01

Свойства спектральных параметров межмолекулярных колебаний в воде и в слабом растворе хлорида натрия, полученных с помощью комбинационного рассеяния света

© А.В. Крайский, А.А. Крайский

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
Москва, Россия

e-mail: kraiski@sci.lebedev.ru

Поступила в редакцию 22.04.2025 г.
В окончательной редакции 17.12.2025 г.
Принята к публикации 12.02.2026 г.

С помощью комбинационного рассеяния света исследованы спектральные характеристики межмолекулярных колебаний воды в 0.9 % растворе хлорида натрия низкочастотной (около $50\,\mathrm{cm}^{-1}$ в ИК-поглощении) и высокочастотной (около 180;-;$200\,\mathrm{cm}^{-1}$ в ИК-поглощении) спектральных полос жидкой воды. В спектральных координатах квадрат ширины — квадрат частоты для обоих колебаний характеристики каждой полосы отображены в виде точки. В этих координатах показана совокупность экспериментально полученных спектральных точек хлорида натрия совместно с ранее полученной совокупностью точек воды. Для описания областей, занимаемых совокупностями точек, использовались эллипсы рассеяния. Представлены эллипсы рассеяния и их параметры для обеих полос межмолекулярных колебаний раствора хлорида натрия и спектров воды. Сопоставлены динамические параметры воды и раствора хлорида натрия (эффективная собственная частота, коэффициент неоднородного уширения, средняя однородная ширина, среднее время затухания колебаний), полученные в представлении о классическом затухающем осцилляторе.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние света, хлорид натрия, вода, низкочастотные спектры, межмолекулярные колебания, водородная связь, собственная частота, спектральные координаты, эллипс рассеяния, коэффициент неоднородного уширения, время затухания.

DOI: 10.61011/OS.2026.10.63936.7187-26

Введение

В этой работе мы продолжаем исследования свойств спектральных параметров низкочастотных (НЧ) спектров комбинационного рассеяния света (КРС) водных растворов, начатые в [1–7]. При исследованиях КРС НЧ межмолекулярных (ММ) колебаний исследуется спектр динамической восприимчивости (ДВ), который получается из оптического спектра КРС с помощью редукции (см., например, [2,5,6]). Межмолекулярные колебания воды характеризуются двумя типами колебаний — высокочастотным (ВЧ) с собственной частотой около $180-200\,\mathrm{cm}^{-1}$ (в спектре ДВ наблюдается широкая полоса, среднее значение максимума которой составляет около $170\,\mathrm{cm}^{-1}$) и НЧ с собственной частотой около $50\,\mathrm{cm}^{-1}$ (в спектре ДВ наблюдается широкая полоса, среднее значение максимума которой составляет около $47\,\mathrm{cm}^{-1}$). Общепринято эти полосы аппроксимировать двумя лоренцианами, имеющими по три параметра каждый, два из которых частотные: положение максимума ν и ширина $\Delta\nu$ [2,5,6]. Используемая нами аппроксимирующая функция позволила получать хорошую аппроксимацию до $320\,\mathrm{cm}^{-1}$ [2,5,6]. Наши исследования показали, что получаемые спектральные параметры как в воде, так и в растворе перекиси водорода нестабильны и проявляют случайный характер. Наблюдаемые частоты хаотически изменялись в некотором диапазоне (ВЧ от 165 до $172\,\mathrm{cm}^{-1}$ и НЧ от 44 до $48\,\mathrm{cm}^{-1}$) и оказались коррелированы с наблюдаемыми ширинами [4,5,6], которые также хаотически изменялись. Указаний на это в литературе мы не нашли. По характеристикам взаимозависимости удалось интерпретировать такую корреляцию как проявления свойств затухающего осциллятора с постоянной собственной частотой (СЧ) и с изменяющимся затуханием. Полосы частот неоднородно уширены, и стало возможным оценить коэффициент неоднородного уширения (коэффициент неоднородности, КН), однородные ширины обоих колебаний и, следовательно, их времена затухания. В основе этого объяснения лежит тот факт, что у классического гармонического осциллятора при постоянной собственной частоте квадрат частоты свободных колебаний и квадрат ширины спектра этого колебания связаны линейно с отрицательным коэффициентом связи, что и наблюдалось в эксперименте [6,7]. Это обусловило рассмотрение спектральных параметров полосы в спектральных координатах полосы: квадрат наблюдаемых ширин — квадрат наблюдаемых положений максимумов полосы.

