

საჯარო სამართლის იურიდიული პირი - ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო
უნივერსიტეტი

ზუსტ მეცნიერებათა და განათლების ფაკულტეტი
ფიზიკის დეპარტამენტი

ჯაბა შაინიძე

ნივთიერების ოპტიკური თვისებების კვლევა ადაპტიური
ნახევარგამტარული CCD ფოტო დეტექტორით
რეგისტრირებული სიგნალის პროგრამულ-აპარატურული
მართვის საფუძველზე

(ნაშრომი წარდგენილია ფიზიკის დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად)

სამეცნიერო ხელმძღვანელი:

პროფესორი ნ. ლომიძე

ბათუმი - 2024

როგორც წარდგენილი სადისერტაციო ნაშრომის ავტორი, ვაცხადებ, რომ ნაშრომი წარმოადგენს ჩემს ორიგინალურ ნამუშევარს და არ შეიცავს სხვა ავტორების მიერ აქამდე გამოქვეყნებულ, გამოსაქვეყნებლად მიღებულ ან დასაცავად წარდგენილ მასალებს, რომლებიც ნაშრომში არ არის მოხსენიებული ან ციტირებული სათანადო წესების შესაბამისად.

ჯაბა შაინიძე

22.04.2024

შინაარსი

სადისერტაციო ნაშრომის მოკლე აღწერა	5
შესავალი:	5
კვლევის მიზანი:	9
კვლევის მატერიალურ-ტექნიკური ბაზა:	9
პრობლემის დასმა:	15
მეცნიერული სიახლე:	17
ნაშრომის პრაქტიკული მნიშვნელობა:	17
კვლევის აქტუალობა და ლიტერატურული მიმოხილვა:	18
თავი I. ოპტიკურ-ელექტრული სისტემების საფუძვლები და გამოყენება	27
§ 1.1. ოპტიკური სიმკვრივე და შთანქმა	27
§ 1.2. ულტრაიისფერი და ხილული სინათლის შთანთქმის სპექტრები	39
§ 1.3. შთანთქმის ინტენსივობა	44
§ 1.4. შეუღლება	46
§ 1.5. სიგნალის მიღების სიჩქარის გაზომვის მეთოდები	50
§ 1.6. BlackCommet დეტექტორის CCD სენსორის მახასიათებლები	58
§ 1.7. CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის QE გაუმჯობესება	64
დისერტაციის I თავის ძირითადი შედეგი	70
თავი II. ელექტრონული გადასვლების და ვიბრაციული პროცესების თეორიული ანალიზი - ფრანკ-კონდონის პრინციპი სპექტროსკოპიულ აპლიკაციებში	72
§ 2.1. CCD დეტექტორით ნივთიერების ოპტიკური თვისებების შესწავლა მოლეკულურ დონეზე. ფრანკ-კონდონის პრინციპი	72
§ 2.2. n განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის გადაფარვის ინტეგრალის გამოთვლა	75
§ 2.3. დიატომურ მოლეკულაში ელექტრონული გადასვლების მოდელირება	77
§ 2.4. დეტექტირებული სიგნალის 3D ანალიზი	85
დისერტაციის II თავის ძირითადი შედეგები	91
თავი III. CCD მახასიათებლების მოდელირება ზოგიერთ პრაქტიკულ აპლიკაციაში	92
§ 3.1. კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორის მოდელი სტიმულირებული და სპონტანური გამოსხივების შეფასებისას	92
§ 3.2. ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის სიმძლავრის გადაცემის კოეფიციენტის შეფასება	95
§ 3.3. CCD სენსორის მგრძობელობის შეფასება ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას	99
§ 3.4. CCD სენსორის სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის შეფასება ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას	104

§3.5. სიგნალ/ხმაური თანაფარდობის შეფასება ცივი ატომების შთანთქმის სპექტრში.....	108
§3.6. აგზნება/ემისიური სპექტრული მონაცემების ანალიტიკურ-სტატისტიკური დამუშავების მეთოდები ღვინის სპექტროსკოპიის აპლიკაციებში	112
III თავის ძირითადი შედეგები	121
დასკვნები.....	122
დანართი 1. CCD დეტექტორის პროგრამული მართვა.....	129
დანართი 2. დამუშავებული ნორმირებული სპექტრების ფორმირება	130
დანართი 3. ღვინის ნიმუშის სპექტრები.....	131
გამოყენებული ლიტერატურა.....	136

სადისერტაციო ნაშრომის მოკლე აღწერა

შესავალი:

ნივთიერებისა და გარემოს ანალიზური კონტროლის მაღალი დონე წარმოადგენს თანამედროვე ტექნოლოგიების წარმოებისა და განვითარების წარმატების საფუძველს. რა თქმა უნდა ყოველივე ეს კვალიფიცირებულ სპეციალისტებს უყენებს სერიოზულ მოთხოვნებს. სანამ ნიმუშის ანალიზის საქმიანობას შევუდგებით, აუცილებელია ჩამოვაყალიბოთ ანალიზის მიზანი. მაგალითად ვუპასუხოთ კითხვებს [1]:

რა არის ანალიზის ობიექტი? უმარტივეს შემთხვევაში ეს შეიძლება იყოს ინდივიდუალური ქიმიური ნივთიერება, რომლის შემადგენლობაც უნდა გავიგოთ. თუმცა, თუ საქმე გვაქვს რთული შემადგენლობის ნივთიერებასთან - წარმოების მასალასთან, შენადნობთან, ჰაერთან, საკვებ პროდუქტებთან - აუცილებელია გადაწყვეტილი იქნას ამოცანა, თუ როგორ მოვახდინოთ ნიმუშის აღება ისე, რომ ნიმუში სრულად ასახავდეს საკვლევ ობიექტს.

რა ინფორმაცია უნდა მივიღოთ ანალიზის შედეგად? აუცილებელია თუ არა დავადგინოთ მთლიანად ნიმუშის შემადგენლობა, თუ საკმარისია მისი ზედაპირის აგებულების განსაზღვრა? საჭიროა თუ არა ნიმუშის სრული ანალიზის ჩატარება, თუ საკმარისია შემოვიფარგლოთ მისი, რომელიმე ნაერთის ანალიზით?

რისთვის ტარდება ანალიზი? ანალიზის შედეგად წარმოების ობიექტზე სანქციების დასაწესებლად, თუ ზღვრულად დასაშვები ნივთიერებათა კონცენტრაციის დასადგენად?

ერთი სიტყვით ანალიტიკოსი უნდა ფლობდეს არა მხოლოდ ანალიზის მეთოდის დამუშავების ტექნოლოგიას, არამედ აღჭურვილი უნდა იყოს თვით ანალიზის წარმოების აუცილებელი და სპეციალიზებული ცოდნით. ანალიტიკოსი უნდა ფლობდეს ოპტიკური სპექტროსკოპიის მეთოდებს, რომელიც:

- არ არის აგრესიული;
- გაზომვები შეიძლება წარმოებული იქნას ნებისმიერი მანძილიდან ნიმუშთან უშუალო ფიზიკური კონტაქტის გარეშე;

- საკვლევი ობიექტი ადვილად ემორჩილება ანალიზს;
- ოპტიკური თვისებების მიუხედავად მარტივია, თხევადი, მყარი და აირადი ნიმუშების რაოდენობრივი კვლევა;
- კონცენტრაციის დიაპაზონის მიხედვით სპექტოსკოპული მეთოდები მოიცავენ ყველა სხვა ანალიზურ მეთოდს.

ბუნებრივია მჭიდროა კავშირი ზოგადად სპექტოსკოპული მეთოდებისა ელექტრომაგნიტურ სპექტრთან (იხ. ცხრილი I.1)

ცხრილი I.1. სპექტოსკოპული მეთოდების კლასიფიკაცია ტალღის სიგრძის მიხედვით [1]

λ, მ	ν, ჰც	სპექტრალური არე	კვანტური გადასვლის ტიპი	სპექტოსკოპული მეთოდები
10^{-13} - 10^{-11}	$3 \cdot 10^{21}$ - $3 \cdot 10^{19}$	გამა-გამოსხივება	ბირთვების აგზნება, ბირთვული რეაქციები	ბირთვულ-ფიზიკური
10^{-11} - 10^{-8}	$3 \cdot 10^{19}$ - $3 \cdot 10^{16}$	რენტგენის გამოსხივება	შიდა ელექტრონების აგზნება	რენტგენის სპექტროსკოპია
10^{-8} - 10^{-5}	$3 \cdot 10^{16}$ - $3 \cdot 10^{13}$	ულტრაიისფერი გამოსხივება, ხილული გამოსხივება, ახლო ინფრაწითელი არე	სავალენტო ელექტრონების აგზნება	აბსორბციული, ემისიური, ფლუორესცენციული სპექტროსკოპია
10^{-6} - 10^{-3}	$3 \cdot 10^{14}$ - $3 \cdot 10^{11}$	ინფრაწითელი გამოსხივება	მოლეკულების ბრუნვა და რხევითი მოძრაობა	ინფრაწითელი სპექტროსკოპია
10^{-3} - 10^{-1}	$3 \cdot 10^{11}$ - $3 \cdot 10^9$	მიკროტალღური გამოსხივება	მოლეკულების ბრუნვითი მოძრაობა	მიკროტალღური სპექტროსკოპია
$> 10^{-1}$	$< 3 \cdot 10^9$	რადიოტალღები	ელექტრონები მაგნიტურ ველში	ელექტრონული პარამაგნიტური რეზონანსი
			ბირთვები მაგნიტურ ველში	ბირთვული მაგნიტური რეზონანსი

მიუხედავად იმისა, რომ კარგადაა შესწავლილი სინათლის ტალღური ბუნება, მნიშვნელოვანია მისი თვისებების ადაპტირება საკვლევი ობიექტის რაოდენობრივ მახასიათებლებთან. სინათლის, როგორც ელექტრომაგნიტური ტალღის მახასიათებელს წარმოადგენს ტალღის სიგრძე λ და სიხშირე ν (კავშირი ტალღის სიგრძეს, სინათლის სიჩქარესა და სიხშირეს შორის $\lambda = c/\nu$). სინათლის ნივთიერებასთან ურთიერთქმედების ხარისხის ზომას წარმოადგენს გარდატეხის მაჩვენებელი n .

გარდატეხის მაჩვენებლის ცვლილება ტალღის სიგრძის (სიხშირის) მიხედვით განსაზღვრავს დისპერსიის ხარისხს. სინათლის გადასვლისას ოპტიკურად ნაკლებად მკვრივი გარემოდან მეტად მკვრივ გარემოში გარდატეხის მაჩვენებლი იცვლება დისკრეტულად გარდატეხის კანონის შესაბამისად: $n = \frac{\sin\alpha}{\sin\beta} = \frac{n_2}{n_1}$. ელექტრომაგნიტური გამოსხივების წარმოდგენა ფოტონების ან სინათლის კვანტების ნაკადის სახით (აინშტაინის გამოსახულება): $\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$.

შესაბამისად სპექტროსკოპული მეთოდების კლასიფიკაცია ხორციელდება:

1. ელექტრომაგნიტური გამოსხივების მიხედვით
2. ნივთიერებასთან ურთიერთქმედების მიხედვით: შთანთქმა (აბსორბციული სპექტროსკოპია), გამოსხივება (ემისიური სპექტროსკოპია), გაბნევა (რამანის სპექტროსკოპია) და არეკვლა (არეკვლის სპექტროსკოპია).
3. შესასწავლი ობიექტების მიხედვით: ობიექტის ატომური და მოლეკულური სტრუქტურა.
4. სპექტრის რეგისტრაციის მიხედვით: ვიზუალური, ფოტოგრაფიული და ფოტოელექტრული

ატომური სპექტროსკოპიის მეთოდები ეფუძვნება თავისუფალი ატომების მხრიდან სინათლის *შთანთქმისა და გამოსხივების* მოვლენას, აგრეთვე მათ ლუმინესცენციას. სინათლის ულტრაიისფერი და ხილული სპექტრის არეში აიგზნება ატომების სავალენტო ელექტრონები, ხოლო რენტგენის სპექტრის არეში – შიგა ელექტრონები. სპექტრალური ხაზები განპირობებულია თავისუფალი ატომებისა და ერთატომიანი იონების ელექტრონების აგზნების პროცესებით. სპექტრალური ხაზების რაოდენობა განისაზღვრება ატომებში შესაძლო ელექტრონული გადასვლების რიცხვით. ატომების ენერგეტიკული მდგომარეობა ხასიათდება ჯამური კვანტური რიცხვებით (L - ჯამური ორბიტალური კვანტური რიცხვი, S - ჯამური სპინური კვანტური რიცხვი, M სიმრავლე განისაზღვრება ფორმულით: $M = 2S + 1$). სიმრავლეთა მიხედვით დონეებს უწოდებენ *სინგლეტურს* ($M = 1$), *დუპლეტურს* ($M = 2$), *ტრიპლეტურს* ($M = 3$).

ორბიტალური და სპინური რიცხვი ქმნის **რასელ–საუნდერსის (Russell–Saunders)** კავშირს. რასელ-საუნდერსის კავშირი, რომელიც ცნობილია ასევე *LS* დაწყვილება,

არის ატომის მთლიანი კუთხური იმპულსის შეფასების საშუალება, ელექტრონების ორბიტალურ კუთხურ იმპულსისა (L) და სპინის კუთხური იმპულსის (S) კომბინაციით. მთლიანი კუთხური იმპულსი (j) შეიძლება წარმოდგენილი იქნას L და S -ის ვექტორული ჯამით: $j = L + S$ ან $j = L - S$ [2].

LS დაწყვილების ალტერნატივაა jj დაწყვილება, რომელიც გამოიყენება ატომებში კუთხური მომენტების შეერთების აღსაწერად, განსაკუთრებით მძიმე ატომებში, სადაც სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება ძალიან ძლიერია.

LS დაწყვილება, რომელიც კარგად მუშაობს მსუბუქი ატომებისთვის, ინდივიდუალური ორბიტალური კუთხური მომენტი (L) ელექტრონები გაერთიანებულია ატომისთვის მთლიანი ორბიტალური კუთხური იმპულსის შესაქმნელად, ხოლო ინდივიდუალური სპინის კუთხური მომენტი (S) გაერთიანებულია მთლიანი სპინის კუთხური იმპულსის შესაქმნელად. შემდეგ ისინი გაერთიანებულია, რათა მივიღოთ ატომის მთლიანი კუთხური იმპულსი (j).

თუმცა, ატომური რიცხვის ზრდასთან ერთად სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედება ძლიერდება და მისი იგნორირება შეუძლებელია. ასეთ შემთხვევებში, LS დაწყვილება ხდება ნაკლებად ზუსტი მოდელი, ხოლო jj დაწყვილება ხდება უკეთესად აღწერილი [2].

რასელ-საუნდერსის კავშირი ძირითადად ატომის სტრუქტურასა და ელექტრონულ კონფიგურაციებთან დაკავშირებული კონცეფციაა, ის შეიძლება პირდაპირ არ იყოს გამოყენებული ფლუორესცენციული სპექტროსკოპიისთვის წყლიან გარემოში, რომელიც სწავლობს მოლეკულურ სტრუქტურას და არა ცალკეულ ატომურ ელექტრონებს. მაგრამ ამავე დროს ამ კავშირმა შეიძლება გავლენა იქონიოს მოლეკულების ელექტრონულ სტრუქტურაზე და შესაბამისად ირიბად იმოქმედოს ფლუორესცენციის თვისებებზე.

ფლუორესცენტურ მოლეკულებს აქვთ სპეციფიკური ელექტრონული გადასვლები, რაც იწვევს ფოტონების შთანთქმას ერთ ტალღის სიგრძეზე (აგზნება) და ფოტონების გამოსხივებას უფრო დიდ ტალღის სიგრძეზე (ფლუორესცენცია). ელექტრონული გადასვლები მოლეკულური ორბიტალების ენერგეტიკული დონის ცვლილებას გულისხმობს.

მოკლედ, მართალია რასელ-საუნდერსის დაწყვილების პირდაპირი გამოყენება ფლუორესცენტულ სპექტროსკოპიაზე წყლიან გარემოში შეიძლება არ იყოს მარტივი, და მაინც, ფლუორესცენტური მოლეკულების ელექტრონული გადასვლების გაგება და მათი ურთიერთქმედება წყლიან გარემოსთან გადამწყვეტია ფლუორესცენტური სპექტრების ინტერპრეტაციისთვის სხვადასხვა აპლიკაციებში, მათ შორის ბიოლოგიურ და გარემოსდაცვით კვლევებში.

კვლევის მიზანი:

სადოქტორო თემის ერთ-ერთი მიზანია ფოტოელექტრული გარდამქმნელი სისტემების ეფექტურობის გაზრდა და გარემოს დიაგნოსტიკის პრობლემების გადაჭრის ეფექტურობის გაზრდა. განსაკუთრებული მნიშვნელობა აქვს სინათლის წყაროს დეტექტირებას გარემოს, მათ შორის ფაზური ეკრანის გავლით. ფაზური ეკრანი წარმოადგენს ოპტიკურად მკვრივ გარემოს, რომლის მახასიათებლების მოდელირება შესაძლოა გახდეს ახალი ტიპის, სწრაფი და ეფექტური ნახევარგამტარული დეტექტორების შექმნის საფუძველი.

კვლევის მატერიალურ-ტექნიკური ბაზა:

დისერტაციის შესრულება მხარდაჭერილი იყო რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო საგრანტო პროექტების ფარგლებში შეძენილი ლაბორატორიული აღჭურვილობით GNSF/ST08/5-451, FR/640/6-110/12, FR/152/9-240/12, FR-152-9-240-14. დოქტორანტის სამეცნიერო ნაშრომების გამოქვეყნება და საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციებზე მხარდაჭერილი იყო ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტის მიერ, აჭარის ავტონომიური რესპუბლიკის განათლების, მეცნიერებისა და სპორტის სამინისტროს მიერ, რუსთაველის ეროვნული სამეცნიერო ფონდის მიერ. სადოქტორო ნამუშევარი შესრულდა ბათუმის შოთა რუსთაველის სახელმწიფო უნივერსიტეტში (ზუსტ მეცნიერებათა და განათლების ფაკულტეტი, ფიზიკის დეპარტამენტი). სადოქტორო ნაშრომისათვის გამოყენებული იქნა ლაბორატორიული აღჭურვილობა და ხელსაწყოები:

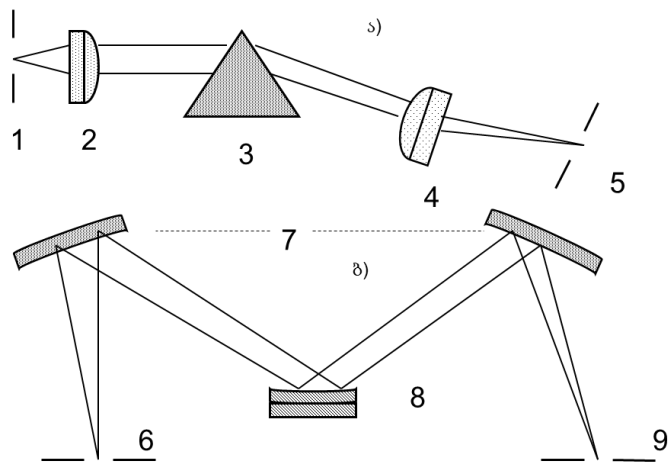
- **SL1-LED** მინიატურული ოპტიკურ-ბოჭკოვანი სინათლის წყარო ცვლადი შუქდიოდებით. შეიცავს შუქდიოდთა კომპლექტს. შემადგენლობაში 6 შუქდიოდი 390 ნმ, 470 ნმ, 502 ნმ, 590 ნმ, 60 ნმ და თეთრი შუქდიოდი

- **SL3** ულტრაიისფერი შუქდიოდები ალგუნების ტალღის სიგრძეებით 295 ნმ, 345 ნმ და 365 ნმ
- **CR2CR2** კოსინუს ბუდე ულტრაიისფერი – ხილული – ინფრაწითელი დიაპაზონისათვის, დიამეტრით 1/4 დუიმი და 180° ხედვის არით.
- **SL5 – CUV** მინიატურული დეიტერიუმის ჰალოგენური ნათურა ულტრაიისფერი – ხილული – ინფრაწითელი დიაპაზონისათვის, 200-1700 ნმ, ჩამკეტითა დაკონტროლის ნათურით. სინათლის წყარო შეიცავს ინტეგრირებულ, სტანდარტულ 1 სმ-იანი კიუვეტას დამჭერს და კოლიმირებად ობიექტივს (ლინზებს) SMA-905 ოპტიკურ-ბოჭკოვანი ინტერფეისით
- **IC2** ინტეგრირებული კუბი (სინათლის სფერო), 2 დუიმიანი კუბი 5/8 დუიმიანი შემავალი პორტით, 1 SMA ოპტიკური გამომავალით, მანსელას თეთრი საფარით
- **F400YBNIRUVSRY**- ფორმის კაბელის განშტოება, 0.5 მეტრი, 4 SR და 3 NIR ოპტიკურ-ბოჭკოვანი კაბელი იერთებს SL1+SL3 ნათურებს
- **R600-8-UVVIS-SR** ზონდი ულტრაიისფერი და ხილული დიაპაზონისათვის, 600 მკმ.
- **CUV-F** კუვეტას ოპტიკურ-ბოჭკოვანი დამჭერი **SL1-LED** ამგზნები ნათურებისათვის, 2 კოლიმატორული ლინზით ფლუორესცენციის გასაზომად. **F600Y** ბოჭკო ორმაგი მიერთებისათვის.
- **LSR-UV2 BlueWave** სპექტრომეტრი 200-400 ნმ, 2400გ/მმ მესერი, დამონტაჟებული 14 მკმ ზომის ხვრელით.
- ციფრული ოსცილოგრაფი **Instek GDS-1152A-U**
- სიგნალებისა სპექტრის ანალიზატორი **Instek GSP series**
- ციფრული მულტიმეტრი, **Instek GDM-8251A Dijital Multimeter**
- პორტატიული ლაზერული სპექტრო-რადიომეტრი, StellarNet SpectroRadiometers - Laser Measurement Systems **Black Comet-C** (190-850nm)
- სიგნალების ფუნქციონალური გენერატორი, **Instek AFG-3051** Arbitrary Function Generator
- USB მოდული – ციფრული ოსცილოგრაფი, Ajilent, Oscilloscope, **USB modular-U2702A**, 200MHz
- USB მოდული - რთული და ნებისმიერი ფორმის სიგნალების გენერატორი, Agilent, **USB modular-U2761A**, 20MHz
- USB მოდული - კომპუტაციური მატრიცა, **USB modular-U2751A**

- USB მოდული - წყარო და გამზომი ბლოკი, Agilent, USB modular source measure unit - **U2722A**, 3-channels, +/-20V, +/-120mA
- აზოტის ლაზერი, **NL-100**, 337 nm (0-25 Hz)
- 6 არხიანი ანალოგურ-ციფრული გარდამქმნელი (ხელნაკეთი)
- მუდმივი კვების წყარო (3000 ვ, ხელნაკეთი)

დისერტაციის შესრულებისას გამოყენებული იქნა პროგრამული გარსაცმები და სიმულატორები: **SpectraWiz, Multisim, Mathematica, MathLab, MathCad**

სინათლის წყაროს სახით ტექნოლოგიის განვითარების მოცემულ ეტაპზე შესაძლებელია გამოყენებული იქნას სინათლის წყაროები, როგორცაა: სხვადასხვა სახის ვარვარების ნათურა, ჰალოგენური ნათურა, სინათლის გამომსხივებელი დიოდი, რკალურად განმუხტვადი ვერცხლისწყლიანი ან ქსენონური ნათურა, არგონით, ან სხვა ინერტული აირის შემცველი კალიბრირებადი ნათურა.



