

УДК 004.42:535.361

Точилін С.Д.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>канд. фіз.-мат. наук, доц. НУ «Запорізька політехніка»

## КОМП'ЮТЕРНА ПРОГРАМА ДЛЯ АНАЛІЗУ РІЗНИЦЕВИХ СПЕКТРІВ ВТОРИННОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

Останнім часом при оптичних дослідженнях для кількісного порівняння об'єктів вивчення використовують різницеві спектри (РС)  $I_X^E(\lambda)$  [1], які визначають за допомогою виразу:

$$I_X^E(\lambda) = I - |I_X(\lambda) - I_E(\lambda)|, \quad (1)$$

де  $\lambda$  - довжина хвилі,  $I_E(\lambda)$  та  $I_X(\lambda)$  - нормовані спектри вторинного випромінювання (СВВ) для еталонної речовини (Е) і речовини, яку аналізують (Х), відповідно.

Оцінка ідентичності або відмінності об'єктів дослідження здійснюється за допомогою коефіцієнта відповідності [1]:

$$K = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (I - |I_X(\lambda) - I_E(\lambda)|)_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N I_X^E(\lambda_i), \quad (2)$$

де  $N$  - число замкнутих інтервалів  $\Delta\lambda$  у спектральному діапазоні довжин хвиль від  $\lambda_I$  до  $\lambda_{II}$  із шириною  $B$ ,  $B = \lambda_{II} - \lambda_I$ ,  $N = B / \Delta\lambda$ .

Згідно (2), при  $\Delta\lambda \rightarrow 0$ , коефіцієнт  $K$  має значення:

$$K = \frac{1}{B} \int_{\lambda_I}^{\lambda_{II}} I_X^E(\lambda) d\lambda. \quad (3)$$

У даній роботі, з допомогою мови програмування JavaTM, для аналізу РС була розроблена комп'ютерна програма ST\_DS. Програма мала графічний інтерфейс користувача. За допомогою меню «File» СВВ еталонної та речовини, яку аналізують, завантажувалися з \*.csv файлів і відображались у вигляді графіків на панелі додатка. Для ініціалізації спектрального діапазону формування РС використовувалися поля вводу «Low value, nm» і «High value, nm». У той час при натисканні на кнопку «Calculate» програма ST\_DS розраховувала різницевий спектр. Потім визначала коефіцієнт  $K$  за

допомогою виразу (3). Крім того, розраховувала мінімальне  $I_{min}$  та максимальне  $I_{max}$  значення  $I_X^E(\lambda)$ . При цьому РС відображався на панелі додатка в графічному вигляді, а його дані поміщалися в таблицю додатка. У той час значення  $K$ ,  $I_{max}$  і  $I_{min}$  з'являлися в полях вводу «K», «I max» і «I min», відповідно.

На рис.1, як приклад, зображене вікно програми ST\_DS з  $I_X^E(\lambda)$ ,  $K$ ,  $I_{max}$  і  $I_{min}$  при порівнянні спектрів фотолюмінесценції (ФЛ) таблеток медпрепаратів - дроваверина (еталон) та дипіридамола.

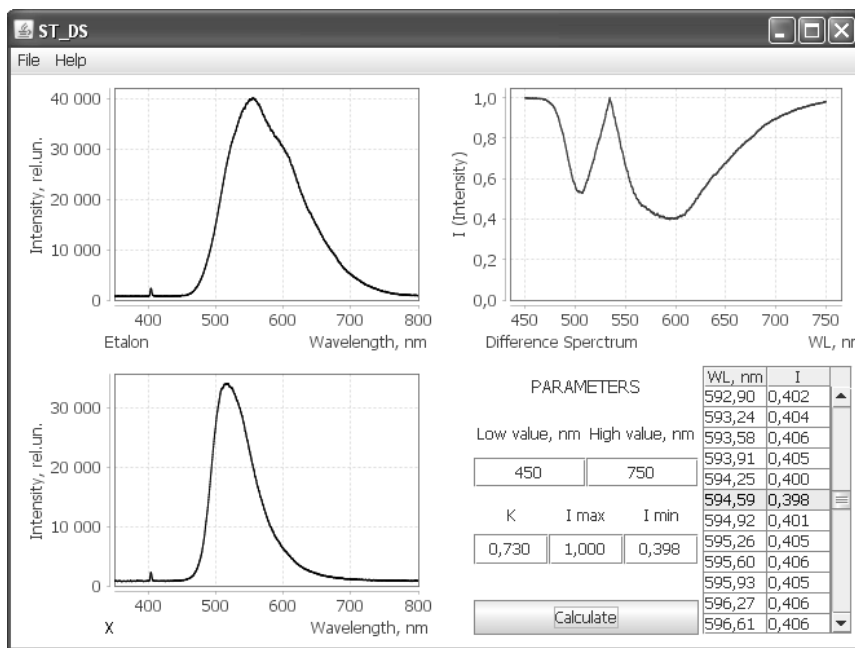


Рисунок 1 – Вікно програми ST\_DS при розрахунку РС,  $K$ ,  $I_{max}$  і  $I_{min}$

ФЛ збуджувалася випромінюванням фіолетового лазера, яке попередньо проходило через інтерференційний світлофільтр (СФ), з максимумом пропускання на довжині хвилі 405 нм. Її сигнали, пройшовши СФ ЖЗС5, реєструвалися спектрометром ВТС-110S.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Умаров М.Ф. Оптическая спектроскопия биоактивных препаратов / М.Ф. Умаров, В.С. Горелик. - Вологда: ВоГУ, 2014. - 147 с.