

effective positive charge states of tungsten atoms do not change when changing the crystal structure from monoclinic form of WO_3 oxide to its hexagonal modification. We have explored the effect of formation of oxygen vacancies on the electronic structure of monoclinic and hexagonal forms of WO_3 and realized that an additional near-Fermi subband is formed in such a case. The formation of this near-Fermi sub-band is originated from W 5d and W 6s states.

Results of the present first-principles band-structure calculations indicate that Cu 3d electronic states dominate the top of the valence band of triclinic CuWO_4 . Our results indicate that CuWO_4 is an indirect-gap semiconductor. In particular, our results allow for conclusion that the valence band of CuWO_4 has its maximum at the Γ point (the centre of the Brillouin zone), whereas the minimum of the conduction band in this tungstate is positioned at the high-symmetry Y point (0 0.5 0). Our DFT calculations indicate that, the indirect band gap in CuWO_4 is equal to about 2 eV. This theoretical value is somewhat smaller in comparison with the experimental estimations of the energy band gap of triclinic CuWO_4 : $E_g = 2.3$ eV [3] and $E_g = 2.06$ eV [4]. Furthermore, the present experimental results allow for statement that, the XPS W 4f core-level spectra of the monoclinic and hexagonal forms of WO_3 and triclinic CuWO_4 tungstate are simple spin-doublets with the XPS W 4f binding energies corresponding to those of tungsten ions being in the formal valence state +6. The values of the binding energies of the XPS O 1s core-level spectra in the monoclinic and hexagonal modifications of WO_3 and in triclinic CuWO_4 tungstate are found to be close to those determined previously for the double $\text{KY}(\text{WO}_4)_2$ tungstate [5].

References

- [1] F.E. Osterloh, Inorganic materials as catalysts for photochemical splitting of water, *Chem. Mater.* 20 (2008) 35-54.
- [2] A. Kudo, Y. Miseki, Heterogeneous photocatalyst materials for water splitting, *Chem. Soc. Rev.* 38 (2009) 253-278.
- [3] J. Ruiz-Fuertes, D. Errandonea, A. Segura, F.J. Manjón, Zh. Zhu, C.Y. Tu, Growth, characterization, and high-pressure optical structure of CuWO_4 , *High. Pres. Res.* 28 (2008) 565-570.
- [4] F.A. Benko, C.L. MacLaurin, F.P. Koffyberg, CuWO_4 and Cu_3WO_6 as anodes for the photoelectrolysis of water, *Matter. Res. Bulletin*, 17 (1982) 133-136.
- [5] V.V. Atuchin, L.D. Pokrovsky, O.Y. Khyzhun, A.K. Sinelnichenko, C.V. Ramana, Surface crystallography and electronic structure of potassium yttrium tungstate, *J. Appl. Phys.*, 104 (2008) 033518.

ЗАСТОСУВАННЯ ІНФРАЧЕРВОНОЇ ФУР'Є СПЕКТРОСКОПІЇ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ФРУКТОЗИ, ГЛЮКОЗИ ТА САХАРОЗИ У СВІЖИХ ФРУКТАХ

Артюх Ю. О., Шаварова Г. П.

Волинський національний університет імені Лесі Українки
artyhjulia@gmail.com, shavarova.hanna@vnu.edu.ua.

В останні десятиліття різко зросло споживання сахаридів, зокрема таких, як глюкоза, фруктоза та сахароза. Безалкогольні напої та оброблені харчові продукти мають високий вміст фруктози, яка використовується як підсолоджувач. За даними дослідження Б. Чарез та Л. Хебарда [1] надмірне споживання фруктози призводить до порушення обміну речовин, що, у свою чергу, викликає ожиріння, запальні процеси у печінці, окремі види раку та інсулінорезистентність, яка сприяє розвитку цукрового діабету.