Если исходить из представлений, что в воде существует сетка нестабильных водородных связей [8], то вода является упругой средой, спектры колебаний которой мы наблюдаем в наших экспериментах [6,7]. Ясно, что

наличие в такой среде примесей, в частности, посторонних атомов, ионов, молекул, будет изменять структуру жидкой „чистой“ воды, особенно вблизи примеси, что должно отражаться на динамических свойствах среды и соответственно на спектрах ММ колебаний. Эти искажения давно являются предметом исследований с веществами разного типа [9–14]. Были исследованы как молекулы, которые образуют водородные связи [9,10], так и ионные растворы [13,14]. В большинстве работ исследования проводились с довольно высокими концентрациями, до нескольких mol/L. При этом наблюдались сильные искажения НЧ спектров и по ним судили о структурных изменениях жидкости [9,14]. Наши исследования перекиси водорода показали, что в диапазоне концентраций 0–3 % столь сильных изменений вида спектра не происходит, визуально они идентичны и столь же хорошо описываются нашей аппроксимирующей функцией в том же диапазоне частот, различаются только их параметры, но на распределение точек в спектральных координатах перекись оказывает влияние даже при концентрации 0.023 % [15].

Возникает вопрос, как поведут себя растворы другого типа. В качестве объекта исследования настоящей работы был выбран медицинский раствор для инъекций хлорида натрия (ХН) концентрацией 0.9 % [16,17].

Цель настоящей работы: получить распределение совокупности 41 спектральных точек ХН строго в одной и той же концентрации в спектральных координатах и провести сопоставление распределений спектральных параметров как цельного объекта на основе количественных критериев спектральной области, занимаемой этой совокупностью, и динамических параметров эффективного осциллятора этой совокупности, во-первых, с соответствующими параметрами 65 спектров воды и, во-вторых, сопоставление той же совокупности спектров воды с частью этой совокупности из 51 точки, представленной в одной из предыдущих публикаций [7].

Сопоставление совокупностей точек в спектральных координатах мы будем проводить по интегральным параметрам. Область расположения точек в этих координатах будем характеризовать с помощью эллипса рассеяния [18,19], который определяется пятью параметрами: две координаты центра — средние значения квадратов ширины и положения максимума полосы, размеры большой и малой полуосей и угол между большой осью и осью абсцисс (оси квадратов ширины полосы), которые вычисляются из стандартных отклонений по обеим координатам и коэффициента корреляции совокупности точек. Динамические параметры вычисляются на основе двух первичных параметров прямой, аппроксимирующей совокупность спектральных точек: ее наклон, и значение квадрата СЧ (координаты точки пересечения прямой оси квадратов частот), с помощью которых определяются другие динамические параметры — КН, СЧ, однородная ширина полосы, время затухания свободных колебаний [6,7].

1. Рассматриваемые спектры

Схема и детали измерения описаны в [2,3,5–7]. Отметим, что спектры записаны на приборе U1000 фирмы Jobin–Yvon. Для каждого комплекта записи спектры записывали в области $3-320\,\mathrm{cm}^{-1}$ с шагом $1\,\mathrm{cm}^{-1}$, а для калибровок — спектр полосы КР в области валентных колебаний в диапазоне $2500-4000\,\mathrm{cm}^{-1}$ с шагом $8\,\mathrm{cm}^{-1}$ и реальную аппаратную функцию при длине волны возбуждающего излучения в диапазоне $-3-+3\,\mathrm{cm}^{-1}$ с шагом $0.1\,\mathrm{cm}^{-1}$. Ширина щели была $150\,\mu\mathrm{m}$ (реальная аппаратная функция не более $1.5\,\mathrm{cm}^{-1}$). Полосы динамической восприимчивости достаточно широкие: около $100\,\mathrm{cm}^{-1}$ для НЧ колебания и около $170\,\mathrm{cm}^{-1}$ для ВЧ колебания. Использовалась стандартная система счета фотонов с фотокатодом на основе GaAsSb. При записи калибровочного спектра в области валентных колебаний максимальная скорость числа отсчетов составляло около 2000 отсчетов/с, при записи спектра в области НЧ колебаний скорость счета изменялась от 15000 отсчетов/с при $3\,\mathrm{cm}^{-1}$ до 1000 отсчетов/с при $75\,\mathrm{cm}^{-1}$ и до 150 отсчетов/с при $300\,\mathrm{cm}^{-1}$. Был получен 41 спектр раствора ХН. Визуально спектры ДВ раствора ХН не отличались от спектров воды и растворов перекиси водорода и также хорошо аппроксимировались. Это хорошо видно на рис. 1, *a*, где показан полученный нами спектр КР ХН, и ниже на рис. 1, *b*, где показан полученный расчетом спектр ДВ и его аппроксимация.