ნახ.I.1. მონოქრომატორის პრინციპული სქემა: ა) პრიზმაზე დაფუძნებული მონოქრომატორი (ბუნზენის მონოქრომატორი): 1, 6 – შემავალი ხვრელი, 2 - კოლიმატორი, 3 – პრიზმა, 4 – მაფოკუსირებელი ლინზები, 5 - გამომავალი ხვრელი ფოკალურ სიბრტყეში; ბ) დიფრაქციულ მესერზე დაფუძნებული მონოქრომატორი (ჩერნი–ტერნერის მონოქრომატორი): 7 - ამობურცული სარკეები, 8 – ამრეკლი მესერი, 9 - გამომავალი ხვრელი ფოკალურ სიბრტყეში

ორივე სახის მონოქრომატორის ძირითადი შემადგენელი კომპონენტებია:

- *შემაგალი ხვრელი* - ის გამოყოფს ვიწრო ნაკადს დაცემული სინათლის ნაკადიდან;
- *ლინზათა სისტემა* - ამობურცული სარკე სინათლის პარალელურ სხივთა ნაკადის მიღების მიზნით;
- *დისპერსირებადი ელემენტი* - პრიზმა ან დიფრაქციული მესერი;
- *მაფოკუსირებელი მოწყობილობა* - გამოიყენება გამომავალ ხვრელზე ნაკადის შესაკრებად;
- *გამომავალი ხვრელი* - საიდანაც ხდება სასურველი სპექტრალური სიგანის სინათლის ნაკადის გამოსვლა

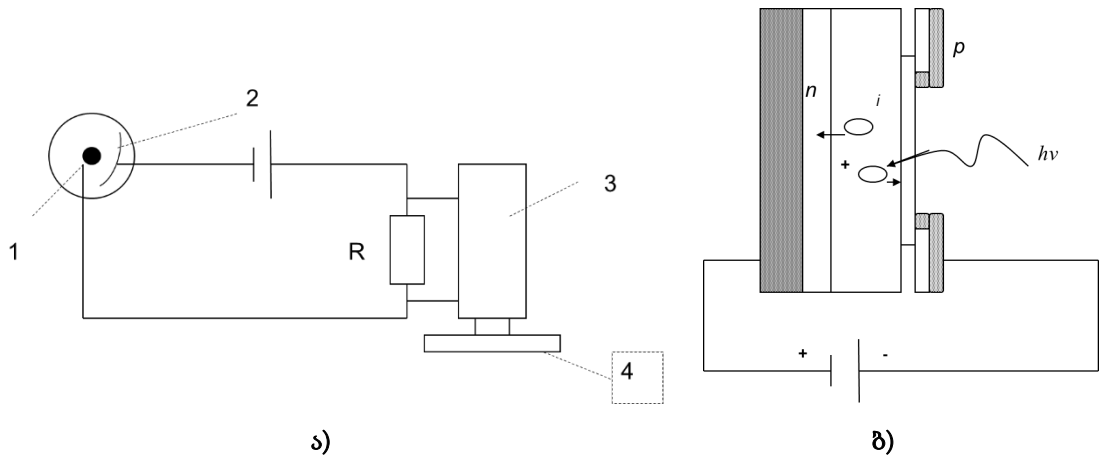
რაც შეეხება მიმღებ დეტექტორებს, ფართოდ გავრცელებულია ძირითადად ორი ტიპის მიმღები დეტექტორი:

- ფოტოგრაფიული ემულსია, რომელზედაც გამოსხივება იწვევს ქიმიურ ცვლილებებს;
- ფოტოელექტრული მოწყობილობა, რომელიც გარდაქმნის სინათლის სიგნალს ელექტრულ (სითბურ ან/და ელექტრულ) სიგნალად.

დეტექტორზე დაცემული გამოსხივების მცირე ინტენსივობის შემთხვევაში შეიძლება გამოყენებული იქნას ფოტონების თვლის მეთოდი. *ფოტოელექტრული მოწყობილობები* რეაგირებენ ფოტონებზე, რომლებიც ეცემა მიმღებ მოწყობილობას. ასეთი მოწყობილობის *კვანტური ეფექტურობა* წარმოადგენს წარმოქმნილი ფოტოელექტრონების ფარდობას შთანქმული ფოტონების რიცხვთან. ფოტოელექტრული მოწყობილობები ასევე იყოფა ორ ნაწილად:

- მოწყობილობები გარე ფოტოეფექტით (ნახ.I.2 ა)
- მოწყობილობები შიგა ფოტოეფექტით (ნახ.I.2 ბ)

ფოტოელემენტი შიგა ფოტოეფექტით წარმოადგენს n ტიპის გამტარებლობის მქონე ნახევარგამტარულ მასალას, რომელზედაც დატანილია ფენა i საკუთარი გამტარებლობით, ხოლო შემდეგ თხელი ფენა p ტიპის გამტარებლობით. ფოტოელემენტის დიზაინი ისეთია, რომ დაცემული სინათლე ხვდება უშუალოდ i -ფენას.



ნახ. I.2. ა) ფოტოელემენტის სქემა გარე ფოტოეფექტით. 1 – ანოდი, 2 - ფოტოკათოდი, 3 – გამამძიერებელი, 4 - ინდიკატორი; ბ) ფოტოელემენტი შიგა ფოტოეფექტით, ნახევარგამტარული დიოდი

გამოყენებული ნახევარგამტარული მასალის მიხედვით ფოტოდიოდები განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან მუშა სპექტრალური დიაპაზონითა და მგრძობიარობით. შედარებით გავრცელებულია სილიციუმის (*Si*), გერმანიუმის (*Ge*) და ინდიუმ-გალიუმ-არსენიდის (*InGaAs*) ფოტოდიოდები. ეს ფოტოდიოდები განკუთვნილია სპექტრის ულტრაიისფერი არიდან ახლო ინფრაწითელ არემდე დიაპაზონისათვის (0,2 მკმ –დან 2,3 მკმ–მდე). სპექტრის შედარებით გრძელტალღოვან არეში (1,5 მკმ- 5,5 მკმ) შეიძლება გამოყენებული იქნას *InAs* და *InSb* ფოტოდიოდები.

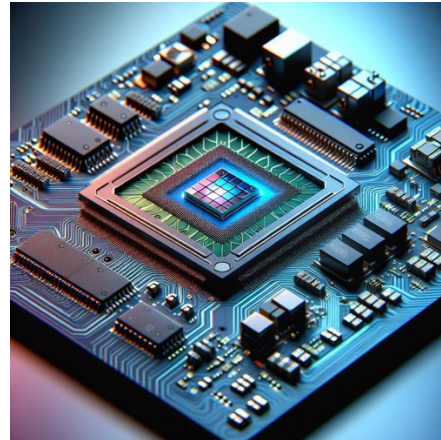
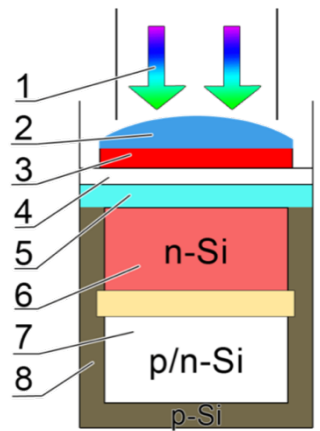
ადაპტიური ფოტოდეტექტორების შექმნის აუცილებლობამ განაპირობა მრავალელემენტური ნახევარგამტარული მყარსხეულოვანი დეტექტორების შექმნა. მათგან გამოვყოფთ დეტექტორებს სიგნალების დამუშავების მეთოდის მიხედვით:

- მოწყობილობა მუხტის ინექციით (CID Charge Injection Device);
- დაწყვილებული მუხტის მოწყობილობა (CCD – Charge-Coupled Device).

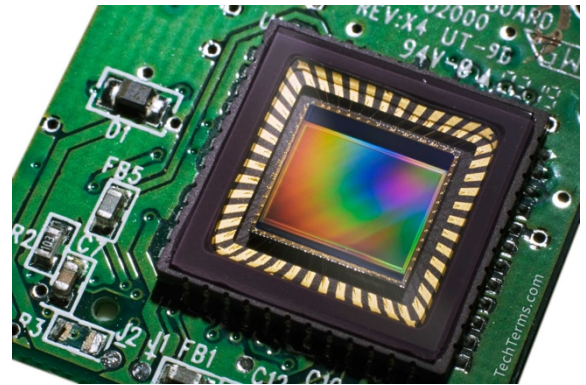
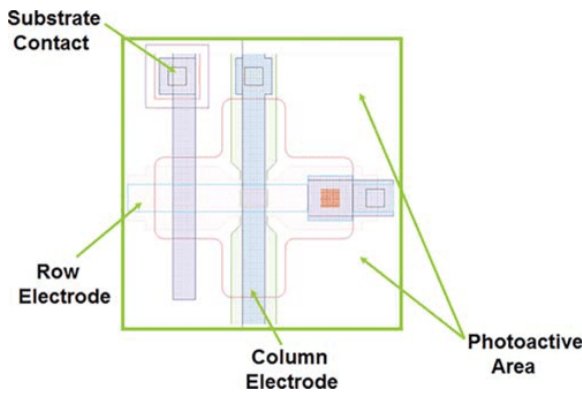
ორივე დეტექტორის საფუძველი სილიციუმია, რომელზედაც განთავსებულია ფოტომგრძობიარე ელემენტები – “პიქსელები”.

CID დეტექტორები მიეკუთვნება ნახევარგამტარული ტექნოლოგიის კატეგორიას. CID შეიცავს დეტექტორის ელემენტების მასივს, რომელსაც შეუძლია შეინახოს ფოტოგენერირებული მუხტი. თითოეული დეტექტორი შეიცავს სინათლის მგრძობიარე ზონას, აგრეთვე მწკრივისა და სვეტის ელექტროდებს, რომლებიც უზრუნველყოფს მუხტის შენახვას და წაკითხვას. ელექტროდები აგებულია გამტარი

სილიციუმის მასალისგან, რომელიც დაფენილია საიზოლაციო ფენაზე და ქმნის მუხტის შესანახ არეს (ნახ.I.4 ა).



ნახ.I.3. ა) ნახევარგამტარული ფოტოდეტექტორის პრინციპული სქემა. 1. სინათლის ფოტონები, 2. მიკროლინზა; 3. წითელი შუქდიოდი, 4. ნახევრადკრისტალური გამჭვირვალე სილიციუმის ელექტროდი, 5. იზოლატორი (სილიციუმის ოქსიდი); 6. n-ტიპის სილიციუმის ფენა. (შიდა ფოტოფექტის ზონა); 7. პოტენციური ორმოს ზონა, სადაც ელექტრონები იყრიან თავს მუხტის მატარებლის გენერაციის ზონიდან; 8. p-ტიპის სილიციუმის საფუძველი; ბ) CCD დეტექტორი - მოწყობილობა, რომელსაც შეუძლია სინათლის ფოტონების დეტექტირება. იგი მოიცავს CCD - სენსორს, რომელსაც გადაჰყავს ფოტონები ელექტრულ სიგნალად და ელექტრონულ სქემას, ციფრული სიგნალის შენახვის, დამუშავების (გადაგზავნისა) და გამოტანისათვის.



ნახ.I.4. ა) CID (Charge Injection Device) მოწყობილობა მუხტის ინექციით პრინციპული სქემა¹, ბ) CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor) დამატებითი ლითონ-ოქსიდ-ნახევარგამტარული სენსორი²

¹ https://ebrary.net/194399/mathematics/charge_injection_devices#google_vignette

² <https://techterms.com/definition/cmos>

CMOS (CMOS - Complementary Metal Oxide Semiconductor) ნახევარგამტარულ სენსორებს დამატებითი ლითონ-ოქსიდ-ნახევარგამტარული ფენა გააჩნიათ (ნახ.I.4 ბ), რის ხარჯზეც ისინი გამოირჩევიან რიგი უპირატესობით მათ წინამორბედ CID-სენსორებთან შედარებით (ენერგიის ეფექტური მოხმარება, ზომა და წარმოების პროცესი). CID-ში მუხტი შეჰყავთ უშუალოდ ნახევარგამტარულ მასალაში, როგორც წესი, სილისიუმის ნახევარგამტარში. ინექცირებული მუხტი შემდეგ გადაეცემა ნახევარგამტარული მასალის ზედაპირის გასწვრივ „წამკითხავ“ ელექტროდებს.

CID-სენსორები გამოირჩევა დიზაინისა და ექსპლუატაციის სიმარტივით. ადვილია მათი ადაპტირება გარკვეულ აპლიკაციებთან, მათ შორის სამეცნიერო გამოყენების კუთხით. კერძოდ, CID-სენსორები გამოიყენება ისეთ სამეცნიერო აპლიკაციებში, სადაც გადამწყვეტი მნიშვნელობა აქვს სპეციფიკურ მახასიათებლებს, როგორცაა მაგალითად, მგრძობელობა ტალღის სიგრძისადმი. თუმცა, მათ აქვთ ნაკლოვანი მხარე, რის გამოც ისინი ნაკლებად გავრცელებულია, ვიდრე CMOS სენსორები. ეს შეზღუდვები დაკავშირებულია ციფრული სიგნალის ფორმირების სიჩქარესთან.

CID-სენსორებისაგან განსხვავებით CCD-ში მუხტი პიქსელებს შორის გადადის ელექტროდების მწკრივს და საბოლოოდ აღწევს წაკითხვის რეგისტრს. CCD-ებს აქვთ უფრო რთული სტრუქტურა, ელექტროდების რამდენიმე ფენა, მათ შორის ვერტიკალური წანაცვლების რეგისტრი და ჰორიზონტალური წაკითხვის რეგისტრი.

პრობლემის დასმა:

ჩვენი კვლევის ექსპერიმენტული ნაწილი სრულდება StellarNet-ის მიერ წარმოებულ დეტექტორზე BlackComet, რომელიც მოიცავს CCD სენსორს. BlackComet სპექტრომეტრები აღჭურვილია მაღალი წარმადობის CCD სენსორებით, რომლებიც შესანიშნავი მგრძობელობით ხასიათდებიან, მათ აქვთ დაბალი ხმაურის დონე ტალღის სიგრძის ფართო დიაპაზონში. ამ დეტექტორებს გააჩნია თერმოელექტრული გაგრილების სისტემა, რათა შეამცირონ ხმაურის დონე და გაზარდონ სტაბილურობა. სწორედ ამიტომ ამ დეტექტორებს აქვთ იდეალური გამოყენება ისეთ აპლიკაციებში,

როგორცაა შთანთქმის/გადაცემის სპექტროსკოპია, ფლუორესცენციული სპექტროსკოპია და რამანის სპექტროსკოპია.

მიუხედავად იმისა, რომ CCD სენსორები, რომლებიც გამოიყენება StellarNet-ის BlackComet სპექტრომეტრებში, უკვე მაღალი ხარისხისაა, არსებობს რამდენიმე სფერო, რომელიც მეცნიერებისა და მკვლევარების მომავალი კვლევის ყურადღების ცენტრშია, მათი მუშაობის შემდგომი გაუმჯობესების მიზნით. ქვემოთ ფორმულირებულია რამდენიმე პრობლემა, რომელთაგან რამდენიმე მათგანის გადაწყვეტას ეძღვნება სწორედ მოცემული სადოქტორო შრომა:

- **კვანტური ეფექტურობის გაუმჯობესება:** მიუხედავად იმისა, რომ CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობა უკვე საკმაოდ მაღალია, სპექტრის ზოგიერთ ნაწილში ჯერ კიდევ არის გაუმჯობესების შესაძლებლობა, განსაკუთრებით UV და ახლო IR რეგიონებში. კვლევა შეიძლება ფოკუსირებული იყოს ახალი მასალების ან სტრუქტურების შემუშავებაზე CCD სენსორებისთვის, რომლებიც აუმჯობესებენ მათ QE-ს ამ რეგიონებში;
- **ხმაურის შემცირება:** BlackComet სპექტრომეტრების CCD დეტექტორებში, თერმოელექტრონული გაგრილების სისტემა გამოიყენება ხმაურის შესამცირებლად. თუმცა ზოგიერთ აპლიკაციაში მისი გამოყენებისას შეიძლება თავი იჩინოს ე.წ. „ნარჩენმა ხმაურმა“, რომელსაც შეუძლია შეზღუდოს მათი მგრძობელობა. კვლევა შეიძლება ფოკუსირებული იყოს გაგრილების ახალი ტექნიკის ან ხმაურის შემცირების სტრატეგიების შემუშავებაზე, ამ ხმაურის შემდგომი შემცირების მიზნით.
- **დინამიური დიაპაზონის გაზრდა:** CCD სენსორების დინამიური დიაპაზონი შემოიფარგლება დიგიტალიზაციისთვის გამოყენებული ბიტების რაოდენობით და ეს შეიძლება იყოს გამოწვევა მაღალი დინამიური დიაპაზონის სპექტროსკოპიის ზოგიერთი აპლიკაციისთვის. კვლევის ერთ-ერთი მიმართულებაა შესწავლილი იქნას ახალი ტექნიკები CCD სენსორების დინამიური დიაპაზონის გაზრდისათვის, როგორცაა მაგალითად, მრავალჯერადი ინტეგრაციის დრო ან არაწრფივი დიგიტალიზაცია.

- **სინათლის სიკაშკაშის შემცირება:** სიკაშკაშე ჩვეულებრივი პრობლემაა CCD სენსორებში. ძალიან კაშკაშა სინათლის წყაროებით დასხივებამ შეიძლება გამოიწვიოს მიღებული სპექტრების დამახინჯება. კვლევები შეიძლება ფოკუსირებული იყოს სიკაშკაშის შემცირების ახალი ტექნიკის შემუშავებაზე, როგორცაა სიკაშკაშის საწინააღმდეგო ფილტრების გამოყენება, მაკავშირებელი ოპტიკურ-ბოჭკოვანი სადენების დიამეტრის შერჩევა (200-600 მკმ), წაკითხვის ახალი სტრატეგიების განხორციელება.

მეცნიერული სიახლე:

კვლევის სიახლე მდგომარეობს შემუშავებულ მეთოდებში, რომლებიც ზრდის ოპტიკური-ელექტრული მოწყობილობების საერთო ეფექტურობას სხვადასხვა გზით. კერძოდ, შემოთავაზებულია კვანტური ეფექტურობის გაუმჯობესების გზით CCD დეტექტორის ეფექტურობის ზრდის მექანიზმი. ასევე წარმოდგენილია ზოგიერთი პრაქტიკული აპლიკაციისთვის CCD სენსორების გამოყენების შეფასება და მათი გაუმჯობესების გზები.

ნაშრომის პრაქტიკული მნიშვნელობა:

CCD სენსორები გამოიყენება ფართო სპექტრში, კერძოდ: ასტროფოტოგრაფიაში, ელექტრონულ მიკროსკოპებში და რაც ჩვენთვის საინტერესოა ფლუორესცენციულ სპექტროსკოპიაში. აღსანიშნავია, რომ ამ სენსორებმა ძირითადად სახე იცვალა სამომხმარებლო ციფრულ კამერებში (CMOS), სადაც გამოიყენება სენსორები, რომლებსაც აქვს დამატებითი ლითონის ოქსიდ-ნახევაგამტარული ფენა, რომელთა წარმოება შედარებით ბიუჯეტურია. ასე, რომ CCD სენსორები კვლავაც რჩება პრიორიტეტულ სენსორებად მრავალ სამეცნიერო და სამრეწველო აპლიკაციებში.

დისერტაციის კვლევის შედეგები მნიშვნელოვანი იქნება ისეთ აპლიკაციებში სადაც სრულდება:

- **სტანდარტიზებული ტესტირების პროცედურები:** ამ პროცედურების გამოყენება სხვადასხვა ლაბორატორიებში ითვალისწინებს ნივთიერების ოპტიკური თვისებების გაზომვის თანმიმდევრობას, როგორცაა

სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა, სპექტრების გადაღება, მონაცემთა დამუშავება და სხვა.