Вразливим категоріям населення, а також тим, хто уже має перелічені захворювання, необхідно контролювати споживання моно- та дисахаридів, особливо фруктози у харчових продуктах. І якщо для кондитерських виробів і напоїв у маркуванні вказаний вміст вуглеводів, інколи цукрів, то для фруктів такої інформації споживач не має. Вміст фруктози, сахарози і глюкози залежить не тільки від виду фруктів, але і від сорту та значною мірою від ступеня зрілості плодів, тому табличні середні значення не інформативні. Наприклад, у бананах у процесі дозрівання ферменти розщеплюють крохмаль до простих цукрів, таких як глюкоза, фруктоза та сахароза. (табл. 1).

Таблиця 1. Вміст сахаридів у бананах різного ступеня стиглості

Ступінь стиглості бананів	Вміст крохмалю	Вміст моно- та дисахаридів (глюкоза, фруктоза, сахароза)	Солод-кість	Гліке-мічний індекс
Зелені	Високий (70-80) %	Низький (1-2) %	Низька	Низький
Стигли	Низький (< 1-5) %	Високий (15-20) %	Висока	Високий

Таким чином, важливо вказувати вміст і склад сахаридів для конкретної партії фруктів та корегувати дані у процесі зберігання. Для експрес контролю вмісту окремих сахаридів ми пропонуємо використовувати спектральний аналіз.

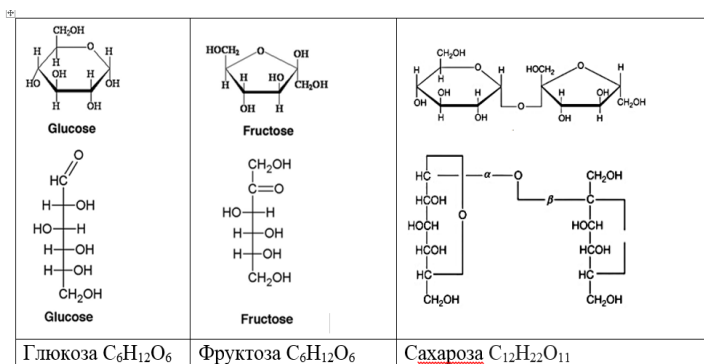


Рис.1. Структура основних сахаридів [1]

Оскільки глюкоза та фруктоза мають однаковий хімічний склад але різну просторову конфігурацію молекули (рис.1), то для їх ідентифікації необхідно використовувати

інфрачервону область спектра (4000 см^{-1} – 400 см^{-1}), яка відповідає переходам між коливальними рівнями молекули. За допомогою ІЧ –спектрів виявляються не окремі атоми, а групи атомів. Піки поглинання відображають області спектра, де відбуваються окремі типи коливань молекул: валентні (stretching), коли змінюється тільки довжина зв'язку між атомами, і деформаційні (різних типів), коли змінюються також кути між зв'язками. Оскільки кожен міжатомний зв'язок може брати участь у кількох різних коливаннях, окремі зв'язки можуть поглинати фотони більш ніж однієї частоти. Використовуючи каталоги стандартних ІЧ-спектрів (рис.2), можна зробити кількісний аналіз органічної речовини.