Получение спектральных параметров раствора ХН полностью аналогично [2,3,5–7] и проводилось с помощью той же аппроксимирующей функции. В этой функции, кроме двух лоренцианов с тремя параметрами каждый, был добавлен двухпараметрический член, описывающий излом в правой части ДВ и линейно нарастающий член, связанный с постоянным фоном в записанном спектре КР (подробности в указанных выше работах). Минимизация функционала отклонения от аппроксимирующей прямой в пространстве девяти спектральных параметров аппроксимирующей функции проводилась методом Маркара (наискорейшего спуска).

Точки воды и раствора ХН в частотных координатах и соответствующие эллипсы рассеяния для обеих полос показаны на рис. 2. Видно, что эллипсы рассеяния хорошо описывают распределения точек. На рис. 1, *c, d* сравниваются спектры раствора ХН со спектрами воды. Прежде всего видно, что эти спектры качественно имеют одинаковый вид и различаются, видимо, лишь значениями параметров. Спектры, приведенные на рис. 1, *c*, соответствуют двум близко расположенным на рис. 2, *a* точкам воды и раствора ХН, обозначенным прямыми крестиками и расположенным чуть ниже и вблизи середины пунктирной прямой, аппроксимирующей все точки воды. Видимое рассогласование спектров по интенсивности связано скорее всего с различием интенсивностей