- **ბრმა ტესტირება:** შეიძლება გამოყენებულ იქნას ექსპერიმენტულ შედეგებზე მიკერძოების გავლენის შესამცირებლად.
- **კალიბრაციის სტანდარტები:** იგი ითვალისწინებს გაზომვის შედეგების შედარებას სხვადასხვა მკვლევარის თუ კვლევითი ლაბორატორიის შედეგებთან, ეტალონთან კალიბრირებას.
- **სტატისტიკური ანალიზი:** შესაბამის სტატისტიკურ ანალიზს შეუძლია უზრუნველყოს ექსპერიმენტული შედეგების სანდოობა და დასკვნების დადასტურება მონაცემებით.
- **რეპლიკაციის კვლევები:** რეპლიკაციის კვლევებს შეუძლია დაეხმაროს წინა კვლევების შედეგების გადამოწმებას და გაზარდოს ნდობა ექსპერიმენტული დასკვნების სანდოობაში.

კვლევის აქტუალობა და ლიტერატურული მიმოხილვა:

ნივთიერების (გარემოს) ქიმიური შემადგენლობის ანალიზის გავრცელებულ მეთოდებს სტანდარტულ ქრომოტოგრაფიულ, წონით და სხვა მეთოდებთან ერთად, მიეკუთვნება მრავალრიცხოვანი ოპტიკური მეთოდები. მრავალრიცხოვანი ოპტიკური მეთოდებიდან ეფექტური და ოპტიმალური მეთოდის შერჩევა და გამოსაკვლევი ნივთიერების თვისებებთან ადაპტირება წარმოადგენს თანამედროვეობის ერთ-ერთ აქტუალურ ამოცანას. მეცნიერები ცდილობენ შეისწავლონ ის ნივთიერებები (გარემო), რომლებიც გარს აკრავს კაცობრიობას. ამისათვის დამუშავდა რიგი მეთოდები და მიდგომები, რომლებსაც ამა თუ იმ ფორმით იყენებენ საკვლევი ობიექტების შესწავლისას. ყოველივე ეს დაიყვანება საკვლევი ნივთიერებისა და მისთვის გამოყენებული მასალების ყოველმხრივ შესწავლაზე. მასალების თვისებები განისაზღვრება, როგორც ძირითადი კომპონენტების, ასევე ნაერთების გათვალისწინებით, გარდა ამისა, ხშირად მასალების თვისებები დამოკიდებულია მის მოცულობაში ნართების ან კომპონენტების განაწილებაზე.

ნივთიერებისა და გარემოს ანალიზური კონტროლის მაღალი დონე წარმოადგენს თანამედროვე ტექნოლოგიების წარმოებისა და განვითარების წარმატების საფუძველს. რა თქმა უნდა ყოველივე ეს კვალიფიცირებულ სპეციალისტებს უყენებს სერიოზულ მოთხოვნებს. შეიძლება მოვიყვანოთ რამდენიმე ბოლოდროინდელი კვლევა, რომელიც სადისერტაციო თემას უკავშირდება:

- [14, 30, 81, 85, 92, 98] სტატიებში შესწავლილია წყლის ოპტიკური თვისებები, წარმოდგენილია უახლესი ექსპერიმენტული და თეორიული შეხედულებები. ამ მიმოხილვით და კვლევით სტატიებში მოცემულია წყლის ოპტიკური თვისებების ყოვლისმომცველი მიმოხილვა, მათ შორის მისი შთანთქმის, გაბნევის და ფლუორესცენციის თვისებები. სტატიებში ასევე განხილულია წყლის ოპტიკური თვისებების შესწავლის ექსპერიმენტული და თეორიული ტექნიკის ბოლო მიღწევები.
- [48, 73, 75] კვლევები ეძღვნება ადაპტიური გამოსახულების სპექტრომეტრის დიზაინს და წარმოადგენს მის რეალიზაციას წყალხსნარის მონიტორინგისას. სპექტრომეტრი იყენებს ადაპტირებულ ნახევარგამტარულ CCD ფოტოდეტექტორს მისი მგრძნობელობისა და დინამური დიაპაზონის ოპტიმიზაციისთვის და მათი საშუალებით შესაძლებელია გაიზომოს წყლის შთანთქმის და ფლუორესცენციის თვისებები სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე.
- [55, 93] შრომებში შესწავლილია ნატრიუმის ქლორიდისა და შაქრის წყალხსნარების ოპტიკური თვისებები სპექტროსკოპიული ტექნიკის გამოყენებით, ულტრაიისფერ და ხილული ტალღის სიგრძის დიაპაზონში. ავტორები აჩვენებენ ოპტიკური მეთოდის მგრძნობელობას წყალხსნარების ოპტიკურ თვისებების კვლევისას და ოპტიკური თვისებების ცვლილებების კორელაციას ხსნარების კონცენტრაციასა ან შემადგენლობის ცვლილებასთან.
- [6, 18, 32, 43, 114] სტატიებში შესწავლილია ოკეანის ფერისა და ბიოგეოქიმიის თეორია, მოდელები და აპლიკაციები ადაპტიური სპექტრული ტექნიკის გამოყენებით. ამ სტატიებში მიმოხილულია ადაპტიური სპექტრული გამოსახულების გამოყენების შესაძლებლობა ოკეანის წყლის ოპტიკური თვისებების და მისი ბიოგეოქიმიური კომპონენტების შესასწავლად.

ხაზგასმულია CCD ფოტოდეტექტორების გამოყენების მნიშვნელობა ოკეანის ფერის, გაზომვების მგრძობელობისა და სიზუსტის ოპტიმიზაციისთვის, და განხილულია ამ გაზომვების პოტენციური გამოყენების საზღვრები ოკეანის ჯანმრთელობისა და კლიმატის ცვლილების მონიტორინგისას.

თავის მხრივ ყურადღებას იმსახურებს რამდენიმე ბოლოდროინდელი კვლევა, რომლებიც ეძღვნება სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის გაზრდასა და ამ გზით, CCD დეტექტორების ოპტიმიზაციას. ეს შრომები მჭიდროდ უკავშირდება სადისერტაციო თემას:

- [16, 24, 49-50, 70, 119-120] ამ მიმოხილვით და კვლევით სტატიებში მოცემულია ფაქტორების ყოვლისმომცველი მიმოხილვა, რომლებიც გავლენას ახდენენ სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობაზე (SNR) CCD გამოსახულების სისტემებში, მათ შორის წაკითხვის ხმაური, სიბნელის დენი, კვანტური ეფექტურობა და პიქსელის ზომა. სტატიებში, ასევე განხილულია SNR-ის ოპტიმიზაციის სხვადასხვა ტექნიკა, როგორცაა ბინინგი, გაგრილება და დეკონვოლუცია.
- [42, 100, 102, 110] სტატიები იკვლევს ფაქტორებს, რომლებიც გავლენას ახდენენ CCD კამერების SNR-ზე რაოდენობრივ ოპტიკურ მიკროსკოპში და ის გვთავაზობს მეთოდს SNR-ის ოპტიმიზაციისთვის, ინტეგრაციის დროისა და პიქსელების დამაგრების რეჟიმის კორექტირებით. კვლევები აჩვენებს ამ მეთოდის ეფექტურობას რაოდენობრივი გაზომვების სიზუსტის გასაუმჯობესებლად.
- [19, 62, 64, 66, 86, 113] სტატიებში შესწავლილია ხმაურის მახასიათებლები და CCD დეტექტორების ოპტიმიზაცია სამეცნიერო აპლიკაციებისთვის. ეს კვლევები გვთავაზობს მეთოდებს ხმაურის მახასიათებლების ოპტიმიზაციისთვის წაკითხვის სიჩქარის, გაძლიერების კოეფიციენტისა და წანაცვლების ძაბვის რეგულირებით. კვლევები ეძღვნება წაკითხვის ხმაურის შემცირებას და სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) გაუმჯობესებას CCD დეტექტორებში.
- [9, 32, 68, 76, 83] სტატიები ეძღვნება სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობის ოპტიმიზაციას CCD დეტექტორებისათვის, რომლებიც ასტროფიზიკურ

აპლიკაციებში გამოიყენება. კვლევები გვთავაზობს ფაქტორებს, რომლებიც გავლენას ახდენენ SNR თანაფარდობაზე CCD დეტექტორში ასტროფოტოგრაფიაში, აგრეთვე მეთოდს SNR-ის ოპტიმიზაციისთვის ინტეგრაციის დროის, ISO პარამეტრის და გაძლიერების კორექტირებით.

სადისერტაციო ნაშრომის ექსპერიმენტული ნაწილი შესრულდა StellarNet -ის სპექტრომეტრისა და BlackComet დეტექტორის გამოყენებით, სინათლის წყაროებს წარმოადგენდა სხვადასხვა სახის ჰალოგენური და დეიტერიუმის ნათურები, ლაზერული დიოდები. ნივთიერების ელემენტური შემადგენლობისათვის გამოყენებული იქნა Porta LIBS სისტემა. ცხადია, ამ ხელსაწყოების შესაძლებლობა საკვლევი თემის ფარგლებში გაანალიზებულია სხვადასხვა ლიტერატურული წყაროების შესწავლით [8, 13, 22, 51-52, 63, 69, 74, 94-95, 103-104].

ჩვენი კვლევის ინტერესის კონტექსტში, CCD კამერების სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) შეფასება ხდება საკვლევი ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივის (OD) შეფასების გათვალისწინებით. ასე, რომ OD ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი პარამეტრია. იმისათვის, რომ ზუსტად შევაფასოთ CCD კამერის სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობა (SNR) მნიშვნელოვანია საფუძვლიანი გაგება გვექონდეს საკვლევი ნიმუშის OD-ის შეფასების მეთოდებში.

OD გაზომვებთან დაკავშირებული კვლევის ლიტერატურის მიმოხილვამ უზრუნველყო OD გაზომვის სხვადასხვა ასპექტების შესახებ ინფორმაციის მოძიება, მათ შორის OD გაზომვებზე მოქმედი ფაქტორების, OD გაზომვების სიზუსტის გაუმჯობესების მეთოდების და OD გაზომვების სხვადასხვა აპლიკაციებში გამოყენების კუთხით [44, 54, 71, 79-80, 90-91, 101, 111, 118]. ეს კვლევები გვიჩვენებს ზუსტი OD გაზომვების მნიშვნელობას და ხაზს უსვამს სხვადასხვა მეთოდებსა და ტექნიკას, რომლებიც შეიძლება გამოყენებულ იქნას უფრო საიმედო და ზუსტი შედეგების მისაღწევად.

როგორც ვხედავთ, არსებობს მრავალი კვლევითი ნაშრომი, რომელიც იკვლევს OD გაზომვების გამოყენებას სხვადასხვა აპლიკაციებისთვის, როგორცაა გარემოს მონიტორინგი, ბიოსამედიცინო კვლევა და მასალათმცოდნეობა. ამ ნაშრომების ლიტერატურის მიმოხილვა უზრუნველყოფს OD-ის სფეროში კვლევის ამჟამინდელი

მდგომარეობის ყოვლისმომცველ გაგებას, ასევე არსებულ ცოდნაში არსებული ხარვეზების იდენტიფიცირებას, რომლებიც შეიძლება გამოსწორდეს მომავალი კვლევებით.

ფუნდამენტური კონცეფცია, რომელიც ოპტიკური სიმკვრივისა (OD) და ზოგადად ოპტიკური სპექტროსკოპიის შესწავლას უდევს საფუძვლად არის **ფრანკ-კონდონის პრინციპი**. ეს პრინციპი აღწერს ელექტრონების გადასვლას მოლეკულებში სხვადასხვა ენერგეტიკულ დონეებს შორის. განსაზღვრავს თუ როგორ უკავშირდება ეს გადასვლები სინათლის შთანთქმასა და გამოსხივებას.

ზოგადად, ფრანკ-კონდონის პრინციპი აცხადებს, რომ ელექტრონული გადასვლა მოლეკულის ორ ენერგეტიკულ მდგომარეობას შორის მყისიერია, ხოლო ბირთვული მოძრაობა მოლეკულაში გაცილებით ნელია. ეს ნიშნავს, რომ როდესაც მოლეკულა შთანთქავს ან ასხივებს ფოტონს, ელექტრონული გადასვლა ძალიან სწრაფად ხდება და ამ პროცესის დროს მოლეკულის ბირთვები მნიშვნელოვნად არ მოძრაობენ.

OD-ის კონტექსტში ფრანკ-კონდონის პრინციპი მნიშვნელოვანია, რადგან ის გვეხმარება გავიგოთ, როგორ ურთიერთქმედებს სინათლე თხევად გარემოში მოლეკულებთან. როდესაც სინათლე გადის სითხეში, ის შეიძლება შთანთქმულ იქნას სითხეში არსებული მოლეკულების მიერ, რაც იწვევს გადაცემული სინათლის ინტენსივობის შემცირებას. შთანთქმის რაოდენობა დამოკიდებულია სითხეში მოლეკულების ელექტრონულ სტრუქტურაზე და სინათლის სხივში ფოტონების ენერგიაზე. სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე სითხის ოპტიკური სიმკვრივის (OD) გაზომვით, ჩვენ შეგვიძლია მივიღოთ ინფორმაცია სითხეში მოლეკულების ელექტრონული სტრუქტურისა და ენერგიის დონის შესახებ, რომელიც მონაწილეობს სინათლის შთანთქმასა და გამოსხივებაში. ეს შეიძლება სასარგებლო იყოს აპლიკაციების ფართო სპექტრში, როგორცაა კონკრეტული მოლეკულის კონცენტრაციის განსაზღვრა სითხეში, ან ქიმიური რეაქციების კინეტიკის შესწავლა.

[5, 22, 25, 45, 65, 89, 109, 116] ბოლოდროინდელი პუბლიკაციები აქცენტირებულია ოპტიკური სიმკვრივის (OD) შეფასებაზე, ფრანკ-კონდონის პრინციპის გამოყენებით.

რიგი კვლევების ადასტურებს StellarNet –ის მიერ წარმოებულ სპექტრომეტრის Black Comet (190-850 ნმ) ეფექტურ გამოყენებას ღვინის სპექტროსკოპულ აპლიკაციებში. თუმცა ამ შემთხვევაში, მნიშვნელოვანია აგზნება/ემისიური სპექტრული მონაცემების დამუშავება ანალიტიკურ/სტატისტიკური მეთოდებით. სტატისტიკურ მეთოდთაგან აღსანიშნავია პიკური კომპონენტების ანალიზი (PCA). ჩვენს კვლევაში ნიმუშის, ღვინის აგზნება/ემისიური სპექტრული მონაცემები დამატებით გაანალიზდა პიკური კომპონენტების მიხედვით (PCA). PCA ანალიზის შესრულების შემდეგ ტოლერანტული ეტალონების რაოდენობის შემცირების მიზნით გამოიყენება ტოლერანტული ნიმუშის ეტალონთან შედარების ანალიზი (TES), რითაც განისაზღვრა რამდენად ტოლერანტულია საკვლევი ღვინის ნიმუში ამა თუ იმ კონკრეტულ ეტალონთან. TES ანალიტიკური მეთოდის გამოყენების ეფექტურობა ღვინის კლასიფიკაციისას მდგომარეობს იმაში, რომ მოლეკულების ტიპები (როგორცაა პოლიფენოლები, ვიტამინები, ამინომჟავები) და რაოდენობა დამოკიდებულია ღვინის კონკრეტულ სახეობაზე და სიმწიფეზე, აგრეთვე ღვინის ტექნოლოგიაზე [8, 42, 68, 72, 77, 84, 99].

ლიტერატურის მიმოხილვისა და ჩვენს მიერ შესრულებული კვლევების საფუძველზე, ჩვენი ჯგუფის მიერ გამოქვეყნებული იქნა რიგი შრომებისა, რომლებიც დაკავშირებულია ნივთიერების ოპტიკური თვისებების შესწავლასთან, ადაპტირებული ნახევარგამტარული CCD ფოტოდეტექტორით რეგისტრირებული სიგნალის პროგრამულ-აპარატურული მართვის საფუძველზე, ეს კვლევებია:

- ხაჯიშვილის, ლომიძის და შაინიძის ნაშრომი "CCD დეტექტორის SNR შეფასება OD საშუალებით" ყურადღებას ამახვილებს CCD კამერის სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) შეფასებაზე OD (ოპტიკური სიმკვრივის) გარემოსთვის. ავტორები იყენებენ მეთოდს, რომელიც მოიცავს ფონური ხმაურის და სიგნალის გაზომვას და შემდეგ ამ გაზომვების საფუძველზე SNR-ის გამოთვლას. ისინი ასევე ანალიზურად დებულობენ ფორმულას თეორიული SNR-ის გამოსათვლელად CCD დეტექტორისათვის [57].
- ხაჯიშვილის, ლომიძის და შაინიძის ნაშრომი "თხევადი გარემოს 3D ფლუორესცენციული სპექტროსკოპია შიდა ეტალონური ნიმუშის მეთოდით"

განიხილავს 3D ფლუორესცენციული სპექტროსკოპიის გამოყენების მეთოდს თხევადი გარემოს თვისებების შესასწავლად. ავტორები იყენებენ შიდა ეტალონური ნიმუშის მეთოდს გაბნევისა და შთანთქმის ეფექტის გამოსასწორებლად. ისინი აჩვენებენ ამ მეთოდის ეფექტურობას სხვადასხვა ტიპის თხევადი საშუალებების, მათ შორის წყლისა და ნავთობის სპექტრების მაგალითზე [60].

- ლომიძის, შაინიძის, ხაჯიშვილის, ჯაბნიძის, მახარაძის, კალანდაძის, ნაკაშიძის, სურმანიძის და მსხალაძის ნაშრომი "ბიონაწილაკების განაწილების შესწავლა 3D ფლუორესცენციული სპექტროსკოპიით" იკვლევს 3D ფლუორესცენციის გამოყენებას ბიონაწილაკების განაწილების შესასწავლად. ავტორები იყენებენ ამ ტექნიკას ვირუსების განაწილების გამოსაკვლევად სხვადასხვა ტიპის თხევად გარემოში. ისინი აჩვენებენ, რომ 3D ფლუორესცენციული სპექტროსკოპია არის ძლიერი ინსტრუმენტი ბიონაწილაკების განაწილების შესასწავლად თხევად გარემოში [40].
- ლომიძის, შაინიძის, ჯაბნიძის, მახარაძის, ხაჯიშვილის, კალანდაძის, ნაკაშიძის და მსხალაძის ნაშრომი "გაუსური ლაზერის სხივის შემთხვევითი ფაზის ეკრანის გავლით გავრცელებისას სცინტილაციის ინდექსის შეფასება" ყურადღებას ამახვილებს სცინტილაციის ინდექსის შეფასებაზე, გაუსური ლაზერის სხივის შემთხვევითი ფაზური ეკრანის გავლით გავრცელებისას. ავტორები იყენებენ თეორიულ მოდელს სცინტილაციის ინდექსის პროგნოზირებისთვის და შემდეგ ადასტურებენ თავიანთ მოდელს ექსპერიმენტული მონაცემების გამოყენებით. ისინი აჩვენებენ, რომ მათი მოდელი უზრუნველყოფს სცინტილაციის ინდექსის ზუსტ პროგნოზს პირობების ფართო სპექტრში [39].
- ლომიძის, შაინიძის, შენგელიასა და თურმანიძის ნაშრომში „ფლუორესცენციული აგზნების სპექტრების პრობლემები“ განხილულია ფლუორესცენციის აგზნების სპექტრების პრობლემა, რომელთა ზუსტად გაზომვა ხშირად რთულია. ავტორები გვთავაზობენ ამ სპექტრების გაზომვის მეთოდს, რომელიც მოიცავს ეტალონური ნიმუშის გამოყენებას ცნობილი

აგზნების სპექტრით. ისინი აჩვენებენ თავიანთი მეთოდის ეფექტურობას რამდენიმე სხვადასხვა ფლუორესცენტულ საღებავზე მისი გამოყენებით [29].

- შაინიძის და ლომიძის ნაშრომი „ფლუორესცენციული სპექტრების ფორმირება ფრანკ-კონდონის ფაქტორის საფუძველზე“ ეძღვნება თხევადი გარემოს მოლეკულური ფლუორესცენციული სპექტრების ფორმირებას ფრანკ-კონდონის პრინციპის საფუძველზე. წარმოდგენილია ელექტრონული ვიბრაციული გადასვლების მექანიზმი და შეფასებულია გადასვლების შესაბამისი შთანთქმისა და ფლუორესცენციის ინტენსივობები. ნაჩვენებია, რომ შთანთქმისა და ფლუორესცენციის სპექტრები ასახავს ელექტრონული გადასვლის შედეგად წარმოქმნილი ვიბრაციული გადასვლების ფარდობით ინტენსივობას. სპექტრი ასახავს აგრეთვე აგზნებული მდგომარეობის ვიბრაციული დონეების გადაფარვას, ამასთან, თითოეული კომპონენტის ინტენსივობა დამოკიდებულია გადაფარვის ხარისხზე ძირითადი მდგომარეობის ვიბრაციულ ტალღურ ფუნქციასთან მიმართებაში [96].
- ხაჯიშვილის, შაინიძის, მახარაძისა და ლომიძის ნაშრომი „ღვინის ფლუორესცენციული აგზნება/ემისიური ეტალონური მატრიცის შექმნის შესახებ“, ეძღვნება StellarNet –ის მიერ წარმოებულ სპექტრომეტრის Black Comet (190-850 ნმ) გამოყენებით 3D ფლუორესცენციული სპექტროსკოპიის (3DF) საფუძველზე ქართული სხვადასხვა სახეობის ღვინის ანალიზს. ამ მეთოდში 3D ფლუორესცენციული სიგნალი დაყოფილია ფიქსირებული რაოდენობის სტატისტიკურ კომპონენტებად. თითოეული სახეობის ღვინისათვის ხორციელდება 3D მონაცემთა ბაზის მკაცრად განსაზღვრა, რომელსაც პირობითად ავტორები ეტალონებს უწოდებენ. ეტალონები დეტალურად აღწერს აგზნება/ემისიური სპექტრებს. 3DF მეთოდის უპირატესობა დანარჩენ სტატისტიკურ მეთოდებთან შედარებით, როგორცაა მაგალითად პიკური კომპონენტების ანალიზი (PCA), მდგომარეობს სპექტრების გაშლის უნიკალურობაში. ღვინის ფლუორესცენციის სპექტრები დამატებით გაანალიზდება პიკური კომპონენტების ანალიზით (PCA). PCA ანალიზის შესრულების შემდეგ ტოლერანტული ეტალონების რაოდენობის შემცირების

მიზნით ავტორები იყენებენ ტოლერანტული ნიმუშის ეტალონთან შედარების ანალიზს (TES), რითაც განსაზღვრავენ რამდენად ტოლერანტულია საკვლევი ღვინის ნიმუში ამა თუ იმ კონკრეტულ ეტალონთან [58-59].

