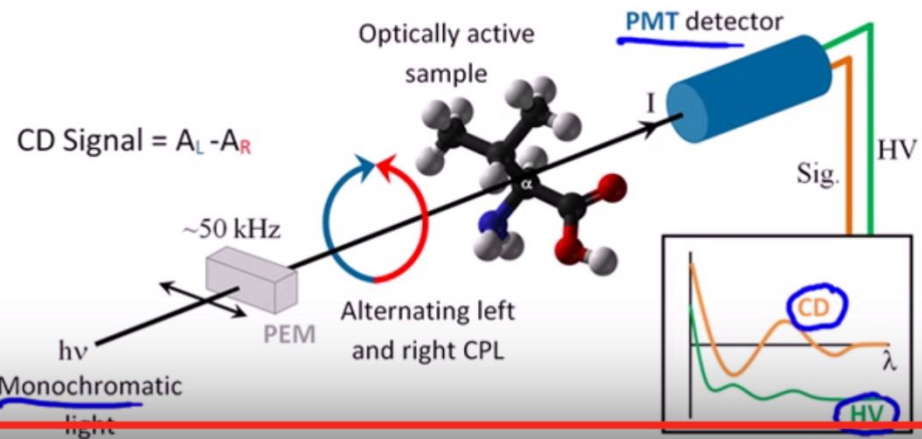
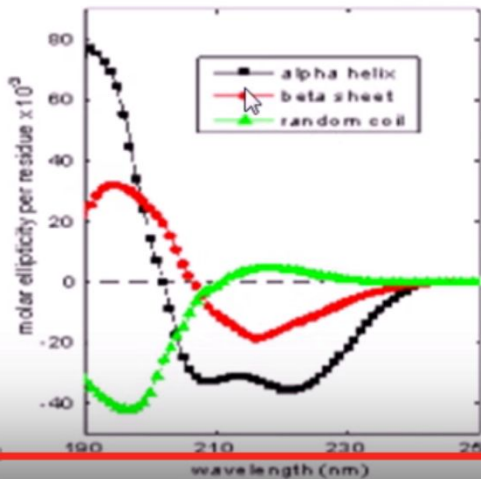
Proteins

Right and Left Hand
circularly polarised
light

Photon
Beam



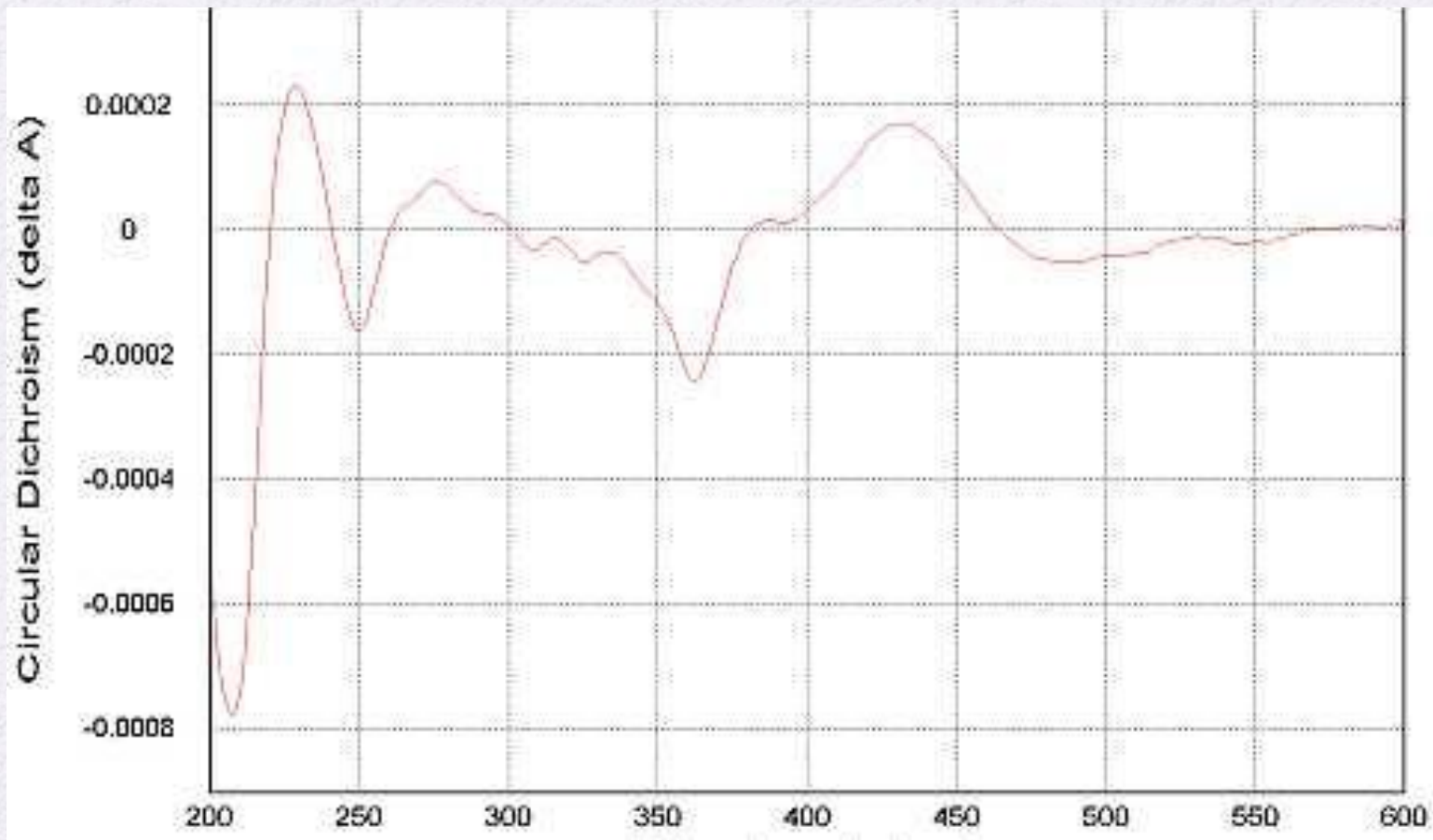
$$A_L - A_R = \Delta A$$



Круговой дихроизм

(КД спектр витамина В12)

- $CD = \text{КД} = \Delta A(\lambda) = A(\lambda)LPCL - A(\lambda)RPCL = A_L - A_R$



Применение

- На современном этапе чаще применяется метод кругового дихроизма.
- В фармацевтическом анализе;
- Для контроля измерения структуры биологических молекул (белков).