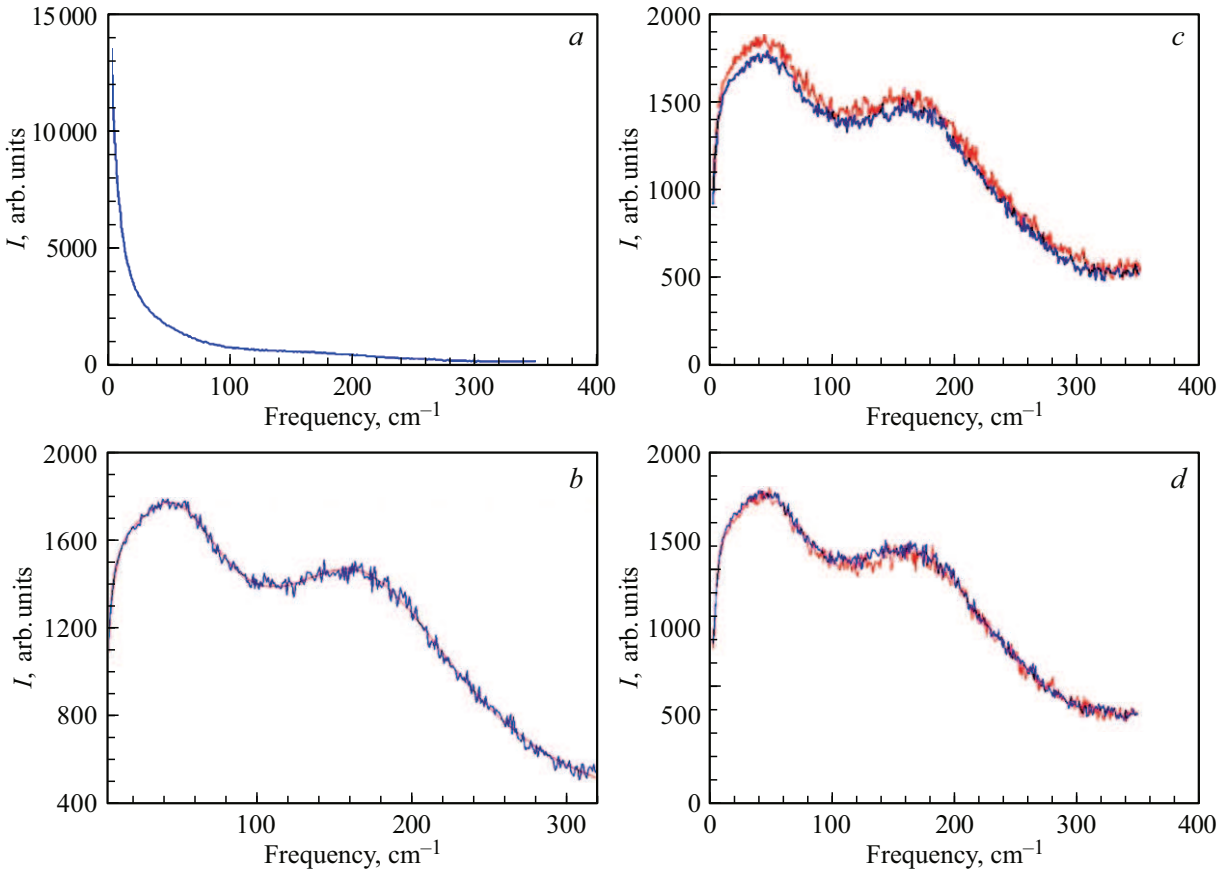

Рис. 1. (*a*) Спектр КРС НЧ области раствора ХН. (*b*) Спектр ДВ НЧ области раствора ХН (редуцированный спектр) и его аппроксимация. (*c*) Спектр ДВ ХН (синий, нижняя кривая) и воды (красный, верхняя кривая), у которых точки в спектральном пространстве ВЧ полосы на рис. 2, *a* расположены рядом. (*d*) Спектр ДВ ХН (синий, в области ВЧ полосы верхняя кривая) и воды (красный, в области ВЧ полосы нижняя кривая), у которых точки в спектральном пространстве ВЧ полосы на рис. 2, *a* расположены вблизи центров линий их эквивалентных осцилляторов.

соответствующих лоренцианов. Параметры НЧ лоренцианов этой пары спектров показаны теми же прямыми крестиками на рис. 2, *b*. Они уже не столь близки и расположены рядом с аппроксимирующими прямыми чуть выше их и недалеко от центра, но заметно смещены в сторону больших ширин. Спектры, приведенные на рис. 1, *d* обозначены на рис. 2 косыми крестиками и относятся к спектрам, высокочастотные параметры которых на рис. 2, *a* находятся вблизи центров аппроксимирующих прямых (этот спектр ХН и показан на рис. 1, *a*, а его спектр ДВ — на рис. 1, *b*). Параметры НЧ лоренцианов этих двух спектров таковы, что на рис. 2, *b* они находятся вблизи малых диаметров своих эллипсов, но удалены от своих аппроксимирующих прямых почти на четверть этих диаметров.

Спектральные точки ВЧ колебания раствора ХН визуально находятся в нижней половине области точек воды и в отличие от воды не наблюдается четко выраженного разделения всей области точек на обособленные ВЧ и НЧ участки. Однако неоднородности в распределении точек заметны. Все спектральные точки НЧ колебания визуально значительно смещены в сторону больших ширин.

2. Динамические параметры эффективных осцилляторов

Значения параметров эффективных осцилляторов сведены в табл. 1. Для сопоставления приведены и параметры исходного уменьшенного набора из 51 спектра. По параметрам аппроксимирующей прямой получены эффективные значения СЧ колебаний и КН аналогично [6,7].

Сопоставление полного набора воды (65 точек) с уменьшенным (51 точка) показывает, что большинство параметров близки, изменения не превышают 5 %, за исключением наклона аппроксимирующей прямой для НЧ полосы, который для уменьшенного набора почти на 11 % больше. В ХН для НЧ полосы наклон почти на треть больше, а для ВЧ полосы — в два раза меньше. Это привело к уменьшению КН в ХН для НЧ полосы на 13 % и к увеличению почти на 40 % для ВЧ