თავი I. ოპტიკურ-ელექტრული სისტემების საფუძვლები და გამოყენება

§ 1.1. ოპტიკური სიმკვრივე და შთანქმე

ოპტიკურ სიმკვრივე (OD – Optical Density) არის ნივთიერების მიერ სინათლის შთანთქმის საზომი. მას ხშირად იყენებენ ხსნარში კონკრეტული ნივთიერების კონცენტრაციის რაოდენობრივად გასაზომად. OD გამოითვლება, როგორც ლოგარითმი ნიმუშის გავლით გადაცემული სინათლის ინტენსივობის თანაფარდობისა ნიმუშზე დაცემული სინათლის ინტენსივობასთან. OD არის განზომილებიანი სიდიდე და შეიძლება გამოისახოს შთანთქმის ერთეულებში (AU). რაც უფრო მაღალია OD, მით მეტია ნიმუშის მიერ სინათლის შთანქმე. OD ჩვეულებრივ გამოიყენება სხვადასხვა სფეროში, როგორცაა ქიმია, ბიოლოგია, ფიზიკა და ინჟინერია კონკრეტული ნივთიერების კონცენტრაციის გასაზომად ხსნარში ან თხელფენოვანი ნივთიერების სისქის გასაზომად.

პრაქტიკულად, OD-ის გაანგარიშება გულისხმობს სინათლის ინტენსივობის გაზომვას, რომელიც გადის საკვლევ ნიმუშში, იმ სინათლის ინტენსივობასთან შედარებით, რომელიც გადის ეტალონურ ხსნარში ან ცარიელ კუვეტაში.

თანაფარდობა:

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\beta L}, \quad (1.1.1)$$

ასევე ცნობილია, როგორც გადაცემა (Transmission). I_0 არის დაცემული სინათლის ინტენსივობა (ანუ შუქი, სანამ ის ნიმუშში გაივლის), I არის გადაცემული სინათლის ინტენსივობა (ანუ შუქი, რომელიც გადის ნიმუშში), β - შთანთქმის კოეფიციენტი, ხოლო L - კუვეტის სიგრძეა. სინათლის გადაცემის მაჩვენებელი კუვეტის სიგრძის მიხედვით ექსპონენციალურად მცირდება. (1.1.1)-ის ორივე მხარეს ავიღოთ ნატურალური ლოგარითმი მივიღებთ:

$$\ln T = \ln\left(\frac{I}{I_0}\right) = \ln(e^{-\beta L}) = -\beta L = -(\beta_s + \beta_a)L$$
$$\beta = \beta_s + \beta_a \quad (1.1.2)$$

მილევის კოეფიციენტი დაყოფილია ორ ნაწილად, β_s - გაბნევის კოეფიციენტად და β_a - შთანთქმის კოეფიციენტია.

თუ დეტექტორის ზომა ძალიან მცირეა სინათლის მიერ გავლილ მანძილთან შედარებით, მაშინ ნებისმიერი სინათლე, რომელიც გაიბნევა ნივთიერების ნაწილაკების მიერ პირდაპირ თუ ირიბი მიმართულებით, ცხადია არ მოხვდება დეტექტორს. ასეთ შემთხვევაში $\ln T$ -ის, როგორც ტალღის სიგრძის ფუნქციის გრაფიკი გვაძლევს შთანთქმისა და გაბნევის სუპერპოზიციის ეფექტს. რადგან შთანთქმული ნაწილი უფრო გამოკვეთილია ვიდრე გაბნეული, ამიტომ შთანთქმულ ნაწილს იყენებენ მშთანთქმელი ნაწილაკების რაოდენობრივი განსაზღვრისათვის და იდენტიფიკაციისათვის. შთანთქმის ნაწილს უწოდებენ შთანთქმის სპექტროსკოპიას, ხოლო სპექტრზე ასახულ სიდიდეს შთანთქმას უწოდებენ. შთანთქმას ავლნიშნოთ A სიმბოლოთი (Absorption). აღსანიშნავია, რომ რიგ შემთხვევაში A შთანთქმის გამოსასახად იყენებენ ლოგარითმს 10-ის ფუძით და არა ნეპერის ფუძით:

$$A = \log_{10} \left(\frac{I_0}{I} \right), \quad (1.1.3)$$

ერთგვაროვან გარემოში, მაგალითად ხსნარში, გაბნევა არ გვაქვს. ამ შემთხვევაში მშთანთქმელი ნაწილაკების კონცენტრაცია წრფივი კანონით იცვლება. ეს საკითხი დეტალურად გამოიკვლია **ავგუსტ ბერმა**. აღმოჩნდა, რომ განსაზღვრული ცალკეული ნაწილაკების წილი ადიტიურია. ეს საკმაოდ კარგი პირობაა იმისათვის, რომ შთანთქმის მაჩვენებელი გახდეს უფრო პრიორიტეტული, ვიდრე შთანთქმის წილი. ჩვეულებრივ, ბერის კანონი ჩაიწერება ფორმულით:

$$A = \varepsilon Lc, \quad (1.1.4)$$

სადაც ε - შთანთქმის მოლური კოეფიციენტი.

არაერთგვაროვანი გარემოსათვის დამახასიათებელია გაბნევის პროცესი, მაგრამ გარემო არ შეიცავს ლუმინესცენციურ ან ფლუორესცენციულ ნაწილაკებს, ე.ი არ ასხივებს, ამ შემთხვევაში შთანთქმა განისაზღვრება ფორმულით [53]:

$$A = -\log_{10}(1 - \alpha) \quad (1.1.5)$$

იმ შემთვევაში, თუ გარემო მასზე დაცემულ სხივს, როგორც გადასცემს, ისე ასხივებს, მაშინ დაცემული სინათლის ნაწილი შთაითქმება (α), ნაწილი გამოსხივდება (R - Remited) და გადაიცემა (T - Transmitted), ამიტომ:

$$\alpha + R + T = 1$$

აქედან:

$$1 - \alpha = R + T$$

უკანასკნელი გავითვალისწინოთ (1.1.5)-ში, მივიღებთ:

$$A = -\log_{10}(R + T) \quad (1.1.6)$$

იმ გარემოსათვის, რომელიც სინათლეს არ განაზნევს $R = 0$, (1.1.6)-დან ვღებულობთ:

$$A = -\log_{10}(T) \quad (1.1.7)$$

მიუხედავად იმისა, რომ ეს შთანთქმის ფუნქცია ძალიან სასარგებლოა გამზნევი ნიმუშების შესასწავლად, ამ ფუნქციას არ აქვს ისეთივე სასურველი შედეგები, როგორც არაგამზნევი ნიმუშისათვის ჰქონდა. თუმცა, არსებობს თვისება, რომელსაც ეწოდება **შთანთქმის უნარი**. შთანთქმის უნარი გამზნევი ნიმუშის სისქის ერთეულზე ისეთივეა, როგორც შთანქმის უნარი არაგამზნევი ნიმუშისათვის იმავე სისქისათვისათვის [17].

ოპტიკაში შთანთქმა არის კუვეტის ბილიკის სიგრძისადმი მონოტორულად მზარდი ფუნქცია და უახლოვდება ნულს, როცა ბილიკის სიგრძე მიისწრაფვის ნულისაკენ. ტერმინის „ოპტიკური სიმკვრივის“ გამოყენება შთანთქმისათვის დაუშვებელია.

ნიმუშის შთანთქმა შეიძლება ჩაიწეროს გამოსახულებით:

$$A = \log_{10} \left(\frac{\Phi_e^i}{\Phi_e^t} \right) = -\log_{10}(T), \quad (1.1.8)$$

სადაც Φ_e^i - ნიმუშზე დაცემული სინათლის ნაკადია, ხოლო Φ_e^t - ნიმუშის მიერ გადაცემული სინათლის ნაკადია, $T = \frac{\Phi_e^t}{\Phi_e^i}$ - სხივის გადაცემის კოეფიციენტი.

შთანთქმა უგანზომილებო სიდიდეა. მიუხედავად ამისა, ულტრააისფერ-ხილულ სპექტროსკოპიაში შთანთქმის ერთეულად იყენებენ ერთეულს AU (Absorption Unit). მაღალეფექტურ თხევად ქრომოტოგრაფიაში იყენებენ მისგან წარმოებულ ერთეულებს mAU ან mAU×წთ, ეს არის დროის გარკვეულ შუალედში შთანთქმული სინათლის ნაკადის ერთეული [29].

შთანთქმა დაკავშირებულია ოპტიკურ სიღრმესთან თანაფარდობით:

$$A = \frac{d}{\ln 10} = d \log_{10} e . \quad (1.1.9)$$

d – ოპტიკური სიღრმეა. განასხვავებენ სპექტრულ შთანთქმას სიხშირისა (A_f) და ტალღის სიგრძის (A_λ) მიხედვით:

$$A_f = \log_{10} \left(\frac{\Phi_{e,f}^i}{\Phi_{e,f}^t} \right) = -\log_{10}(T_f), \quad (1.1.10)$$

$$A_\lambda = \log_{10} \left(\frac{\Phi_{e,\lambda}^i}{\Phi_{e,\lambda}^t} \right) = -\log_{10}(T_\lambda), \quad (1.1.11)$$

სადაც $\Phi_{e,f}^i$, $\Phi_{e,\lambda}^i$ - ნიმუშზე დაცემული შესაბამისად f სიხშირის ან λ - ტალღის სიგრძის სინათლის ნაკადია, ხოლო $\Phi_{e,f}^t$, $\Phi_{e,\lambda}^t$ - ნიმუშის მიერ გადაცემული შესაბამისად f სიხშირის ან λ - ტალღის სიგრძის სინათლის ნაკადია, T_f და T_λ - სპექტრული გადაცემის კოეფიციენტებია შესაბამისად f სიხშირის ან λ - ტალღის სიგრძის სინათლისათვის.

სპექტრული შთანთქმა თავის მხრივ დაკავშირებულია სპექტრულ ოპტიკურ სიღრმესთან თანაფარდობებით:

$$A_f = \frac{d_f}{\ln 10} = d_f \log_{10} e . \quad (1.1.12)$$

$$A_\lambda = \frac{d_\lambda}{\ln 10} = d_\lambda \log_{10} e . \quad (1.1.13)$$

d_f , d_λ - სპექტრული ოპტიკური სიღრმეა შესაბამისად სიხშირის და ტალღის სიგრძის მიხედვით.

შთანთქმა და მიღება განსხვავდება ეთმანეთისაგან. შთანთქმა ეს არის რიცხვითი მნიშვნელობა, რომელიც ზომავს სიგნალის ინტენსივობის ნივთიერებაში გავრცელების შესუსტებას, რაც შეეხება მიღებას, ის შეიძლება გამოწვეული იყოს ფიზიკური პროცესით - შთანთქმითაც, მაგრამ ამავე დროს ის შეიძლება გამოწვეული იყოს არეკვლით, გაბნევით და სხვა ფიზიკური პროცესებით. ნივთიერების შთანთქმა დაახლოებით ტოლია მიღების, როცა როგორც შთანთქმა, ასევე მიღება არის ბევრად მცირე 1-ზე, და ნივთიერების გამოსხივების უნარი კიდევ უფრო მცირეა, ვიდრე შთანთქმა. აღსანიშნავია, რომ ნივთიერების გამოსხივების უნარი არ უნდა ავურიოთ გამოსხივებისა და გასხივების კოეფიციენტებში. შეიძლება დავწეროთ:

$$\Phi_e^i + \Phi_e^e = \Phi_e^t + \Phi_e^{att}, \quad (1.1.14)$$

სადაც Φ_e^i - ნივთიერების მიერ მიღებული სინათლის ნაკადია (დაცემული ნაკადი), Φ_e^e - ნივთიერების მიერ ემისირებული სინათლის ნაკადია, Φ_e^t - ნივთიერების მიერ გადაცემული გამოსხივების ნაკადია, Φ_e^{att} - ნივთიერების მიერ შთანთქმული გამოსხივების ნაკადია. (1.1.14)-ის ორივე მხარე გავყოთ დამული სინათლის ნაკადზე (Φ_e^i), მივიღებთ:

$$1 + \frac{\Phi_e^e}{\Phi_e^i} = \frac{\Phi_e^t}{\Phi_e^i} + \frac{\Phi_e^{att}}{\Phi_e^i}$$

$$1 + E = T + ATT, \quad (1.1.15)$$

$E = \frac{\Phi_e^e}{\Phi_e^i}$ - ნივთიერების გამოსხივების კოეფიციენტი;

$T = \frac{\Phi_e^t}{\Phi_e^i}$ - გადაცემის კოეფიციენტი;

$ATT = \frac{\Phi_e^{att}}{\Phi_e^i}$ - მოცემული ნივთიერების შთანთქმის კოეფიციენტი.

ბერ-ლამბერტის კანონის თანახმად (1.1.7) გამოსახულებიდან ვღებულობთ:

$$T = 10^{-A}. \quad (1.1.16)$$

(1.1.16) გავითვალისწინოთ (1.1.15)-ში, და გამოვსახოთ შთანთქმის კოეფიციენტი:

$$ATT = 1 + E - 10^{-A}. \quad (1.1.17)$$

თუ $A \ll 1$, მაშინ:

$$ATT = 1 - 10^{-A} + E \approx 1 - (1 - A \ln 10) + E = A \ln 10 + E, \quad (1.1.18)$$

როდესაც გადაცემის კოეფიციენტი გაცილებით მცირეა შთანთქმაზე: $E \ll A$, მაშინ საბოლოოდ მივიღებთ:

$$ATT \approx A \ln 10. \quad (1.1.19)$$

ნივთიერების შთანთქმა დაკავშირებულია მის მილევის კოეფიციენტთან:

$$A = \int_0^l \alpha(x) dx, \quad (1.1.20)$$

l - ნივთიერების სისქეა, ის პრაქტიკულად წარმოადგენს სხივის მიერ გასავლელი ბილიკის სიგრძეს, რაც შეესაბამება კუვეტის სიგრძეს; $\alpha(x)$ - ნივთიერების მილევის კოეფიციენტია სხივის გავრცელების x - მიმართულებაზე. თუ $\alpha(x)$ - თანაბრადაა განაწილებული მის მთელ სიგრძეზე, მაშინ ამბობენ რომ მილევა არის წრფივი და შეიძლება სხივის მთელ გზაზე ჩაითვალოს მუდმივ სიდიდედ:

$$A = \alpha l. \quad (1.1.21)$$

ზოგჯერ ნივთიერების მილევის კოეფიციენტი შეიძლება გამოისახოს მოლური მილევის კოეფიციენტით:

$$A = \int_0^l \varepsilon c(x) dx, \quad (1.1.22)$$

ε - მოლური მილევის კოეფიციენტია, ხოლო $c(x)$ - ნივთიერების მოლური კონცენტრაციაა x - მიმართულებაზე. თუ ჩავთვლით, რომ $c(x)$ თანაბრადაა განაწილებული x - მიმართულებაზე, მაშინ ის შეიძლება მუდმივად ჩავთვალოთ და (1.1.22) ინტეგრალიდან მივიღებთ:

$$A = \varepsilon c l. \quad (1.1.23)$$

ყურადსაღებია, რომ მილევის მოლური კოეფიციენტის ნაცვლად ტერმინის „მოლური შთანთქმის უნარი“ გამოყენება არ არის რეკომენდირებული.

ნებიმიერი რეალური გამოზომი ხელსაწყო შემოსაზღვრულია გარკვეული დიაპაზონით. ამ დიაპაზონის ფარგლებში ხელსაწყოს ზუსტად შეუძლია ოპტიკური სიმკვრივის გაზომვა. ხელსაწყო დაყალიბებული უნდა იქნას ცნობილ სტანდარტებთან მიმართებაში და შემოწმდეს შეიძლება თუ არა მისი მონაცემების (სტანდარტის) ნდობა. ბევრი გამოზომი ხელსაწყო შეიძლება გახდეს არაწრფივი, ე.ი. აღარ დაემორჩილოს ბერ-ლამბერტის კანონს დაწყებული დაახლოებით 2 AU შთანთქმის მნიშვნელობისას, როცა გადაცემის უნარი დაახლოებით 1%-ია. აღსანიშნავია, რომ ასევე რთულია ზუსტად გაიზომოს შთანთქმის ძალიან მცირე მნიშვნელობები, მაგალითად 10^{-4} AU-ზე ქვემოთ, სტანდარტული ქიმიური ანალიზისათვის განკუთვნილი ხელსაწყოებით. ამ შემთხვევაში მიზანშეწონილია შთანთქმის ლაზერული მეთოდების გამოყენება, ამ მეთოდებმა აჩვენეს, რომ გაზომვის სიზუსტე რამდენიმე რიგით აღემატება, ჩვეულებრივ არალაზერული ხელსაწყოების ზღვარს. კერძოდ ლაზერული მეთოდებით შესაძლებელია $5 \cdot 10^{-13}$ AU-ზე ქვემოთ შესრულდეს გაზომვები. საუკეთესო მაჩვენებელი ლაზერული მეთოდების გამოყენებისას მიიღება შთანთქმის მნიშვნელობისას დაახლოებით 1 AU. უფრო მაღალი შთანქმის მაჩვენებლის შემთხვევაში საჭიროა შერჩეული იქნას ნიმუშის ბილიკის სიგრძე ან კონცენტრაცია, რომ შთანქმის დონე დაუახლოვდეს ოპტიმალურ ნიშნულს.

როგორც წესი, გახსნილი ნივთიერების შთანთქმა იზომება შთანთქმის სპექტროსკოპიის გამოყენებით. ეს გულისხმობს შუქის დასხივებას ხსნარზე და იმის ჩაწერას, თუ რამდენი სინათლე და რა ტალღის სიგრძე გადავიდა დეტექტორზე. ამ ინფორმაციის გამოყენებით შეიძლება განისაზღვროს ტალღის სიგრძე, რომელიც შთაითქმება [87].

პირველ რიგში გაზომვები ტარდება "ცარიელ" ნიმუშზე მხოლოდ გამხსნელის გამოყენებით, რათა მიღებული იქნას ეტალონური ნიმუში. ეს გაზომვები საჭიროა იმისათვის, რომ ცნობილი გამხსნელის შთანთქმა დადგინდეს. შემდეგ შთანთქმის ნებისმიერი ცვლილება საკვლევი ხსნარის გაზომვისას ხდება მხოლოდ ეტალონურ მაჩვენებელთან შედარების გზით. შემდეგ ხდება საკვლევი ხსნარის განთავსება კუვეტაში, გაზომვების შესრულება სპექტრომეტრის გამოყენებით. გადაცემული

სპექტრული სხივური ნაკადი, რომელიც გადის ნიმუშში, იზომება და დარდება დაცემული სპექტრული სხივის ნაკადს. სპექტრული შთანთქმა მოცემულ ტალღის სიგრძეზე განისაზღვრება (1.1.10) ან (1.1.11) ფორმულებით.

UV-Vis ტიპის სპექტროფოტომეტრი ავტომატიზებულია. ამ სპექტრომეტრის გამოსაყენებლად ხსნარები მოთავსებულია პატარა კუვეტში და ჩადგმულია კუვეტის დამჭერში. სპექტრომეტრი კონტროლდება კომპიუტერის საშუალებით და, როგორც კი ის "ჩაიკვება", ავტომატურად აჩვენებს შთანთქმას ტალღის სიგრძის ან სიხშირის მიხედვით. ხსნარის შთანთქმის სპექტრის მიღება საჭიროა ამ ხსნარის კონცენტრაციის დასადგენად, ბერ-ლამბერტის კანონის საფუძველზე.

ზოგიერთი სპექტრული ფილტრი, მაგალითად ფერადი მინა, ფასდება ჩამუქების რიცხვით (SN - Shade number). იგი გამოისახება გამოსახულებით [87]:

$$SN = \frac{7}{3}A + 1 = \frac{7}{3}(-\log_{10}T) + 1. \quad (1.1.24)$$

მაგალითად, თუ ფილტრს აქვს 0,1% გამტარობა (0,001 გამტარობა, რაც არის 3 შთანთქმის ერთეული), მისი ჩამუქების რიცხვი იქნება 8.

რაც შეეხება ოპტიკურ სიმკვრივეს, ეს ტერმინი და შთანთქმა განსხვავებული ცნებებია ოპტიკასა და სპექტროსკოპიაში.

ოპტიკური სიმკვრივე განსაზღვრავს ნივთიერების უნარს შთანთქმოს სინათლე განსაზღვრული ტალღის სიგრძით. ის განისაზღვრება, როგორც ლოგარითმი ნიმუშზე დაცემული სინათლის ინტენსივობისა ნიმუშის გავლით გასული სინათლის ინტენსივობასთან. ოპტიკური სიმკვრივე გამოიყენება ხსნარში ნივთიერების კონცენტრაციის დასადგენად, როცა ნივთიერება შთანთქმავს სინათლეს გარკვეული სიხშირით.

რაც შეეხება შთანთქმას, ის გვიჩვენებს ნიმუშში სინათლის ინტენსივობის შესუსტებას. ბერ-ლამბერტის კანონის თანახმად სინათლის ინტენსივობა ნივთიერებაში გავლისას ექსპონენციალური კანონით კლებულობს. შთანთქმა იზომება უშუალოდ სპექტროფოტომეტრით, რომელიც ზომავს ნივთიერების მიერ შთანთქმული სინათლის ინტენსივობას სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე (ტალღის სიგრძეთა დიაპაზონში).