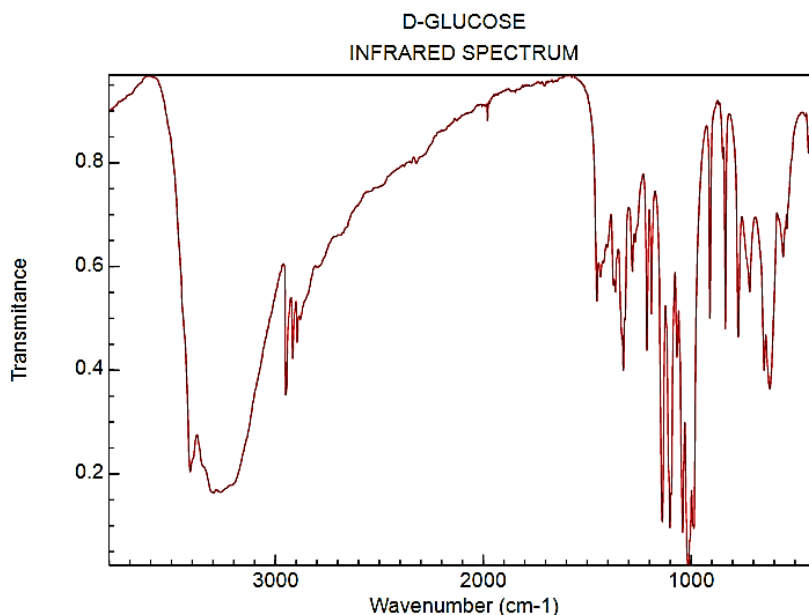


Рис.2. Спектр пропускання D-глюкози [2]

У спектрометрах за допомогою дифракційної ґратки виділяється дуже вузький інтервал довжин хвиль і вимірюється для нього коефіцієнт пропускання. І так послідовно для усіх довжин хвиль обраного діапазону. У Фур'є –спектрометрах на зразок потрапляють одночасно хвилі практично усіх частот діапазону і вимірюється інтенсивність сигналу. Для наступної точки даних промінь модифікується, містить іншу комбінацію частот. Так повторюється багато разів. До масиву даних застосовується перетворення Фур'є, і визначаються довжини хвиль, на яких відбувається поглинання світла речовиною.

Зміна спектрального складу пучка здійснюється інтерферометром Майкельсона, на який потрапляє світло від широкосмугового джерела. Зміщуючи рухоме дзеркало на певну відстань, ми змінюємо довжини хвиль, які підсилюються чи гасяться внаслідок інтерференції (рис.3).

Такий метод має низку переваг перед спектрометром з монохроматором. По-перше, підвищення співвідношення сигнал-шум через те, що інтенсивність хвиль усіх довжин вимірюється одночасно. По-друге, апертура, яка обмежує збіжність колімованого променя у Фур'є –спектрометрі, пропускає більше світла, ніж вхідна і вихідна щілини монохроматора. Це теж покращує співвідношення сигнал-шум. По-третє, зростає точність визначення довжини хвилі, оскільки шкала довжин хвиль калібрується лазерним променем, а не залежить від механічного руху дифракційних ґраток.

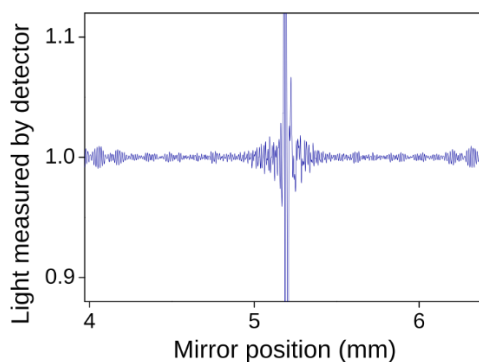


Рис.3 Інтерферограма з ІЧ-спектроскопією (FTIR). Центральний пік перебуває в положенні «нульова різниця ходу», де максимальна кількість світла проходить через інтерферометр до детектора [3].

Саме вимірювання триває кілька хвилин, стільки ж – обробка результатів і дослідження складу сахаридів. Більше часу інколи потребує приготування водних витяжок деяких фруктів. Таким чином, методом інфрачервоної Фур'є –спектроскопії можна точно і оперативно визначити вміст сахаридів у фруктах з метою інформування споживачів у торговельних мережах.

Список літератури

1. Charrez, Bérénice & Hebbard, Lionel. (2015). The role of fructose in metabolism and cancer. Hormone molecular biology and clinical investigation. 10.1515/hmbci-2015-0009.
2. NIST Chemistry WebBook
[URL:https://webbook.nist.gov/cgi/inchi?Spec=C2280446&Index=1&Type=IR&Large=on&SVG=on](https://webbook.nist.gov/cgi/inchi?Spec=C2280446&Index=1&Type=IR&Large=on&SVG=on)
3. FTIR-interferogram.svg [URL:https://commons.wikimedia.org/wiki/File:FTIR-interferogram.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:FTIR-interferogram.svg)