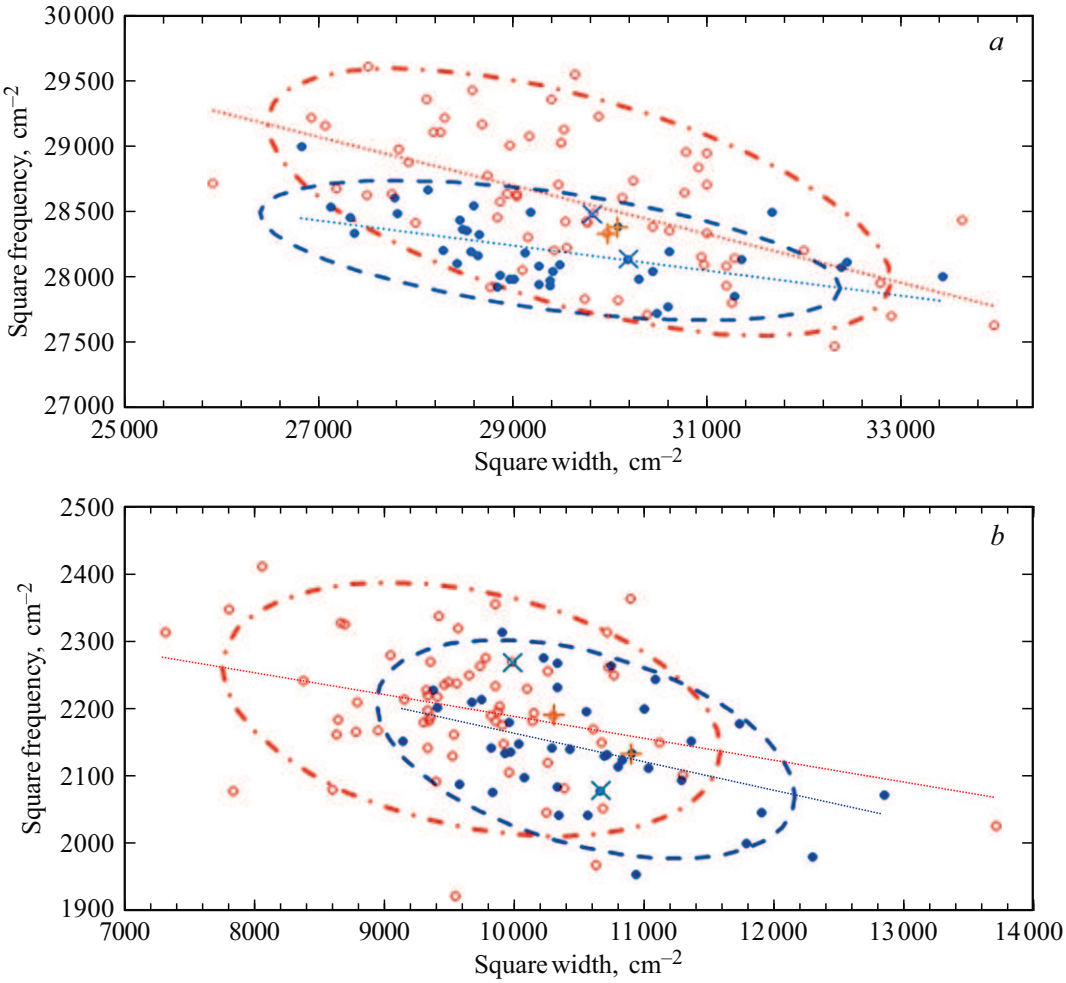

Рис. 2. Зависимости для раствора ХН (сплошные кружки) и воды (полые кружки) квадратов максимума лоренциана от квадрата его наблюдаемой ширины и их аппроксимация (пунктирные прямые): *a* — для ВЧ колебания, наклонными крестиками обозначены спектральные точки воды и ХН, находящиеся вблизи центра своих аппроксимирующих прямых, прямыми крестиками — близкие друг к другу точки воды и ХН, расположенные неподалеку от центра прямой, аппроксимирующей все точки воды; *b* — для НЧ колебания, крестики обозначают параметры НЧ лоренцианов тех же спектров, что и на рисунке *a*. Штриховые (ХН) и штрихпунктирные (вода) эллипсы — для расстояния, соответствующего 2σ.

1

полосы. Вследствие этого средняя однородная ширина линии (в таблице не приведена) увеличилась для НЧ: ХН 29.98 cm^{-1}, вода 25.00 cm^{-1}, и сильно уменьшилась для ВЧ: ХН 74.95 cm^{-1}, для воды 105.02 cm^{-1}. Соответственно, и среднее время затухания (ВЗ) [6] для НЧ колебания уменьшилось почти на 17 % (245 fs для ХН, 294 fs для воды), а для ВЧ увеличилось на 40 % (98 fs для ХН, 70 fs для воды). По сравнению с водой СЧ в ХН для НЧ увеличилась всего на 0.76 cm^{-1}: 50.89 cm^{-1} (ХН), 50.13 cm^{-1} (вода), а для ВЧ колебания — уменьшилась на 8.6 cm^{-1}: 176.0 cm^{-1} для ХН, 184.6 cm^{-1} для воды. Таким образом, для раствора ХН для ВЧ колебания по сравнению с водой заметно понижается СЧ и уменьшается однородная ширина, соответственно, повышается время затухания колебания.

Для адекватного сопоставления величин надо знать их доверительный интервал (ДИ). В табл. 1 для наклона и СЧ приведены отношения их ДИ к их же средним значениям (СЗ). Для квадрата СЧ (СЧ2) ВЧ полосы параметры ДИ/СЗ составляют 0.71 % (СО 2.8 %) для воды и 0.75 % (СО 2.3 %) для ХН, т. е. практически совпадают. Для СЧ это отношение примерно в 2 раза меньше. Для наклона ДИ/СЗ составляет 4.4 % для воды и 8.2 % для ХН. Это скажется на КН и на времени затухания, но влияние также будет изменено в 2 раза.