კონკრეტულ ტალღის სიგრძეზე ოპტიკური სიმკვრივე (OD), რიცხობრივად უდრის შთანთქმას ამ სიხშირეზე::

$$OD = A = -\log_{10} T. \quad (1.1.25)$$

მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ ეტალონური ნიმუშის არჩევამ შეიძლება გავლენა მოახდინოს გამოთვლილ OD მნიშვნელობაზე. საკონტროლო ხსნარი უნდა იყოს გამხსნელი ან ბუფერი, რომელსაც აქვს იგივე ოპტიკური თვისებები, როგორც ნიმუშის ხსნარს, მაგრამ ნივთიერების გაზომვის გარეშე. გარდა ამისა, გაზომვისთვის გამოყენებული სინათლის ტალღის სიგრძე უნდა იყოს შესაბამისი ანალიზის ნიმუშისთვის. ქვემოთ მოცემულია მოცულობითი OD გაზომვის რამდენიმე მაგალითი:

- *ბაქტერიების ზრდის გაზომვა:* მიკრობიოლოგიაში ბაქტერიული კულტურების ზრდის მონიტორინგი შესაძლებელია კონკრეტულ ტალღის სიგრძეზე მოცულობითი OD გაზომვით. მცენარეთა კულტურაში ბაქტერიების რაოდენობის მატებასთან ერთად იზრდება ოპტიკური სიმკვრივეც და მაშასადამე მიიღება OD-ის უფრო მაღალი მაჩვენებელი.
- *ცილის კონცენტრაციის რაოდენობრივი განსაზღვრა:* ცილების კონცენტრაცია ხსნარში შეიძლება განისაზღვროს ხსნარის მოცულობითი OD გაზომვით კონკრეტულ ტალღის სიგრძეზე. სხვადასხვა პროტეინი განსხვავებულად შთანთქავს სინათლეს, ამიტომ გაზომვისთვის გამოყენებული ტალღის სიგრძე დამოკიდებული იქნება შესასწავლ ცილაზე.
- *ნუკლეინის მჟავის ნიმუშების სისუფთავის განსაზღვრა:* ნუკლეინის მჟავის ნიმუშების მოცულობითი OD შეიძლება გამოყენებულ იქნას ნიმუშის სისუფთავის შესაფასებლად. დამაბინძურებლებს, როგორცაა ცილები და ორგანული ნაერთები, შეუძლიათ სინათლის შთანთქმა იმავე ტალღის სიგრძეზე, რომელზედაც ნუკლეინის მჟავები. რაც იწვევს ნუკლეინის მჟავას კონცენტრაციის სიჭარბეს. აღსანიშნავია, რომ ნიმუშის სისუფთავე შეიძლება გამოითვალოს ორ სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე OD-ის გაზომვით.

სადისერტაციო თემის ექსპერიმენტულ ნაწილში დაიგეგმა საკვლევი ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივე ის (OD) გაზომვა StellarNet-ის სპექტრომეტრის გამოყენებით,

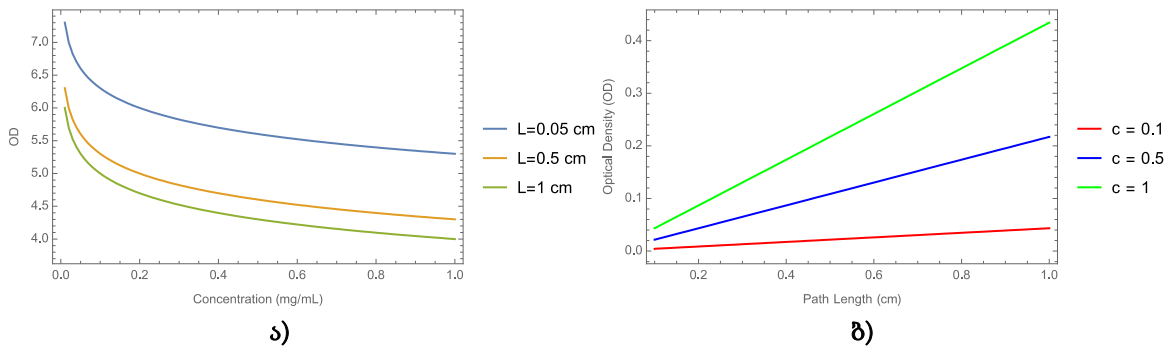
რომელიც იყენებს BlackComet (190-850 ნმ) დეტექტორს. დაიგეგმა შესასრულებელი სამუშაოები, კერძოდ:

- **სპექტრომეტრის ინსტალაცია:** BlackComet დეტექტორი ოპტიკურ-ბოჭკოვანი სადენებით დავუკავშირეთ კუვეტას დამჭერს, ხოლო USB პორტით სარეგისტრაციო მოწყობილობას. სიგნალების რეგისტრაციისათვის გამოვიყენეთ StellarNet-ის პროგრამული უზრუნველყოფა SpectraWiz. დავაინსტალირეთ პროგრამული უზრუნველყოფა და დავაყალიბეთ BlackComet დეტექტორის სალიცენზიო კოდის, თანდართული პარამეტრების მითითებით.
- **ნიმუშის მომზადება:** მოვათავსეთ ნიმუში კუვეტაში და დავრწმუნდით, რომ ის სწორად არის გასწორებული სინათლის სხივთან.
- **სპექტრების გადაღება:** ჩავწერეთ ნიმუშის სპექტრი სპექტრომეტრის პროგრამული უზრუნველყოფის გამოყენებით (Excel, SpectraWiz, Mathematica).
- **ეტალონური სპექტრების გადაღება:** მოვათავსეთ საკონტროლო ნიმუში ე.წ. ეტალონი კუვეტაში და გადავიღეთ სპექტრები. აღსანიშნავია, რომ საკონტროლო ნიმუში წარმოადგენდა იმავე გამხსნელს, რასაც საკვლევი ნიმუში, რათა გამოგვერიცხა გამხსნელის მიერ გამოწვეული ფონური შთანთქმის გავლენა.
- **OD-ს გამოთვლა:** ნიმუშის OD-ის გამოსათვლელად ვისარგებლეთ (1.25) ფორმულით.

ზოგადად, კონცენტრაცია უნდა შეირჩეს ისე, რომ შთანთქმა მოხვდეს დეტექტორის ხაზოვან დიაპაზონში, როგორც წესი, 0.2-დან 1.0-მდე. ასევე მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ კონცენტრაციის არჩევამ შეიძლება გავლენა მოახდინოს გაზომვის სიზუსტეზე, რადგან სინათლის შთანთქმაზე შეიძლება გავლენა იქონიოს ისეთმა ფაქტორებმა, როგორიცაა გამხსნელის მოქმედება, ტემპერატურა და სხვა ნაერთების არსებობა. კუვეტის ბილიკის სიგრძე შეიძლება დამოკიდებული იყოს კონკრეტულ ექსპერიმენტულ მოთხოვნებზე, როგორცაა დეტექტორის მგრძობელობა ან ნიმუშის კონცენტრაცია. ჩვეულებრივ 1 სმ სიგრძის ბილიკის კუვეტა გამოიყენება სპექტროფოტომეტრებში. თუმცა, დაბალი კონცენტრაციის ან მაღალი შთანთქმის მქონე ნიმუშებისთვის, უფრო მოკლე ბილიკის სიგრძის კუვეტა

შეიძლება იყოს უფრო შესაფერისი დეტექტორის სიგნალის გაჯერების თავიდან ასაცილებლად. პირიქით, მაღალი კონცენტრაციის ან დაბალი შთანთქმის მქონე ნიმუშებისთვის შეიძლება საჭირო გახდეს უფრო გრძელი ბილიკის სიგრძის კუვეტა, რათა მიღებული იქნას გაზომვადი სიგნალი. საბოლოო ჯამში, კუვეტის ბილიკის სიგრძის არჩევანი დამოკიდებულია ექსპერიმენტის სპეციფიკურ საჭიროებებზე და უნდა განისაზღვროს ემპირიული ტესტირების გზით.

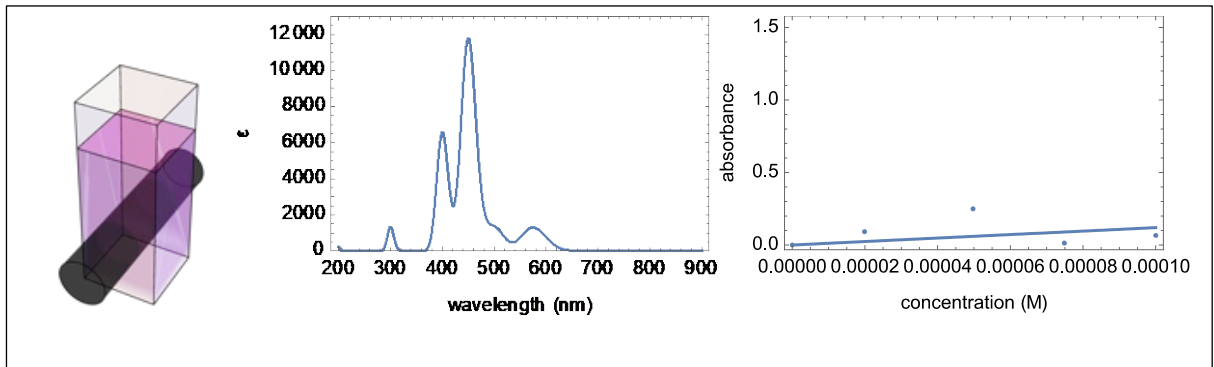
ნახ.1.1 ა)-ზე მოცემულია ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივის OD -ს დამოკიდებულება კონცენტრაციაზე კუვეტის ბილიკის სხვადასხვა სიგრძეზე. ნაჩვენებია, რომ ბილიკის სიგრძის ზრდა მოცემული ნიმუშისათვის ამცირებს ოპტიკურ სიმკვრივეს, რაც ნიშნავს, რომ იზრდება შთანთქმის მაჩვენებელი და პირიქით. ამასთან, კონცენტრაციის ზრდა განაპირობებს ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივის ექსპონენციალურ შემცირებას. ნახ.1.1 ბ)-ზე მოცემულია ოპტიკური სიმკვრივის დამოკიდებულება კუვეტის ბილიკის სიგრძეზე სხვადასხვა კონცენტრაციისას. ეს დამოკიდებულება წრფივ ხასიათს ატარებს, ამასთან მაღალ კონცენტრაციას შეესაბამება ოპტიკური სიმკვრივის უფრო ციკაბო გრაფიკი.



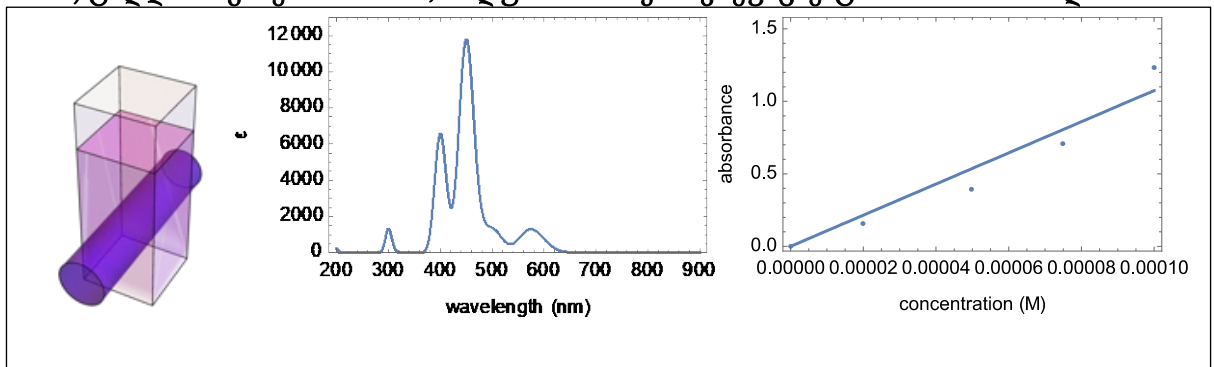
ნახ.1.1. ა) OD vs c , სამი მრუდი, როცა ბილიკის სიგრძეა 0.05, 0.5 და 1 სმ, $\lambda = 337.1$ ნმ; ბ) OD vs L , სამი წრფე, როცა თითოეულს შეესაბამება სხვადასხვა კონცენტრაციის მნიშვნელობა 0.1, 0.5, 1, $\lambda = 337.1$ ნმ

ნახ.1.2-ზე წარმოდგენილია ნიმუშის შთანთქმის სპექტრები, რომელიც ასახავს ნიმუშის მოლური შთანთქმის კოეფიციენტის დამოკიდებულებას ტალღის სიგრძეზე. ნახ.1.2 ა)-ზე წარმოდგენილია სპექტრის ულტრაიისფერ დიაპაზონში პიკური მნიშვნელობის ტალღის სიგრძეზე, 300 ნმ-ზე შთანთქმის დამოკიდებულება კონცენტრაციაზე, ნახ.1.2 ბ)-ზე წარმოდგენილია იგივე დამოკიდებულება ლურჯი ტალღის დიაპაზონში პიკური მნიშვნელობის ტალღის სიგრძეზე 448 ნმ-ზე, ხოლო

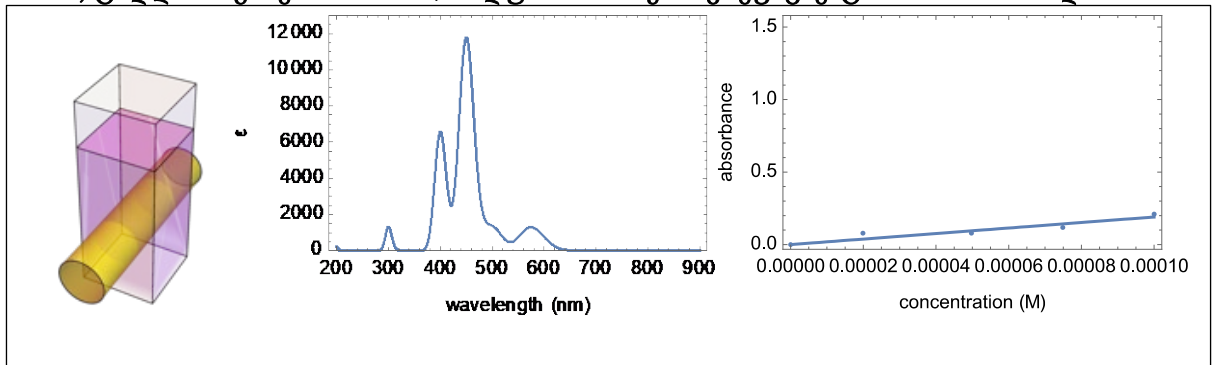
ნახ.1.2 გ)-ზ კი - ყვითელი ტალღის დიაპაზონში პიკური მნიშვნელობის ტალღის სიგრძეზე 574 ნმ წარმოდგენილია ანალოგიური დამოკიდებულება.



ა) ტალღის სიგრძე: $\lambda = 300$ ნმ, მოლური შთანთქმის კოეფიციენტი: $\epsilon = 1242.5$ მოლი⁻¹სმ⁻¹



ბ) ტალღის სიგრძე: $\lambda = 448$ ნმ, მოლური შთანთქმის კოეფიციენტი: $\epsilon = 11653$ მოლი⁻¹სმ⁻¹



გ) ტალღის სიგრძე: $\lambda = 574$ ნმ, მოლური შთანთქმის კოეფიციენტი: $\epsilon = 1306.8$ მოლი⁻¹სმ⁻¹

ნახ.1.2. ნიმუშის შთანთქმის მოლური კოეფიციენტის სპექტრი. შთანთქმის დამოკიდებულება კონცენტრაციაზე სხვადასხვა ტალღის სიგრძის შემთხვევაში, როცა გამოსაკვლევი ნოვითიერების კონცენტრაცია ნიმუშში არის $2 \cdot 10^{-6}$ მოლი

გრაფიკული დამოკიდებულებები ცხადყოფს, რომ შთანთქმის სპექტრის პიკური მნიშვნელობა პირდაპირპროპორციულ დამოკიდებულებაშია შთანთქმის დონესთან. გრაფიკები გადაღებულია ნიმუშში გამოსაკვლევი ნოვითიერების ფიქსირებული კონცენტრაციისას, მოცემულ შემთხვევაში კუვეტაში მოთავსებული ნიმუშისათვის ის შეადგენს $2 \cdot 10^{-6}$ მოლს. ნახ.1.2 მთლიანობაში აჩვენებს, რომ ნიმუშში გამოსაკვლევი

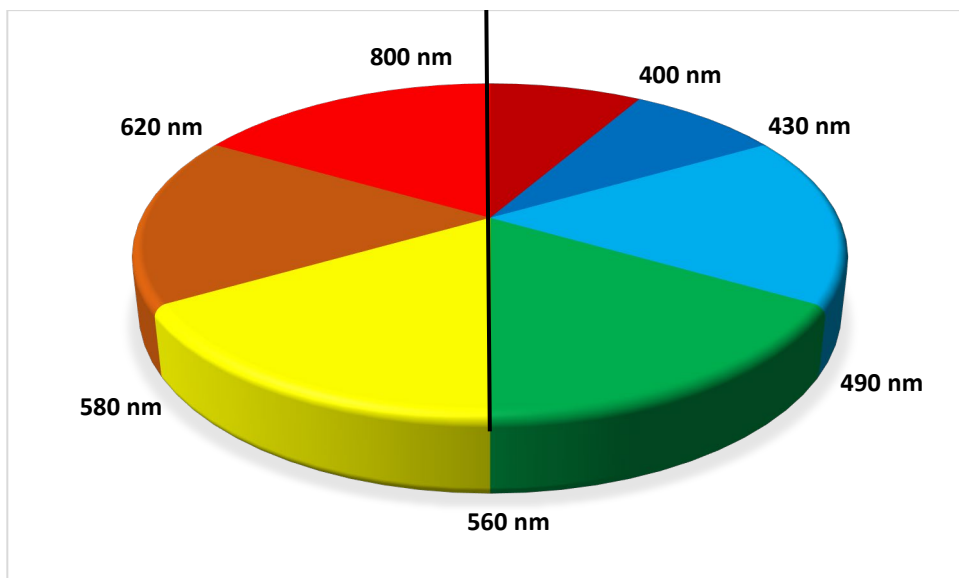
ნივთიერების გამოძახილი მაქსიმალურია გარკვეულ ტალღის სიგრძეზე, რომელსაც მოცემულ შემთხვევაში შეესაბამება ლურჯი ტალღა 448 ნმ ტალღის სიგრძით.

§ 1.2. ულტრაიისფერი და ხილული სინათლის შთანთქმის სპექტრები

გარკვეულ ნაერთებს შორის გვაქვს აშკარა სხვაობა, რაც მათ ფერთან არის დაკავშირებული. მაგალითად, ქინონი (quinone) ყვითელია; ქლოროფილი (chlorophyll) მწვანეა; ალდეჰიდების (aldehydes) და კეტონების (ketones) 2,4-დინიტროფენილჰიდრაზონის წარმოებულები ფერებში მერყეობს ღია ყვითელიდან ღრმა წითლამდე, რაც დამოკიდებულია ორმაგი ელექტრონული კავშირის შეუღლებაზე. ასპირინი (aspirin) უფეროა. ადამიანის თვალი ფუნქციონირებს როგორც სპექტრომეტრი, რომელიც ანალიზებს შუქს, რომელიც აირეკლება მყარი ნივთიერების ზედაპირიდან ან მიიღება სითხეში გავრცელების შემდეგ. მიუხედავად იმისა, რომ ჩვენ ვხედავთ მზის შუქს (ან თეთრ შუქს) როგორც ერთგვაროვან ფერს, ის სინამდვილეში შედგება გამოსხივების ტალღების სიგრძის ფართო სპექტრისგან და მოიცავს სპექტრის ულტრაიისფერი (UV), ხილულ და ინფრაწითელ (IR) დიაპაზონებს. როგორც ცნობილია, ხილული სინათლე შეიძლება ფერებად დაიშალოს პრიზმაში გატარებისას. ხილული ტალღის სიგრძე ფარავს დიაპაზონს დაახლოებით 400-დან 800 ნმ-მდე. ყველაზე გრძელი ხილული ტალღის სიგრძე წითელია და ყველაზე მოკლე იისფერი.

სპექტრის ფერები, ტალღის სიგრძის კლების მიხედვით შეიძლება დავალაგოთ: **იისფერი (Violet):** 400 - 420 ნმ, **ინდიგო (Indigo):** 420 - 440 ნმ, **ლურჯი (Blue):** 440 - 490 ნმ, **მწვანე (Green):** 490 - 570 ნმ, **ყვითელი (Yellow):** 570 - 585 ნმ, **ნარინჯისფერი (Orange):** 585 - 620 ნმ, **წითელი (Red):** 620 - 780 ნმ. ხშირად ამ თანმიმდევრობის დამახსოვრებისათვის მიმართავენ აბრევიატურას: ROY G BIV.

როდესაც თეთრი სინათლე გადის ან აირეკლება ფერად ნივთიერებას, სინათლის კონკრეტული ტალღის სიგრძის ნაწილი შთანთქმდება, ხოლო ნაწილი ე.წ. „დარჩენილი შუქი“ მიიღებს დამატებით ფერს (იხ. ნახ.2.1).