Для НЧ полосы параметр ДИ/СЗ больше. Для СЧ2 он составляет 1.1 % для воды и 1.9 % для ХН, а для наклона — 9.1 % для воды и 11.1 % для ХН. На СЧ и на время затухания влияние будет аналогичное. При таких количествах спектров ДИ для СЧ каждой из полос значительно уже, чем для наклона и связанных с ним параметров. Для НЧ ДИ больше и для СЧ, и для наклона. Для ХН для большинства параметров ДИ больше, чем для воды. Одной из причин этого является

Таблица 1. Параметры эффективных осцилляторов

Полоса	Среда	Наклон	ДИ/СЗ	СЧ2, cm^{-2}	ДИ/СЧ2	КН	СЧ, cm^{-1}	СШ, cm^{-1}	ВЗ, фс
НЧ	вода65	−0.032	0.091	2512.6	0.011	3.934	50.13	98.36	294.2
НЧ	вода51	−0.036	0.116	2540.2	0.016	3.737	50.40	98.54	278.9
НЧ	ХН	−0.043	0.111	2589.5	0.019	3.426	50.89	102.72	245.3
ВЧ	вода65	−0.186	0.044	34082.1	0.0071	1.640	184.61	172.29	70.0
ВЧ	вода51	−0.183	0.071	33972.3	0.0113	1.653	184.32	172.15	70.6
ВЧ	ХН	−0.096	0.082	31002.6	0.0075	2.287	176.08	171.41	98.1

на треть меньшее число спектров, что дает почти такое же увеличение квантиля распределения Стьюдента при расчете ДИ. Сузить ДИ сразу для всех параметров можно увеличением числа спектров.

3. Параметры эллипсов рассеяния

Такие двумерные распределения удобно характеризовать эллипсами рассеяния [18,19]. Для n пар точек (x_i, y_i) выражение коэффициента корреляции K_c имеет вид

$$K_c = \sum_{i=1}^{n}(x_i - a_y)/ \Big/ \left(\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - a_x)^2} \times \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_y)^2}\right), \qquad (1)$$

где (a_x, a_y) — средние значения. Эти три величины, а также дисперсии σ_x^2 и σ_y^2, берутся в качестве исходных для расчетов параметров эллипса, среди которых — угол большой оси эллипса с осью абсцисс α:

$$\alpha = \frac{1}{2}\,\mathrm{arctg}\left(\frac{2K_c\sigma_x\sigma_y}{\sigma_x^2 - \sigma_y^2}\right), \qquad (2)$$

и главные среднеквадратичные отклонения (ГСКО) σ_ψ^2 и σ_ϕ^2:

$$\left.\begin{aligned}\sigma_\psi^2 &= \sigma_x^2\cos^2\alpha + K_c\sigma_x\sigma_y\sin 2\alpha + \sigma_y^2\sin^2\alpha\\ \sigma_\phi^2 &= \sigma_x^2\sin^2\alpha - K_c\sigma_x\sigma_y\sin 2\alpha + \sigma_y^2\cos^2\alpha\end{aligned}\right\}. \qquad (3)$$

Таким образом, распределение характеризуется пятью параметрами эллипса рассеяния: координатами центра — средними значениями квадратов наблюдаемых ширин колебаний и квадратов частот, ориентацией наклона и размерами главных осей эллипса. При расчетах в качестве σ_x и σ_y брались соответствующие стандартные отклонения. Следует помнить, что мы работаем в координатах квадратов ширин и частот. У эллипсов, приведенных на рис. 1, в качестве главных полуосей брались увеличенные вдвое корни квадратные из главных среднеквадратичных отклонений ГСКО, рассчитанных по выражению (3).

4. Параметры эллипсов рассеяния воды и раствора хлорида натрия

Полученные исходные величины и вычисленные параметры эллипсов рассеяния сведены в табл. 2 ($СО_ш$ — среднее отклонение по квадратам ширин, $СО_ч$ — среднее отклонение по квадратам частот, остальные обозначения введены в соотношениях (1)–(3)). Визуально по сравнению с водой эллипс ХН для полосы НЧ колебаний заметно меньше по обоим направлениям и значительно смещен почти по линии эффективного осциллятора в сторону широких полос и пониженных частот.

Для ВЧ колебания эллипс ХН примерно при том же положении края для малых ширин и немного меньшим значением максимальной ширины, значительно сплюснут сверху по оси частот.

Сопоставление параметров эллипсов воды для полного (65 точек) и уменьшенного (51 точка) наборов показывает, что заметные изменения произошли для полосы НЧ колебаний: для полного набора большая ось увеличилась на 23 %, малая — на 16 %, наклон оси эллипса уменьшился на 11 %, отношение осей уменьшилось на 9 %, координаты центра изменились менее, чем на 0.5 %. Для ВЧ полосы большая ось увеличилась на 12 %, что вместе с уменьшением малой оси на 7 % привело к уменьшению отношения осей на 23 %. Наклон и координаты центра изменились незначительно.

Для ХН изменения по сравнению с водой более значительны. Координаты центра заметно изменились для НЧ полосы: средний квадрат ширины увеличился на 9 %, средний квадрат частоты уменьшился почти на 3 %, для ВЧ полосы уменьшения координат центра незначительны: по ширине на 1 %, по частоте на 1.3 %. Для НЧ полосы наклон увеличился на 31 %, для ВЧ — уменьшился вдвое. Отметим, что для НЧ полосы для всех трех наборов точек наклон оси эллипса и наклон прямой эффективного осциллятора совокупности точек совпадают, а для ВЧ полосы заметно отличаются. Большая ось для НЧ полосы уменьшилась на 16 %, а для ВЧ — на 8 %, малая ось для НЧ уменьшилась на 17 %, для ВЧ — на 44.5 % (однако по сравнению с уменьшенным набором точек воды большая ось в случае ХН для обеих полос слегка больше, чем для воды: для НЧ на 9.4 %, для ВЧ на 5 %). Отношение осей уменьшилось для НЧ незначительно (на 1.8 %), а для

Таблица 2. Параметры эллипсов

Полоса	Среда	Наклон оси	σ_ψ^2,cm^{-2}	σ_ϕ^2,cm^{-2}	$\sigma_\phi^2/\sigma_\psi^2$	a_x, cm^{-2}	a_y, cm^{-2}	CO$_ш$, cm^{-2}	CO$_ч$, cm^{-2}	K_c
НЧ	вода65	−0.033	959.4	88.65	0.092	9674	2200	94	959	−0.330
НЧ	вода51	−0.036	737.5	74.51	0.101	9709	2192	79	737	−0.334
НЧ	ХН	−0.043	807.1	73.21	0.091	10551	2141	81	806	−0.424
ВЧ	вода65	−0.196	1638.1	406.76	0.248	29682	28567	511	1609	−0.585
ВЧ	вода51	−0.200	1431.1	435.54	0.304	29635	28548	513	1405	−0.502
ВЧ	ХН	−0.098	1501.9	225.91	0.150	29381	28194	268	1495	−0.533

ВЧ — на 39 %. Таким образом, разброс точек в случае ХН для обеих полос меньше, чем для воды.

5. Краткое обсуждение

Распределение точек ВЧ полосы колебаний в спектральных координатах для ХН в определенном смысле похоже на распределение для раствора перекиси водорода [15]. В ХН так же, как и в перекиси практически все точки расположены ниже прямой, аппроксимирующей все точки воды. Заметно выше этой прямой расположены только две точки и есть еще две почти совпадающие точки, одна из которых лежит на прямой, а другая — чуть выше. Эти четыре точки имеют самые большие ширины в совокупности. Таким образом, в растворе ХН, как и в растворе перекиси, практически нет состояний с высокими наблюдаемыми частотами. Причиной этого могут быть как отсутствие состояний с высокой жесткостью, например, с большим числом связей на одну молекулу, так и вследствие более сильного затухания. Для точек НЧ полосы понижение наблюдаемых частот также имеется, но в значительно меньшей степени, и ясно выражено значительно большее число состояний с большей шириной полосы и отсутствие состояний с малой шириной.

Эллипсы рассеяния хорошо помогают восприятию и оценке распределения спектральных точек и помогают проводить сопоставление различных совокупностей спектральных точек как визуально в спектральных координатах, так и посредством сравнения параметров эллипсов рассеяния.

Заключение

1. Получены спектры межмолекулярных колебаний 0.9 %-го раствора ХН и показаны в спектральных координатах квадрат ширины — квадрат частоты обеих полос

2. Качественно в частотных координатах для ХН по сравнению с водой наблюдаются значительные изменения для параметров ВЧ колебания: все точки располагаются преимущественно в нижней части области, занимавшейся точками воды, т. е. состояния с более высокими частотами при той же ширине в ХН не наблюдаются

3. Обнаружено, что эффективные динамические параметры НЧ колебаний для ХН подверглись небольшим изменениям: коэффициент неоднородности уменьшился на 12.9 %, собственная частота увеличилась на 1.5 %. Заметные изменения отмечены для ВЧ колебаний: собственная частота уменьшилась на 4.6 %, коэффициент неоднородности увеличился на ~ 40 %, что привело к такому же увеличению эффективного времени затухания колебаний.