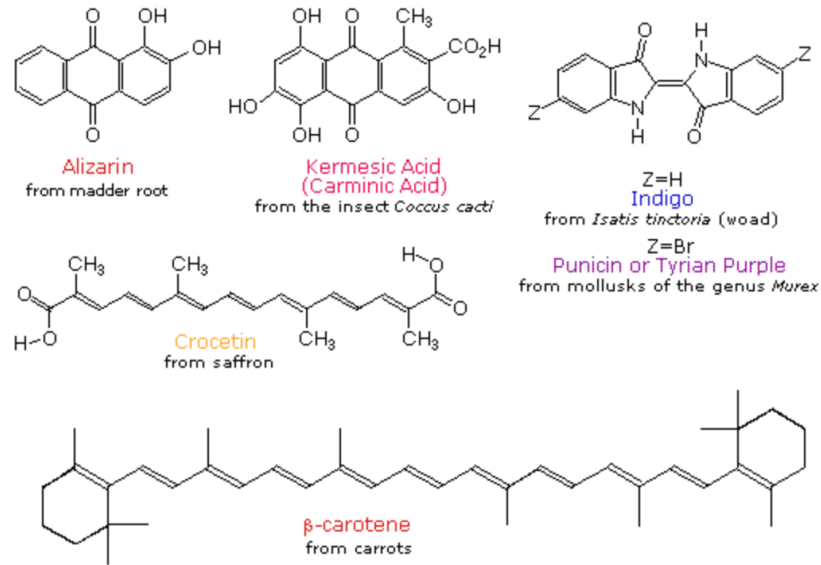


ნახ.2.1. ნიმუშზე დაცემული მონოქრომატური სინათლისა ფერის და „დარჩენილი“ შუქის ე.წ. დამატებითი ფერების განლაგება³

ნახ.2.1-დან ჩანს, რომ დამატებითი ფერები ერთმანეთის დიამეტრალურად საპირისპიროა. ამრიგად, 420-430 ნმ ტალღის სიგრძის სინათლის შთანთქმა ნივთიერებას ყვითელ ფერს ანიჭებს, ხოლო 500-520 ნმ ტალღის სიგრძის სინათლის შთანთქმა მას წითელს ხდის. მწვანე უნიკალურია იმით, რომ ის შეიძლება მივიღოთ 400 ნმ-ის და 800 ნმ-ს მახლობელი ტალღის სიგრძეების მქონე სინათლის შთანთქმით.

ადრეული ადამიანები აფასებდნენ ფერად პიგმენტებს და იყენებდნენ მათ დეკორატიული მიზნებისთვის. ბევრი მათგანი იყო არაორგანული მინერალები, მაგრამ ასევე ცნობილი იყო რამდენიმე მნიშვნელოვანი ორგანული საღებავი. მათ შორის იყო ჟოლოსფერი პიგმენტი, კერმეზინის მჟავა (kermesic acid), ლურჯი საღებავი, ინდიგო და ყვითელი ზაფრანის პიგმენტი, კროცეტინი (crocetin). იშვიათი დიბრომო-ინდიგო წარმოებული, პუნიცინი (punicin), გამოიყენებოდა სამეფო და მდიდრების სამოსის შესაღებად. ღრმა ნარინჯისფერი ნახშირწყალბადის კაროტინი (carotene) ფართოდ არის გავრცელებული მცენარეებში, მაგრამ არ არის საკმარისად სტაბილური მუდმივი პიგმენტად გამოსაყენებლად, გარდა საკვების შეღებვისა. ყველა ამ ფერადი ნაერთების საერთო მახასიათებელი არის ფართოდ შეუღლებული π -ელექტრონების სისტემა (იხ. ნახ.2.2).

³ <https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/spectrpy/uv-vis/spectrum.htm>



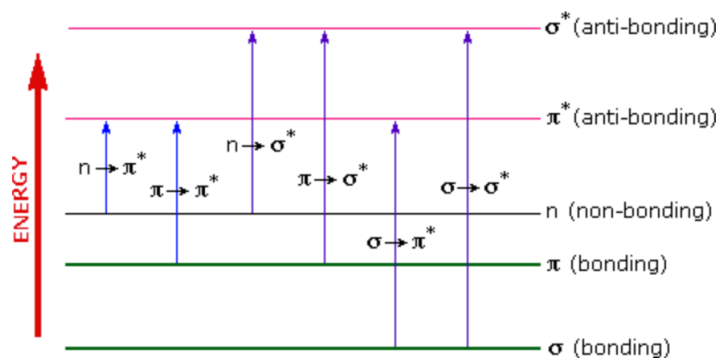
ნახ.2.2. ზოგიერთი ნატურალური ორგანული პიგმენტები⁴

იმის გასაგებად, თუ რატომ არის ზოგიერთი ნაერთი ფერადი, ხოლო ზოგი არა საჭიროა განვსაზღვროთ ელექტრონული შეუღლებების კავშირი ფერთან. უნდა გავაკეთოთ სინათლის შთანთქმის ზუსტი გაზომვები სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე სპექტრის ხილულ ნაწილში და მის მახლობლად. კომერციული ოპტიკური სპექტრომეტრები ასეთი ექსპერიმენტების ჩატარების საშუალებას იძლევა. მათი საშუალებით მარტივად შეიძლება გამოკვლეული იქნას სპექტრის ულტრაიისფერი და ხილული ნაწილები.

სპექტრის ხილული არე მოიცავს ფოტონების ენერგიას 36-დან 72 კკალ/მოლამდე, ხოლო ახლო ულტრაიისფერი არეში (200 ნმ-მდე), ამ ენერგიის დიაპაზონი იზრდება 143 კკალ/მოლამდე. 200 ნმ-ზე ნაკლები ტალღის სიგრძის ულტრაიისფერი გამოსხივების სპექტრები რთული დასამუშავებელია, ამიტომ ის იშვიათად გამოიყენება ნივთიერების სტრუქტურული ანალიზისთვის.

ზემოთ ნახსენები ენერგიები საკმარისია მოლეკულის ელექტრონის უფრო მაღალი ენერგიის დონეზე გადასაყვანად, სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ აგზნებისთვის. შესაბამისად, ამ არეში შთანთქმის სპექტროსკოპიას ზოგჯერ „ელექტრონულ სპექტროსკოპიას“ უწოდებენ.

⁴ <https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/spectrpy/uv-vis/spectrum.htm>

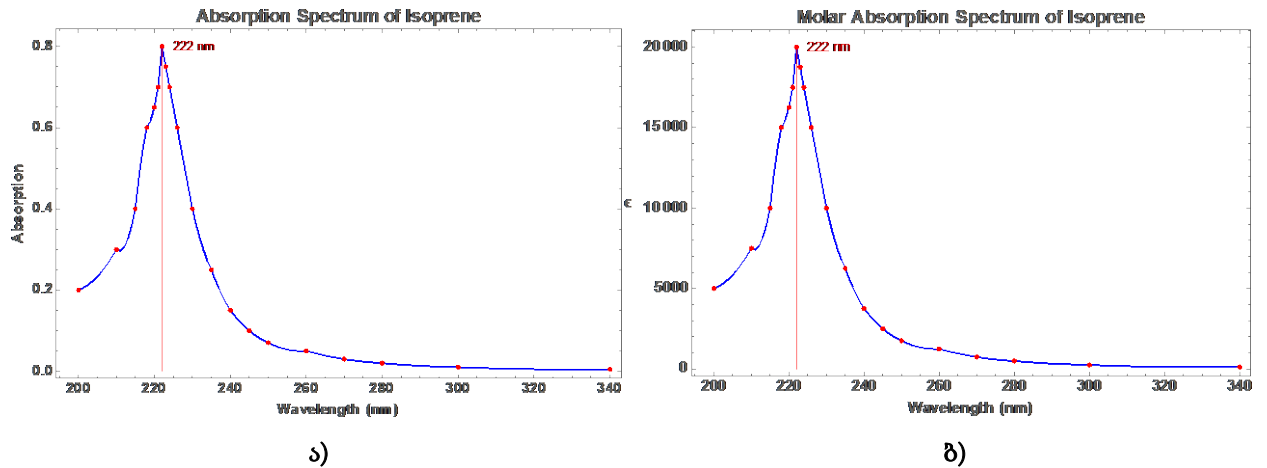


ნახ.2.3. ელექტრონული აგზნების დიაგრამა⁵

ნახ.2.3-ზე წარმოდგენილია ელექტრონული აგზნების დიაგრამა, რომელიც გვიჩვენებს ელექტრონულ აგზნების სახეებს, რომელიც შეიძლება მოხდეს ორგანულ მოლეკულებში. ჩამოთვლილი ექვსი გადასვლიდან მხოლოდ ორი, ყველაზე დაბალი ენერგიის გადასვლა (მარცხნივ ყველაზე, ფერადი ლურჯი) მიიღება 200-800 ნმ ტალღის სიგრძის სპექტრში არსებული ენერგიებით. როგორც წესი, ენერგიულად ხელსაყრელი ელექტრონის პროვოცირება იქნება ყველაზე მაღალი დაკავებული მოლეკულური ორბიტალიდან (HOMO) ყველაზე დაბალი არაკავშირებული მოლეკულური ორბიტალამდე (LUMO), და შედეგად სახეობას უწოდებენ აგზნებულ მდგომარეობას.

როდესაც ნიმუშის მოლეკულები განიცდიან შუქის მოქმედებას, რომელსაც აქვს საკმარისი ენერგია, რომელიც შეესაბამება მოლეკულაში შესაძლო ელექტრონულ გადასვლას, სინათლის ენერგიის ნაწილი შთანთქმდება, რადგან ელექტრონი გადადის უფრო მაღალი ენერგიის ორბიტალში. ოპტიკური სპექტრომეტრი აღრიცხავს ტალღის სიგრძეებს, რომლებშიც ხდება შთანთქმა, თითოეულ ტალღის სიგრძეზე. შედეგად მიღებული სპექტრი წარმოდგენილია შთანთქმის (A) ინტენსივობის ტალღის სიგრძეზე დამოკიდებულების გრაფიკის - სპექტრის, სახით (ნახ.2.4 ა. იზოპერენის შთანთქმის სპექტრი).

⁵ <https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/spectrpy/uv-vis/spectrum.htm>



ნახ.2.4. ა) იზოპრენის შთანთქმის სპექტრი, ბ) იზოპრენის მოლური შთანთქმის სპექტრი

ვინაიდან იზოპრენი უფეროა, ის არ შთანთქავს სპექტრის ხილულ ნაწილს და ამიტომ ეს არე გრაფიკზე არ არის ნაჩვენები. შთანთქმის კოეფიციენტი ჩვეულებრივ მოთავსებულია 0-დან (შთანთქმის გარეშე) 2-მდე (99% შთანთქმა) და ზუსტად განისაზღვრება სპექტრომეტრის მუშაობის კონტექსტში.

იმის გამო, რომ ნიმუშის შთანთქმა იქნება შთანთქმელი მოლეკულების რაოდენობის პროპორციული სპექტრომეტრის სინათლის სხივში (მაგ. მათი მოლარული კონცენტრაცია კუვეტაში მოთავსებულ ნიმუშში), იმ შემთხვევაში თუ სპექტრების განსხვავებულია, აუცილებელია შთანთქმის მნიშვნელობის კორექტირება. შესწორებულ შთანთქმის მნიშვნელობას, როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ უწოდებენ "მოლურ შთანთქმას" და ის მნიშვნელოვანი პარამეტრია სხვადასხვა ნაერთების სპექტრების შედარებისას. მოლური შთანთქმის უნარი განისაზღვრება (1.1.23) ფორმულიდან:

$$\varepsilon = \frac{A}{Cl} \quad (1.2.1)$$

თუ იზოპრენის სპექტრი მიიღება განზავებული ჰექსანის ხსნარიდან ($C = 4 \cdot 10^{-5}$ მოლი/ლიტრზე) 1 სმ ნიმუშის კუვეტში, მარტივი გაანგარიშებით მივიღებთ მოლური შთანთქმის მნიშვნელობას: $\varepsilon = 20000$ ტალღის სიგრძის იმ მნიშვნელობაზე, რომელსაც შთანთქმის სპექტრის მაქსიმუმი შეესაბამება. ამ შემთხვევაში, ვერტიკალური შთანთქმის სკალა შეიძლება შეიცვალოს მოლური შთანთქმის სკალით (ნახ.2.4 ბ).

ცხრილი 2.1-დან ნათელია, რომ ერთადერთი მოლეკულური გადასვლა, რომელიც შთანთქავს შუქს 200-800 ნმ დიაპაზონში არის π -ელექტრონული ფუნქციები და π -ელექტრონული ფუნქციები, რომლებსაც აქვთ არამაკავშირებელი ვალენტური გარსის ელექტრონული წყვილი. სინათლის მშთანთქმელ ასეთ ჯგუფებს ქრომოფორებს უწოდებენ. რამდენიმე მარტივი ქრომოფორისა და მათი სინათლის შთანთქმის მახასიათებლების ჩამონათვალი მოცემულია ცხრილში 2.1. ჟანგბადის არამაკავშირებელი ელექტრონები ალკოჰოლებსა და ეთერებში არ იწვევს შთანთქმას 160 ნმ-ზე ზემოთ. შესაბამისად, სუფთა ალკოჰოლი და ეთერის გამხსნელები შეიძლება გამოყენებულ იქნას სპექტროსკოპიული კვლევებისთვის.

ცხრილი 2.1. მოლეკულური გადასვლები

ქრომოფორი	მაგალითი	აგზნება	λ_{max} , ნმ	ϵ	გამხსნელი
$C = C$	ეთენი	$\pi \rightarrow \pi^*$	171	15,000	ჰექსანი
$C \equiv C$	1-ჰექსინი	$\pi \rightarrow \pi^*$	180	10,000	ჰექსანი
$C = O$	ეთანალი	$n \rightarrow \pi^*$ $\pi \rightarrow \pi^*$	290 180	15 10,000	ჰექსანი ჰექსანი
$N = O$	ნიტრომეთანი	$n \rightarrow \pi^*$ $\pi \rightarrow \pi^*$	275 200	17 5,000	ეთანოლი ეთანოლი
$C - X$ $X = Br$ $X = I$	მეთილის ბრომიდი	$n \rightarrow \sigma^*$ $n \rightarrow \sigma^*$	205 255	200 360	ჰექსანი ჰექსანი

ქრომოფორების არსებობა მოლეკულაში ყველაზე უკეთ დასტურდება ულტრაიისფერი ხილული სპექტროსკოპიით, მაგრამ სპექტროსკოპული დანადგარების უმეტესობა 200 ნმ-ზე დაბალი ტალღის სიგრძისათვის პრაქტიკულად პრობლემატურია იზოლირებული ქრომოფორების აღმოჩენის თვალსაზრისით. საბედნიეროდ, ელექტრონული შეუღლება ზოგადად იწვევს შთანთქმის მაქსიმუმის წანაცვლებას უფრო დიდ ტალღის სიგრძეზე, როგორც იზოპრენის შემთხვევაში, ამიტომ შეუღლება ხდება მთავარი სტრუქტურული მახასიათებელი.

§ 1.3. შთანთქმის ინტენსივობა

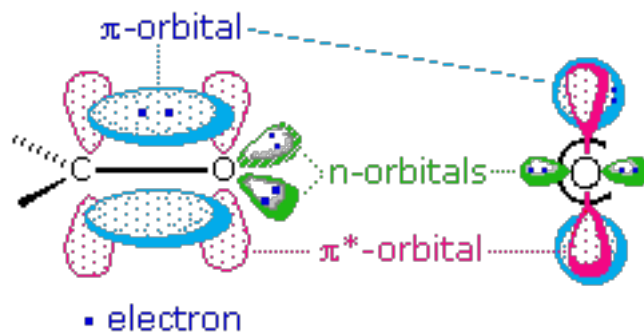
მოლეკულური შთანთქმა შეიძლება იყოს ძალიან დიდი ძლიერად მშთანთქმელი ქრომოფორებისთვის (>10000) და ძალიან მცირე სუსტად მშთანთქმელი

ქრომოფორებისათვის (10-დან 100-მდე). ϵ -ის სიდიდე ასახავს როგორც ქრომოფორის ზომას, ასევე იმის ალბათობას, რომ მოცემული ტალღის სიგრძის სინათლე შთაინთქმება ქრომოფორის მიერ მასზე დაცემისას. ზოგადი განტოლება, რომელიც ასახავს ამ კავშირს, შეიძლება დაიწეროს შემდეგნაირად:

$$\epsilon = 0.87 \cdot 10^{16} PS$$

სადაც P - გადასვლის ალბათობაა, ის მოთავსებულია 0-დან 1-მდე შუალედში, S - ქრომოფორის ფართობია (მ^2 -ში).

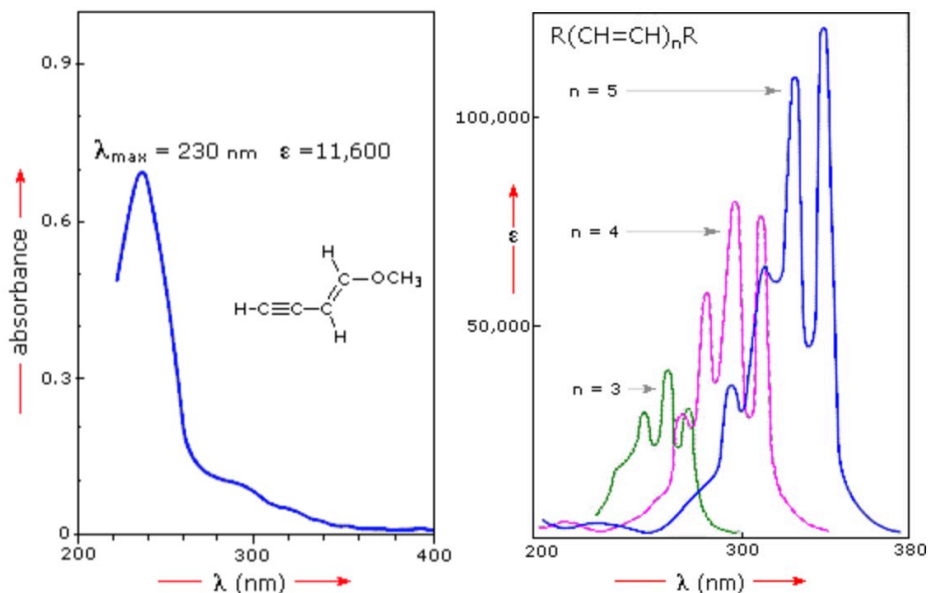
ფაქტორები, რომლებიც გავლენას ახდენენ გადასვლის ალბათობაზე, კომპლექსურია, ამიტომ ხშირად მას ექსპერიმენტატორები მოიხსენიებენ, როგორც "შერჩევის წესებს". ერთ-ერთი ფაქტორი არის ელექტრონულ აგზნებაში ჩართული ორბიტალების გადაფარვა. ეს კარგად არის ილუსტრირებული იზოლირებული კარბონილის ჯგუფის ორი საერთო გადასვლით. $n \rightarrow \pi^*$ გადასვლას აქვს მცირე ენერგია ($\lambda_{max} = 290$ ნმ), ვიდრე $\pi \rightarrow \pi^*$ გადასვლას ($\lambda_{max} = 180$ ნმ), მაგრამ პირველის ϵ ამ უკანასკნელზე ათასჯერ მცირეა. ამ ორბიტალების სივრცითი განაწილება გვაძლევს ინფორმაციას თუ რატომ არის ეს ასე. n -ორბიტალები საერთოდ არ ემთხვევა π^* ორბიტალს, ამიტომ ამ აგზნების ალბათობა მცირეა. მეორეს მხრივ, $\pi \rightarrow \pi^*$ გადასვლა მოიცავს ორბიტალებს, რომლებსაც აქვთ მნიშვნელოვანი გადაფარვა და ალბათობა 1.0-თან ახლოსაა (ნახ.3.1).



ნახ.3.1. კარბონილის ორი იზოლირებული ჯგუფის ორბიტალების სივრცითი განაწილება

§ 1.4. შეუღლება

პენტენის შთანთქმის სპექტრის შედარება, $\lambda_{max} = 178$ ნმ, იზოპრენტან (ნახ.4.1) ნათლად აჩვენებს ქრომოფორის შეუღლების მნიშვნელობას.



ნახ.4.1. შთანთქმის სპექტრის წანაცვლება

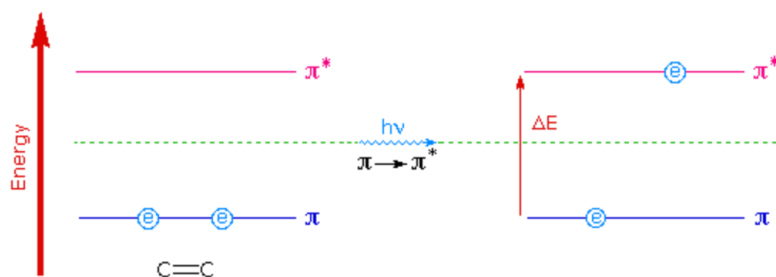
ნახ.4.1 ა) სპექტრი გვიჩვენებს, რომ ორმაგი და სამმაგი ბმების შეუღლება ასევე წანაცვლებს შთანთქმის მაქსიმუმს უფრო დიდ ტალღის სიგრძეზე. ნახ.4.1 ბ)-ზე გამოსახული პოლიენის სპექტრებიდან ცხადია, რომ ყოველი დამატებითი ორმაგი ბმა შეუღლებული π -ელექტრონის სისტემაში ცვლის შთანთქმის მაქსიმუმს დაახლოებით 30 ნმ-ით იმავე მიმართულებით. ასევე, მოლური შთანთქმა (ϵ) უხეშად ორმაგდება ყოველი ახალი შეუღლებული ორმაგი ბმით. სპექტროსკოპები იყენებენ ტერმინებს, რომელიც წარმოდგენილია ცხრილი 4.1-ში. ამრიგად, გაფართოებული შეუღლება ზოგადად იწვევს შთანთქმის ბათოქრომულ და ჰიპერქრომულ ცვლილებებს.