4. Показано, что кроме эффективных динамических параметров при сравнении спектральных параметров следует пользоваться совокупностью одномерных статистических параметров (среднее значение и дисперсия) с добавлением двумерного параметра (коэффициента корреляции). Удобно также пользоваться совокупностью двумерных параметров, описывающих эллипс рассеяния в этих двумерных координатах: центр эллипса (средние значения квадрата ширины полосы и квадрата положения максимума), размеры осей эллипса и угол ориентации большой оси эллипса, и представлять эллипсы совместно со спектральными точками сопоставляемых образцов в спектральных координатах.

5. Детально сопоставлены динамические параметры обеих полос ММ колебаний воды и 0.9 %-го раствора ХН и параметры их эллипсов рассеяния. Показаны возможности повышения ДИ значений определяемых динамических параметров.

Благодарности

Авторы вражают глубокую благодарность Н.Н. Мельнику за измерение массива спектров и полезные дискуссии при работе над этим материалом.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник, А.Г. Сокольский. В Сб. трудов 6-й Межд. конф. „*Экология человека и природа*“ (ИвГУ, Москва — Плес, 2004). С. 52.

[2] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник. Кр. сообщ. по физике ФИАН, **12**, 6 (2005). [A.V. Kraiski, N.N. Mel'nik. Bull. Lebedev Phys. Inst., **32** (12), 6 (2005)].

[3] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник. Кр. сообщ. по физике ФИАН, **1**, 42 (2006). [A.V. Kraiski, N.N. Mel'nik. Bull. Lebedev Phys. Inst., **33** (1), 34 (2006)].
[4] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник. Кр. сообщ. по физике ФИАН, **1**, 49 (2006). [A.V. Kraiski, N.N. Mel'nik. Bull. Lebedev Phys. Inst., **33** (1), 41 (2006)].
[5] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник. Биофизика, **57** (6), 965 (2012). DOI: 10.1134/S0006350912060073 [A.V. Kraiski, N. N. Mel'nik. Biophys., **57** (6), 750 (2012)].
[6] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник. Опт. и спектр., **124** (5), 628 (2018). DOI: 10.21883/OS.2018.05.45943.300-17
[7] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник, А.А. Крайский. Опт. и спектр., **128** (2), 195 (2020). DOI: 10.21883/OS.2020.02.48960.339-18 [A.V. Kraiskii, N.N. Mel'nik, A.A. Kraiskii. Opt. Spectrosc., **128**, 191 (2020). DOI: 10.1134/S0030400X20020125].
[8] Г.Г. Маленков. Журнал структурной химии, **47**, S5–S35 (2006).
[9] A. Idrissi, S. Longelin, FJ. Sokolič. Phys. Chem. B, **105**, 6004 (2001).
[10] A. Idrissi, F. Sokolič, A. Perera. J. Chem. Phys., **112**, 9479–9488 (2000).
[11] A. Lerbret, F. Affouard, P. Bordat, A. Hédoux, Y. Guinet, M. Descamps. J. Chem. Phys. **131**, 245103 (2009). DOI: 10.1063/1.3273218
[12] N. Kuzkova, A. Yakunov, M. Bilyi. Adv. Opt. Technol., 798632, 7 (2014). DOI: 10.1155/2014/798632
[13] N. Tao, G. Li, X. Chen, W.M. Du, H.Z. Cummins. Phys. Rev. A, **44** (10), 6665 (1991). DOI: 10.1103/PhysRevA.44.6665
[14] S.A. Burikov, T.A. Dolenko, V.V. Fadeev, I.I. Vlasov. Laser Phys., **17** (9), 1 (2007).
[15] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник, А.А. Крайский. Опт. и спектр., **130** (10), 1506 (2022). DOI: 10.21883/OS.2022.10.53620.2621-22
[16] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник, А.А. Крайский. В Сб. трудов второй Всероссийской конференции „*Физика водных растворов*“ (ИОФ РАН, Москва, 2019). С. 48. DOI: 10.24411/9999-012A-2019-10019
[17] А.В. Крайский, Н.Н. Мельник, А.А. Крайский. В Сб. трудов третьей Всероссийской конференции „*Физика водных растворов*“ (ИОФ РАН, М., 2020), [Электронный ресурс]. URL: http://physwatsol.ru/proceedings
[18] А.К. Платонов, Д.С. Иванов. *Методы навигации в условиях неопределенности, Методическое пособие к курсу* (Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, М., 2013). [Электронный ресурс]. https://keldysh.ru/kur/akp.pdf
[19] *Определение параметров эллипса рассеяния* (ООО „РесурсПромАльянс“). [Электронный ресурс]. http://www.ess-ltd.ru/elektro/orientaciya-pp.php