ცხრილი 4.1. შთანთქმის წანაცვლების ტერმინოლოგია

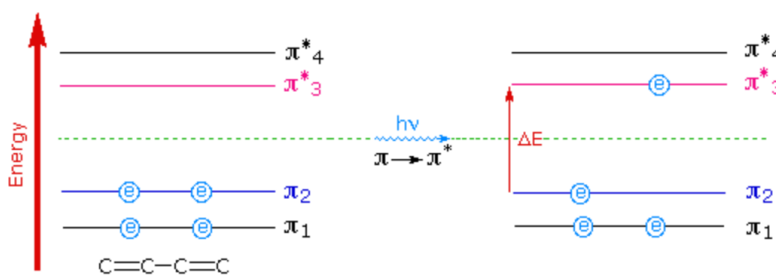
წანაცვლების სახე	ტერმინის განმარტება
უფრო გრძელი ტალღისაკენ	ბათოქრომული
უფრო მოკლე ტალღისაკენ	ჰიპსოქრომული
უფრო დიდი შთანთქმისაკენ	ჰიპერქრომული
უფრო მცირე შთანთქმისაკენ	ჰიპოქრომული

მოცემული ქრომოფორისთვის რამდენიმე შთანთქმის პიკის არსებობა, რაც იხსნება ძლიერ შეუღლებული სისტემებით, აგრეთვე გამხსნელი ნივთიერების თვისებებით. ეს სტრუქტურა ასახავს არა მხოლოდ იმ განსხვავებულ კონფორმაციებს, რომლებიც ასეთმა სისტემებმა შეიძლება მიიღონ, არამედ ასევე ელექტრონულ გადასვლებს ვიბრაციული ენერჯის სხვადასხვა დონეებს შორის, რომლებიც შესაძლებელია თითოეული ელექტრონული მდგომარეობისთვის. ამ ტიპის ვიბრაციული სტრუქტურა ყველაზე გამოხატულია ორთქლის ფაზის სპექტრებში და სულ უფრო ფართოვდება და ბუნდოვანია ხსნარში, რადგან გამხსნელი იცვლება ჰექსანიდან მეთანოლში.

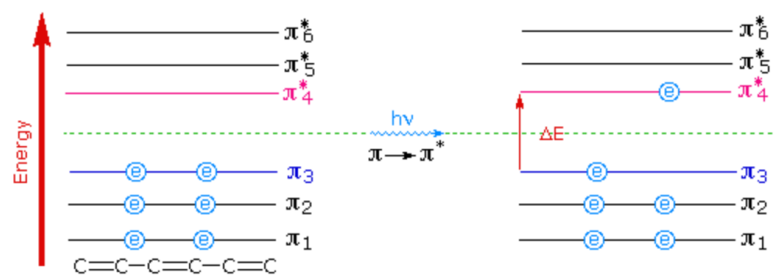
იმის გასაგებად, თუ რატომ უნდა გამოიწვიოს შეუღლებამ ქრომოფორების შთანთქმის მაქსიმუმების ბათოქრომული წანაცვლებები, ჩვენ უნდა გადავხედოთ π -ორბიტალების ფარდობით ენერგეტიკულ დონეებს. როდესაც ორი ორმაგი ბმა არის შეუღლებული, ოთხი p-ატომური ორბიტალი ერთიანდება და წარმოქმნის ოთხ π -მოლეკულურ ორბიტალს (ორი არის შემაკავშირებელი - ბმა და ორი არის განმაკავშირებელი - ანტიბმა). ეს აღწერილია დიენის ქიმიის განყოფილებაში. ანალოგიურად, შეუღლებული ტრიენის სამი ორმაგი ბმა ქმნის ექვს π -მოლეკულურ ორბიტალს, ნახევრად ბმას და ნახევრად ანტიბმას. ენერგიულად ყველაზე ხელსაყრელი $\pi \rightarrow \pi^*$ აგზნება ხდება უმაღლესი ენერგეტიკული შემაკავშირებელი π -ორბიტალიდან (HOMO) უმცირეს ენერგიით შემაკავშირებელ π -ორბიტალამდე (LUMO).



ა)



ბ)



გ)

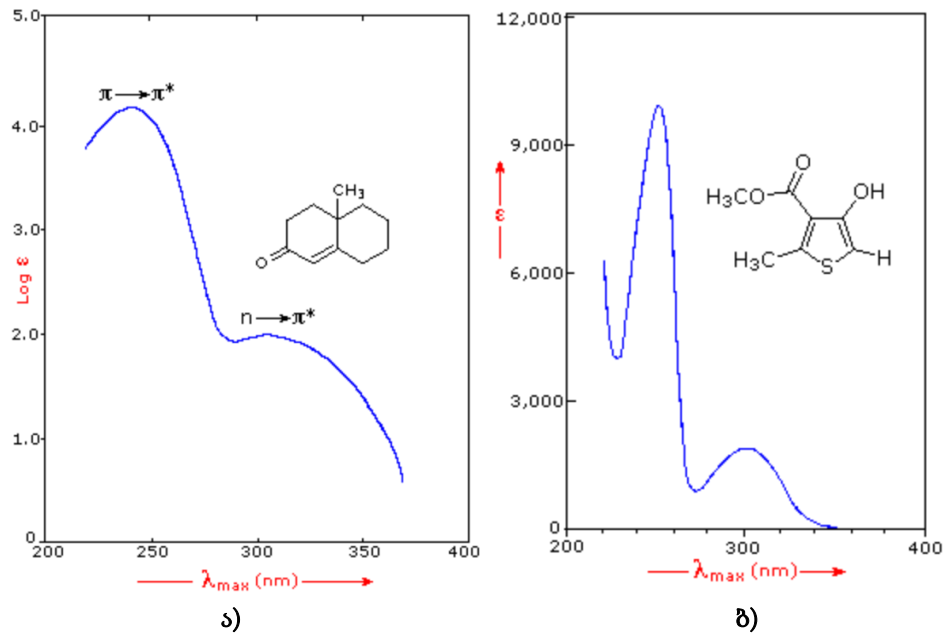
ნახ.4.2. $\pi \rightarrow \pi^*$ აგზნების მაგალითები: ა) მხოლოდ ორი π -ორბიტალისთვის, ბ) ორმაგი ბმის (დიენის) π -ორბიტალისთვის, გ) სამმაგი ბმის (ტრიენის) π -ორბიტალისთვის

ნახ.4.2 ა) ასახავს აგზნებას იზოლირებული ორმაგი ბმისთვის (მხოლოდ ორი π -ორბიტალისთვის). ნახ.4.2 ბ) და გ) შეესაბამება კონიუგირებულ დიენის და ტრიენის. თითოეულ შემთხვევაში, HOMO შედგება ლურჯი, ხოლო LUMO შედგება იისფერი ფერით. მაღალი კონიუგაცია აახლოებს HOMO და LUMO ორბიტალებს ერთმანეთთან. ენერგია (ΔE), რომელიც საჭიროა ელექტრონის პროვოცირების განსახორციელებლად, შესაბამისად ნაკლებია და ტალღის სიგრძე, რომელიც უზრუნველყოფს ამ ენერგიას, იზრდება რადგან:

$$\lambda = h \frac{c}{\Delta E}$$

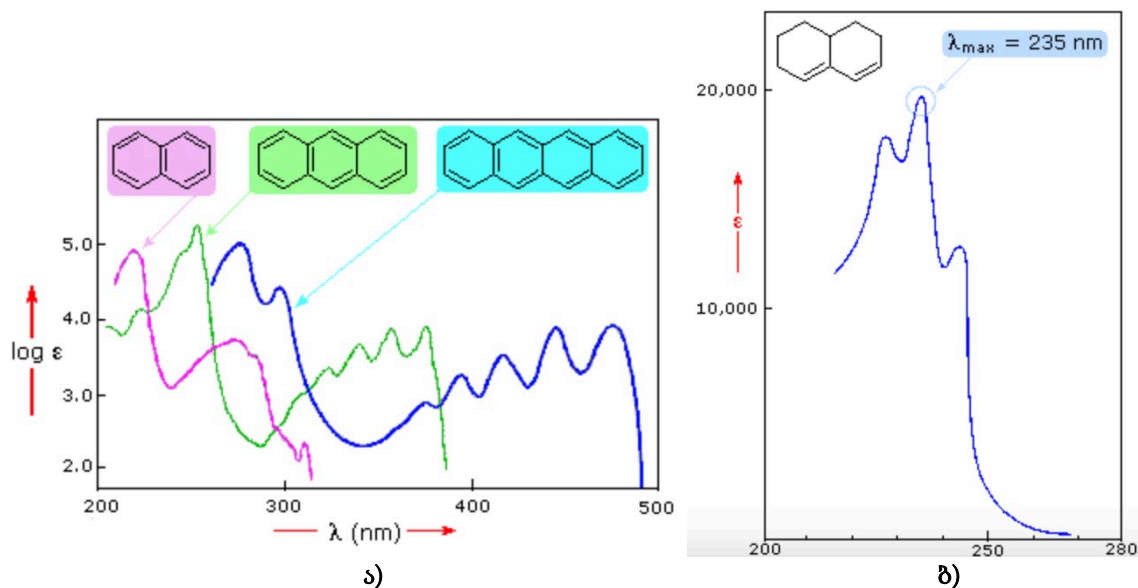
მრავალი სხვა სახის შეუღლებული π -ელექტრონული სისტემა მოქმედებს როგორც ქრომოფორი და შთანთქავს სინათლეს 200-დან 800 ნმ-მდე რეგიონში. მათ

შორისაა გაუჯერებელი ალდეჰიდები და კეტონები და არომატული რგოლის ნაერთები. რამდენიმე მაგალითი ნაჩვენებია ნახ.3.3-ზე. გაუჯერებელი კეტონის სპექტრი ნახ.4.3 ა) გვიჩვენებს მოლური შთანთქმის უნარის ლოგარითმულ მასშტაბში წარმოდგენის უპირატესობას. ნახ.4.3 ბ)-დან ჩანს, რომ $\pi \rightarrow \pi^*$ შთანთქმა, რომელიც მდებარეობს 242 ნმ-ზე, ძალიან ძლიერია, $\epsilon = 18000$. სუსტ $n \rightarrow \pi^*$ შთანთქმას 300 ნმ-თან ახლოს აქვს $\epsilon = 100$.



ნახ.4.3. მოლური შთანთქმის უნარი

ბენზოლი ავლენს სინათლის ძალიან ძლიერ შთანთქმას 180 ნმ-ზე ($\epsilon > 65,000$), სუსტი შთანთქმა 200 ნმ-ზე ($\epsilon = 8,000$) და გაცილებით სუსტი შთანქმის ზოლების ჯგუფს ვლენობით 254 ნმ ($\epsilon = 240$). ნაფთალინში, ანტრაცენსა და ტეტრაცენში დამატებული შეუღლება იწვევს ამ შთანთქმის ზოლების ბათოქრომულ წანაცვლებებს, როგორც ეს ნაჩვენებია ნახ.4.4 ა)-ზე. ყველა შთანთქმა არ იცვლება ერთნაირი რაოდენობით, ასე რომ ანტრაცენისთვის, რომელიც წარმოდგენილია მწვანე გრაფიკით და ტეტრაცენისთვის, რომელიც წამოდგენილია ლურჯი გრაფიკით სუსტი შთანთქმა ივარება უფრო ძლიერი ზოლებით, რომლებმაც განიცადეს უფრო დიდი წითელი წანაცვლება. როგორც მოსალოდნელი იყო, ნაფტალინი და ანტრაცენი უფეროა, მაგრამ ტეტრაცენი ნარინჯისფერია.



ნახ.4.4. ა) ნაფტალინის, ანტრაცენის და ტეტრაცენის სპექტრები, ბ) ბიციკლური დიენის სპექტრი [52]

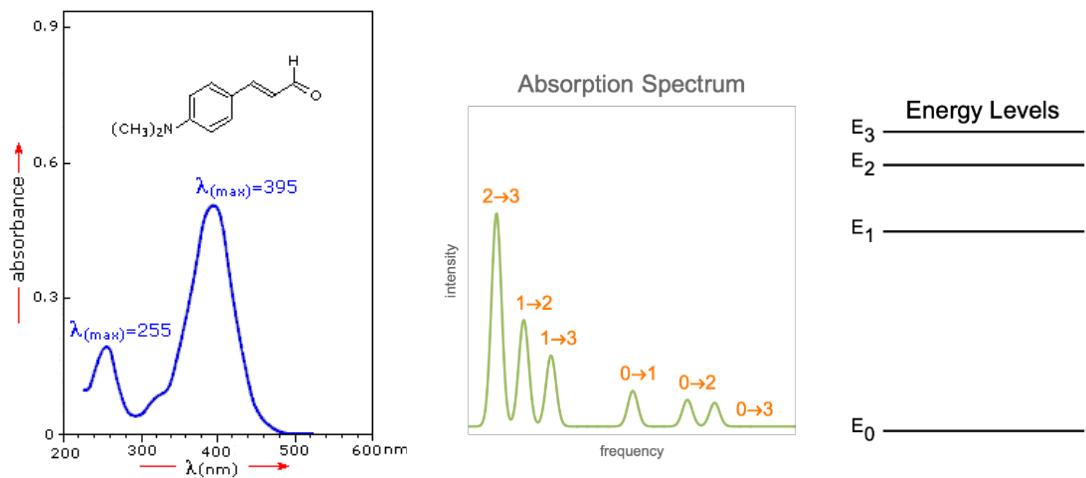
ნახ.4.4 ბ)-ზე ნაჩვენებია ბიციკლური დიენის სპექტრი, რომელიც გვიჩვენებს ვიბრაციულ წვრილ სტრუქტურას, მაგრამ ზოგადად გარეგნულად მსგავსია ზემოთ ნაჩვენები იზოპრენის. უფრო მჭიდრო დათვალიერება ცხადყოფს, რომ უფრო მაღალშეცვლილი დიენის შთანთქმის მაქსიმუმი გადავიდა უფრო დიდ ტალღის სიგრძეზე დაახლოებით 15 ნმ. ეს „შემცვლელი ეფექტი“ ზოგადია დიენებისა და ტრიენებისთვის და კიდევ უფრო გამოხატულია ენონის ქრომოფორებისთვის.

§ 1.5. სიგნალის მიღვის სიჩქარის გაზომვის მეთოდები

ტიპიური სპექტრომეტრის დიაგრამა მარტივია. ხილული და/ან ულტრაიისფერი სინათლის წყაროდან (წითელი ფერის) სინათლის სხივი გამოყოფილია მის კომპონენტურ ტალღის სიგრძეებად პრიზმით ან დიფრაქციული მესერით. თითოეული მონოქრომატული (ერთი ტალღის სიგრძის) სხივი თავის მხრივ იყოფა ორ თანაბარი ინტენსივობის სხივად ნახევრად სარკისებური მოწყობილობით. ერთი სხივი, გადის გამოსაკვლევ ნიმუშში. ნიმუში მოთავსებულია გამჭვირვალე კონტეინერში (კუვეტაში). ნიმუში შეიცავს შესასწავლი ნაერთის ხსნარს გამხსნელში. მეორე სხივი, მიემართება ანალოგურ კუვეტაში, რომელიც შეიცავს მხოლოდ გამხსნელს (ეტალონი). შემდეგ ამ სინათლის სხივების ინტენსივობა იზომება ელექტრონული დეტექტორებით და შედარდება ერთმანეთს.

ეტალონიდან გამოსული სხივის ინტენსივობა აღვნიშნოთ I_0 -ით. ეტალონში მცირე ან საერთოდ არ უნდა იყოს სინათლის შთანთქმა. ნიმუშიდან გამოსული სხივის ინტენსივობა ავლნიშნოთ I . მოკლე პერიოდის განმავლობაში სპექტრომეტრი ავტომატურად ასკანერებს ყველა კომპონენტის ტალღის სიგრძეს აღწერილი წესით.

თუ ნიმუშის ნაერთი არ შთანთქავს მოცემული ტალღის სიგრძის სინათლეს, მაშინ: $I = I_0$. მაგრამ, როგორც წესი, ნაერთი შთანთქავს სინათლეს, მაშინ I არის I_0 -ზე ნაკლები. ეს განსხვავება შეიძლება გამოსახული იყოს გრაფიკზე ტალღის სიგრძის მიმართ. მაგალითად ნახ.5.1-ზე წარმოდგენილია ერთ-ერთი ასეთი ნიმუშის სპექტრი.



ნახ.5.1. ა) გაუჯერებელი ალდეჰიდის ხსნარი 95%-იან ეთანოლში⁶, ბ) შთანთქმის პიკების განაწილება სიხშირის მიხედვით ენერგეტიკულ დონეებს შორის გადასვლისას

შთანთქმა შეიძლება წარმოდგენილი იყოს როგორც გამტარობა ($T = I/I_0$) ან შთანთქმა ($A = \log I_0/I$). თუ შთანთქმას ადგილი არ აქვს, მაშინ $T = 1.0$ და $A = 0$. სპექტრომეტრების უმეტესობაში შთანთქმა აისახება ვერტიკალურ ღერძზე და ჩვეულებრივ დაკვირვების დიაპაზონი არის 0-დან (100% გამტარობა) 2-მდე (1% გამტარობა). მაქსიმალური შთანთქმის ტალღის სიგრძე არის დამახასიათებელი მნიშვნელობა, რომელიც მითითებულია როგორც λ_{max} .

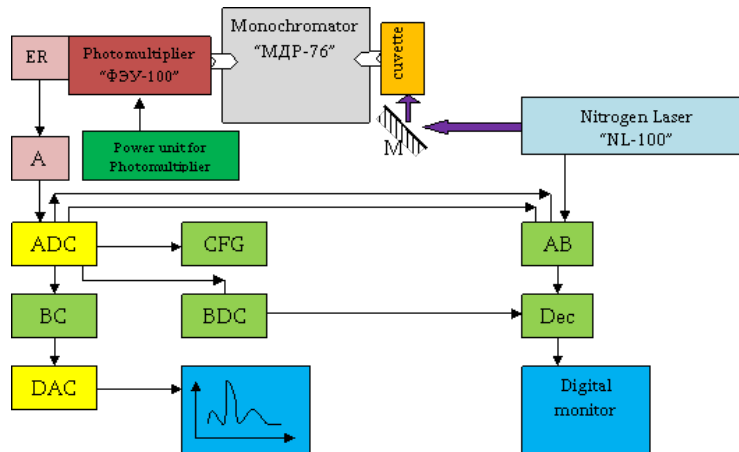
სხვადასხვა ნაერთს შეიძლება ჰქონდეს ძალიან განსხვავებული შთანთქმის მაქსიმუმი და შთანთქმა. ინტენსიურად შთანთქმელი ნაერთები უნდა შემოწმდეს გამხსნელ ხსნარში, რათა დეტექტორმა მიიღოს საკმარისი სინათლის ენერგია, როსთვისაც იყენებენ სრულიად გამჭვირვალე (არაშთანთქმელი) გამხსნელებს,

⁶ <https://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/spectrpy/uv-vis/uvspec.htm>

როგორცაა: წყალი, ეთანოლი, ჰექსანი და ციკლოჰექსანი. გამხსნელებს, რომლებსაც აქვთ ორმაგი ან სამმაგი ბმები, ან მძიმე ატომები (მაგ. S, Br და I) არ გამოიყენებენ, რადგან ნიმუშის შთანთქმა არის მოლური კონცენტრაციის პროპორციული. სხვადასხვა ნაერთის სპექტრების შედარებისათვის, გამოიყენება შთანთქმის კორექტირებული მნიშვნელობა, რომელიც ცნობილია როგორც მოლური შთანთქმა, რომელიც განისაზღვრება (1.2.1) ფორმულით.

ნახ.5.1-ზე მოცემულია 1 სმ კუვეტაში მოთავსებული 0.249 მგ გაუჯერებელი ალდეჰიდის 95%-იან ეთანოლში ($1,42 \cdot 10^{-5}$ მ) ხსნარის სპექტრი. 395 ნმ პიკისთვის, $\epsilon = 36,600$ და 255 ნმ პიკისთვის $\epsilon = 14,000$. გასათვალისწინებელია, რომ შთანთქმა ვრცელდება სპექტრის ხილულ რეგიონში, ამიტომ ნაერთი ნარინჯისფერია.

ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი ამოცანა, რომლის ეფექტურად გადაწყვეტასაც ცდილობენ არის სინათლის ნივნიერებაზე ზემოქმედების შედეგად სიგნალის მილევის სიჩქარის გაზომვა. არსებობს სიგნალის მილევის სიჩქარის გაზომვის ორი პირდაპირი მეთოდი: ფაზური და იმპულსური. შესაბამისად არსებობს ფაზური და იმპულსური სპექტრომეტრები. აღსანიშნავია, რომ იმპულსური სპექტრომეტრები - წარმოადგენს მარტივ ხელსაწყოებს მაგალითად ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობის განსაზღვრისათვის. ნიმუში ნათდება იმპულსური სინათლის წყაროთი. იმპულსის ხანგრძლივობა მცირეა ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობაზე. ფლუორესცენციის მილევა რეგისტრირდება ოსცილოგრაფზე ან ანალოგურ-ციფრული გარდამქმნელებისაგან შემდგარი ელექტრონიკის გავლით პერსონალურ კომპიუტერზე. გაზომვის პრინციპი ანალოგიურია ფოსფოროსცენციისა და შემნელებული ფლუორესცენციის გაზომვის (რამდენიმე მილიწამი სიცოცხლის ხანგრძლივობით) პრინციპისა. თუმცა, რა თქმა უნდა, იმ სიხშირეებზე, რომლებიც შეესაბამება ფლუორესცენციის მილევის კუთხურ სიჩქარეს, შეუძლებელია ტექნიკურად შეიქმნას ამგზნები სინათლის იმპულსები. ამ მიზნით გამოიყენება ორი მეთოდი. ერთ-ერთ მეთოდში ფოტომამრავლი მუშაობს იმპულსურ რეჟიმში, რომლის იმპულსური რეჟიმის დრო მცირეა ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობაზე. იმპულსური წყარო და ფოტომამრავლი ირთვება წამში რამდენიმე ათასი განმეორების სიხშირით, მაგრამ გარკვეული დაყოვნებით. ფლუორესცენციის მრუდების გადაღება



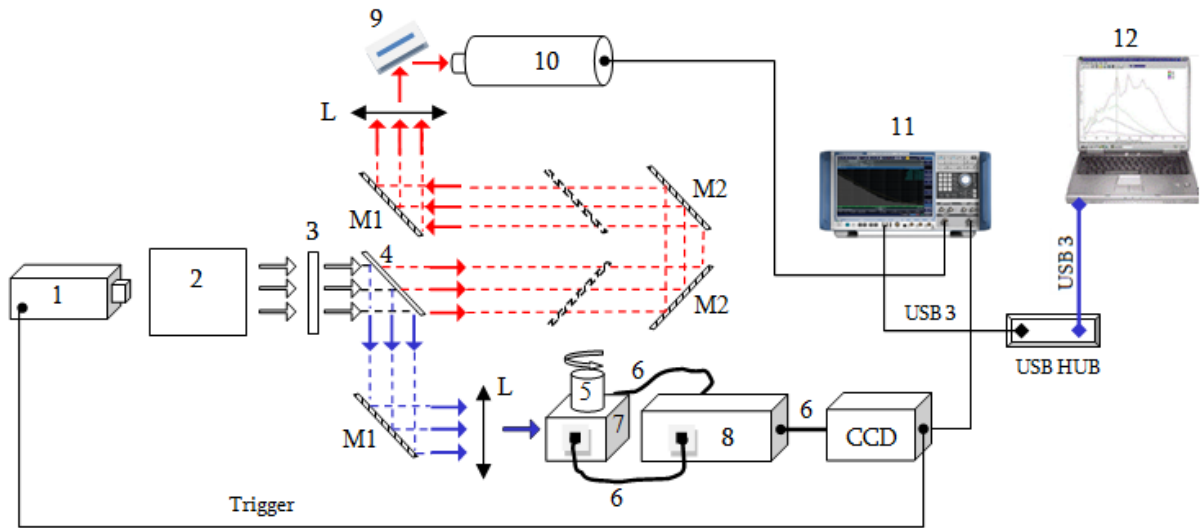
ნახ.5.2. სტრობოსკოპული სპექტროფლორომეტრი მოდერნიზაციის შემდეგ

M – ბრტყელი სარკე; ADC – ანალოგურ ციფრული გარდამქმნელი. DAC – ციფრულ-ანალოგური გარდამქმნელი; ER - გამოსხივების განმმეორებელი; A – გამამძლიერებელი; BC - ორობითი მრიცხველი; BDC - ორობითი დეკადური მრიცხველი; Dec – დეკოდერი; AB – ავტომატური ბლოკი; CFG – სიხშირის დაკალიბრებული გენერატორი

ხორციელდება აგზნებასა და რეგისტრაციას შორის დაყოვნების დროის გაზომვით. ფოტომამრავლიდან მიიღება გაძლიერებული სიგნალი დეტექტორის გავლით, ჩაიწერება როგორც დაყოვნების დროის ფუნქცია. ამ მეთოდის დროს გამოყენებულ სინათლის იმპულსურ წყაროს უნდა ჰქონოდა ფლოუორესცენციის სიგნალის მიღების დროზე ნაკლები იმპულსის ხანგრძლივობა, ამიტომ სინათლის წყაროს სახით მოსახერხებელია გამოყენებული იქნას წყალბადის იმპულსური ნათურები. მეორე მეთოდში ფოტომამრავლი მუშაობს იმპულსურ რეჟიმში და გააჩნია მაღალი მგრძობიარობა. ამ შემთხვევაში, ამგზნები სინათლის იმპულსების სიციცხლის ხანგრძლივობა რამდენჯერმე აღემატება ფლოუორესცენციის სიციცხლის ხანგრძლივობას. ფოტომამრავლის სიგნალი რეგისტრირდება დეტექტორის გავლით და შეიძლება მისი ვიზუალიზაცია. ჩვეულებრივ ინტენსივობის მისაღებად, რომელიც ფოტოგრაფიული გამოსახულების მისაღებად არის საკმარისი, აუცილებელია ამ ოპერაციის განმეორება რამოდენიმე ათასჯერ. ბირკე, კინგი და მურნო იყენებდნენ სტრობირებად ოსცილოგრაფებს და წერდნენ მიღებულ მრუდებს თვითჩამწერზე [10] (ნახ.5.2).

ფაზურ ფლუორიმეტრებში ფლუორესცენციის აგზნება ხდება სინათლის კონით, რომელიც მოდულირებულია მაღალი სიხშირით. ფლუორესცენციის ფაზა, ანუ მოდულაციის ხარისხი შედარდება ამგზნები სინათლის ფაზასთან. დროის მიხედვით ექსპონენციალურად მილევადი ფლუორესცენციის შემთხვევაში, ფლუორესცენციულ გამოსხივებასა და ამგზნები სინათლის ფაზებს შორის ძვრა ψ , განისაზღვრება გამოსახულებით: $\omega\tau = tg\psi$, სადაც τ - ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობაა, ხოლო ω - მოდულაციის კუთხური სიჩქარეა. წყაროდან სიგნალი და ნიმუშზე აგზნებული ფლუორესცენციული სიგნალი ხვდება დეტექტორს, რომელიც არეგისტრირებს ამ სიგნალებს შორის ფაზათა ძვრას. მაგალითად, **ბილი** და **როლეფსონი**, ზომავდნენ ამ ორ სიგნალს შორის ფაზათა ძვრას, შესაბამისად, როცა ორი გამომავალი სიგნალი ემთხვევა ფაზით, დეტექტორი არეგისტრირებდა მინიმალურ სიგნალს გამოსავალზე. არსებობს ψ ფაზათა ძვრის გაზომვის სხვა მეთოდიც, რომელიც დაფუძნებულია ამ ორი სიგნალის მოდულაციის ხარისხის განსაზღვრაზე. ცხადია, რომ რაც უფრო დიდია ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობა, მით უფრო მცირეა მისი მოდულაციის ხარისხი. ამგზნები სინათლის კონაში მოდულაციის ხარისხი (m_s) და ფლუორესცენციული სიგნალის მოდულაციის ხარისხი (m_f) დაკავშირებულია ψ ფაზათა ძვრასთან თანაფარდობით: $\frac{m_f}{m_s} = \cos\psi$. ამ ორი მეთოდით გაზომილი ფაზათა ძვრა ψ , დიდი სიზუსტით ემთხვევა ერთმანეთს ექსპონენციალურად მილევადი ფლუორესცენციის შემთხვევაში. სხვაობა ფიქსირდება, მხოლოდ ფლუორესცენციის არაექსპონენციალური მილევისას. პრინციპში ფაზური ფლუორიმეტრის ერთ-ერთი ძირითადი ნაკლი მდგომარეობს შედეგების ინტეპრეტაციის სირთულეში. რომელიც ფლუორესცენციის არაექსპონენციალური მილევისას წარმოიქმნება, თუმცა **ბირკსმა**, **დაისონმა** და **მანრომ** გამოიყენეს ეს მეთოდი არაექსპონენციალურად მილევადი ფლუორესცენციის შემთხვევაშიც. პირველ ფაზურ ფლუორიმეტრებში სინათლის კონის მოდულაციისათვის გამოყენებული იქნა პოლარიზებული ამგზნები სინათლე და კერის ეფექტი. ამ შემთხვევაში სითხეზე ან კრისტალზე ელექტრონულ-ოპტიკური ეფექტით მოქმედებს მაღალსიხშირული ველი. შემდეგ სინათლის მოდულაციისათვის შეისწავლეს სინათლის დიფრაქცია ულტრაბგერით მდგარ ტალღებზე სითხეში,

რომელსაც წარმოქმნიდა კვარცის კრისტალი. დიფრაქციულ მესერს ეცემა ამგზნები სინათლის კონა მუდმივი ინტენსივობით. მარტივ მეთოდებში გამოიყენება განმუხტვადი მაღალსიხშირული მილი, რომელშიდაც უშუალოდ მიიღება მოდულირებული სინათლე. შედარებით მოხერხებული მეთოდია - გამოყენებული იქნას წყალბადის ნათურა, რომელიც იკვებება მოდულირებული სიგნალით (4.3).



ნახ.5.3 ფაზური ფლუორიმეტრის პრინციპული სქემა. 1- სინათლის წყარო, 2 - ოპტიკური მოდულატორი; 3- ოპტიკური ფილტრი, 4- ნახევრად გამჭვირვალე ფირფიტა (შუქმყოფი); 5 - კუვეტა ნიმუშით მუდმივი სიჩქარით ბრუნვის შესაძლებლობით; 6 - ოპტიკურ-ბოჭკოვანი შუქსატარები; 7 - კიუვეტას დამჭერი; 8 - კორელატორი; 9 - გამზნევი ფირფიტა; 10 - ფოტომამრავლი; 11 - ფაზომეტრი; 12 - კომპიუტერი; M1 - უძრავი სარკე; M2 - მოძრავი სარკე; L - შემკრები ლინზა; CCD - დეტექტორი [20, 33, 34-38, 61]

ამრიგად, ფაზური ფლუორიმეტრი საშუალებას იძლევა განვსაზღვროთ ცნობილი მოდულაციის მქონე საყრდენი სიგნალის ფაზური ეკრანის გავლით მიღებული სიგნალის ნათების ხანგრძლივობა. წყაროს პოლარიზაციის ცოდნა მნიშვნელოვანია ფაზური ეკრანის გაზომვის კანონზომირებების (სიბლანტე, ტემპერატურა, სტრუქტურა) განსაზღვრის კუთხით.

ჩვენს მიერ შემოთავაზებული მეთოდით ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობა შეიძლება განსაზღვრული იქნას ირიბად, ფლუორესცენციის ჩაქრობის ცდები. პირველად ეს მეთოდიკა შემოთავაზებული იქნა ეიზენტალის [27] მიერ,

რომელმაც აღწერა ფლუორესცენციული გამოსხივების (10^{-11} წმ) გაზომვის ირიბი მეთოდიკა.

პოლარიზებული ლაზერული სინათლის იმპულსი გაორმაგებული სიხშირით, ნაწილობრივ შთაინთქმება ნიმუშის მიერ, შთანქმული სინათლე სპეციალური ამრეკლი ფირფიტიდან კვლავ ბრუნდება ნიმუშში, მაგრამ უკვე შეცვლილი პოლარიზაციით და გარკვეული დაყოვნებით. დაყოვნების დრო განისაზღვრება ნიმუშსა და ამრეკლ ფირფიტას შორის მანძილით. ექსპერიმენტში იზომება ნიმუშიდან არეკვლილი იმპულსის ანიზოტროპიის დამოკიდებულება დაყოვნების დროზე. ანიზოტროპიის გაქრობის სიჩქარე მცირე სიბლანტის ხსნარებში იზომება მოლეკულების ბრუნვის მიხედვით, ხოლო ბლანტ ხსნარებში აგზნებული მდგომარეობის სიცოცხლის ხანგრძლივობით.

სიგნალის წყაროს ხარისხი არის ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი პარამეტრი, მათ შორის მოწინავე რადიოლოკაციურ სისტემებში. რაც უფრო მცირეა ფაზური ხმაური, მით უფრო დიდია სივრცითი გარჩევისუნარიანობა და მით უფრო ზუსტია გაზომვის შედეგები, მათ შორის მოძრავი და ტურბულენტური ობიექტებიდან. იმპულსურ რეჟიმში მომუშავე სიგნალის წყაროს ფაზური ხმაურის გასაზომად, აუცილებელია ამოქმედებული იქნას საკმაოდ რთული სისტემები, რომლებიც მთელი რიგი კომპონენტებისაგან შედგება, როგორცაა ფაზური დეტექტორები, ფურიე ანალიზატორები და საყრდენი სიგნალის მაღალი ხარისხის წყაროები. სიზუსტის უზრუნველსაყოფად, სიგნალის წყაროებს უნდა ჰქონდეს მაღალი ხარისხი. თუ წყაროს საყრდენი სიგნალის მაღალი ხარისხის უზრუნველყოფა ვერ ხორციელდება, მაშინ შესაძლებელია გამოყენებული იქნას კორელაციური თეორია, რომელიც ორი სხვადასხვა წყაროს საყრდენი სიგნალების კორელაციას ეფუძნება. ჩვენს შემთხვევაში ამ ორ წყაროს ვღებულობთ სარდენი სიგნალის კუვეტაში გატარებით. საბაზო სიგნალის მიმართულებიდან 90 გრადუსით, ოპტიკურ-ბოჭკოვანი შუქსატარების გამოყენებით ვღებულობთ ნაწილობრივ კოჰერენტულ ტალღებს. წყაროსა და საკვლევი სისტემის გასაზომი კომპონენტების საკუთარი ხმაურის ჩაქრობა შესაძლოა რეალიზებული იქნას ხმაურის გასაშუალოებით ორ სხვადასხვა გამზომ ტრაქტში. რა თქმა უნდა ეს ყველაფერი ართულებს გამზომ სისტემას, მაგრამ საშუალებას იძლევა

მივალწიოთ მნიშვნელოვან გაუმჯობესებას დეტექტირებული სიგნალის მგრძობიარობის გაზრდის თვალსაზრისით. ურთიერთკორელაციური თეორიის გამოყენებით მგრძობიარობის გაზრდა ფაზური ხმაურისადმი შეიძლება გამოვსახოთ გამოსახულებით: $\Delta L = 5 \log(n)$, სადაც, n - კორელაციათა რაოდენობაა. მაგალითად, კორელაციის რაოდენობის გასაშუალოებული ნაზრდი 10-ჯერ, გამზომ სისტემებში ფაზური ხმაურის შემცირებას უზრუნველყოფს 5დბ-ით. ამასთან, ფაზური ხმაური არის საყრდენი პარამეტრი არამხოლოდ რადიოლოკაციური გამოყენების კუთხით, არამედ ამოცანებისათვის, რომლებიც ითვალისწინებს განსაკუთრებით ზუსტ გაზომვებს. ტექნოლოგიაში, ფაზური ხმაურის მაღალი სიზუსტის გაზომვები გამოიყენება მაღალმგრძობიარე გენერატორების პარამეტრების გასაზომად, როგორცაა თერმოსტატული კვარცული გენერატორები, გენერატორები დიელექტრიკული რეზონატორით, სინთეზატორები და სხვა.

დიფრაქციული ოპტიკური ელემენტების სინთეზისას, როგორცაა ფაზის ფილტრები, დიფრაქციული გრატინგები და სხვა ოპტიკური ელემენტები, გამოიყენება ინტეგრაციის მეთოდები. ეს მეთოდები შესაძლებელს ხდიან ვიპოვოთ საუკეთესო დიზაინი და მოვახდინოთ ოპტიმიზაცია დიფრაქციული ელემენტების. ინტეგრაციული მეთოდები გამოიყენება რეკურსიული ალგორითმების სახით, რათა ნელ-ნელა გაიზარდოს მოდელის სიზუსტე. მეორეს მხრივ, ოპტიკური ელემენტების სინთეზის ალგორითმის რეალიზაცია კომპიუტერზე მოითხოვს მნიშვნელოვან გამოთვლით დანახარჯებს. ამ ალგორითმების უარყოფითი მხარე არის ლაზერული კონის განაწილების აღწერისათვის აპროქსიმაციის გამოყენება. პროექტის ფარგლებში იგეგმება ალგორითმის შემუშავება, რომელიც რეალიზებული იქნება ოპტიკურ-ელექტრონულ სქემაზე. ამ ალგორითმის ძირითადი თავისებურება მდგომარეობს იმაში, რომ ის იფუნქციონირებს აპარატურულ დონეზე და მისი საშუალებით შეიძლება ჩვენს ხელთ არსებული მაღალმგრძობიარე აზოტის ლაზერის NL-100 და მონოქრომატორის მართვა. მონოქრომატორი იძლევა სურათს ფურიეს სიბრტყეში. მოცემული სქემა საშუალებას იძლევა გამოყენებული იქნას ლაზერი ინტენსივობის ნებისმიერი საწყისი განაწილებით. ალგორითმი შესაძლებლობას მოგვცემს შერჩეული იქნას ფაზური ფუნქცია ლაზერის ინტენსივობის განაწილებისათვის, რათა

მინიმუმადე დაყვანილი იქნას ცდომილებები გამომავალი სიგნალის დიფრაქციული სურათის ფორმირებისას და მაშასადამე ჩვენ ვვარაუდობთ, რომ მისი გამოყენება რამდენადმე გაზრდის ფაზური სპექტროფლორიმეტრის ფუნქციონირებას.

§ 1.6. BlackCommet დეტექტორის CCD სენსორის მახასიათებლები.

დაწყვილებული მუხტის მოწყობილობები (CCD) შედგება პატარა, სინათლისადმი მგრძობიარე პიქსელებისგან. როდესაც ფოტონები პიქსელებს ხვდება, წარმოქმნიან ელექტრულ მუხტს. ეს მუხტი ინახება პიქსელებში. შემდეგ მუხტები იკითხება პიქსელებიდან და გარდაიქმნება ციფრულ გამოსახულებად.

CCD დეტექტორები ძალიან მგრძობიარეა სინათლის მიმართ და შეუძლიათ მაღალი სიზუსტით გამოავლინონ სინათლის ძალიან დაბალი ინტენსივობაც კი. მათ ასევე აქვთ ფართო დინამიური დიაპაზონი, რაც საშუალებას იძლევა გადაღებული იქნას სურათები ძალიან მაღალი კონტრასტით.

განვიხილოთ CCD სენსორების ძირითადი ფიზიკური მახასიათებლები:

- **კვანტური ეფექტურობა (QE):** ეს არის სენსორი უნარის გარდაქმნას ფოტონები ელექტრონებად. QE ჩვეულებრივ გამოისახება პროცენტებში. იგი დამოკიდებულია სინათლის ტალღის სიგრძეზე, აქტიური ფენის სისქეზე და დეტექტორში გამოყენებული მასალის ტიპზე.
- **სიბნელის დენი:** ეს არის ელექტრონების ნაკადი, რომელიც ხდება სინათლის არარსებობის შემთხვევაში. სიბნელის დენი გამოწვეულია ელექტრონების სითბური ფლუქტუაციებით. ცხადია ტემპერატურის ზრდასთან ერთად სიბნელის დენი უფრო მნიშვნელოვანი ხდება. სიბნელის დენმა შეიძლება გამოიწვიოს სითბური ხმაურის (შემდგომში უბრალოდ ხმაურის) უფრო მაღალი დონე და სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის SNR (Signal-to-Noise Ratio) დაბალი მნიშვნელობა.
- **წაკითხვის ხმაური:** ეს არის ხმაური, რომელიც წარმოიქმნება CCD სენსორიდან ელექტრონების წაკითხვისას. ამოკითხვის ხმაური დამოკიდებულია წაკითხვისთვის გამოყენებულ ელექტრონიკაზე და შეიძლება შემცირდეს სენსორის გაგრილებით.

- **ხვრელების სრული ტევადობა:** ეს არის ელექტრონების მაქსიმალური რაოდენობა, რომელიც შეიძლება შენახული იქნას პიქსელში გაჯერებამდე. ხვრელების სრული გამტარუნარიანობა უკეთეს დინამიურ დიაპაზონს იძლევა და ამცირებს გაჯერების შესაძლებლობას.
- **პიქსელის ზომა:** ეს არის ინდივიდუალური პიქსელების ფიზიკური ზომა CCD სენსორის მასივში. პიქსელის მცირე ზომები იძლევა უფრო მაღალი სივრცითი გარჩევადობის საშუალებას, მაგრამ ამავე დროს, შეიძლება გამოიწვიოს ხმაურის მაღალი დონე.
- **წრფივობა:** ეს არის საზომი იმისა, თუ რამდენად კარგად არის დეტექტორის რეაქცია გამოვლენილი ფოტონების რაოდენობის მიმართ. სრულყოფილად ხაზოვანი დეტექტორის გამოხმაურება პირდაპირპროპორციულია აღმოჩენილი ფოტონების რაოდენობის. არაწრფივობამ შეიძლება გამოიწვიოს გამოსახულების დამახინჯება და გავლენა მოახდინოს გაზომვების სიზუსტეზე.
- **სიკაშკაშე (Blooming):** ეს არის ფენომენი, როდესაც ჭარბი მუხტი გროვდება მეზობელ პიქსელებში, რაც იწვევს სურათზე ნათელ ზოლს ან ჰალოს ეფექტს. სიკაშკაშე შეიძლება მოხდეს, როდესაც სიგნალის სიმძლავრე აღემატება პიქსელების სრულ სიმძლავრეს.

სენსორის ამ პარამეტრებს შეუძლიათ მნიშვნელოვანი გავლენა მოახდინოს CCD დეტექტორის მუშაობაზე, სწორედ ამიტომ კონკრეტულ აპლიკაციაში ყურადღებით უნდა იქნას შერჩეული CCD სენსორი, რომელის მახასიათებლები აპლიკაციის პირობებთან ოპტიმალური იქნება.

CCD-ის მახასიათებლებმა შეიძლება გავლენა მოახდინოს ოპტიკური სიმკვრივის (OD) გაზომვაზე. როგორც აღვნიშნეთ, ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი პარამეტრია CCD-ის კვანტური ეფექტურობა (QE), რომელიც განსაზღვრავს რამდენად ეფექტურად გარდაქმნის დეტექტორი შემომავალ ფოტონებს გაზომვად ელექტრულ სიგნალებად. უმაღლესი QE მნიშვნელობები იწვევს უფრო ძლიერ სიგნალს და OD-ის უფრო ზუსტ გაზომვას. კვანტური ეფექტურობა (QE) განისაზღვრება, როგორც ფოტონების ის ფრაქცია, რომელიც ხვდება დეტექტორზე, რომელიც წარმოქმნის ელექტრონ-ხვრელის

წყვილს. დროის ერთეულზე წარმოქმნილი ელექტრონების რაოდენობა შეიძლება გამოვსახოთ ფორმულით:

$$I = QE \cdot P \cdot S, \quad (1.6.1)$$

I არის დეტექტორის მიერ წარმოებული დენის ძალა, P არის დაცემული სინათლის ოპტიკური სიმძლავრე, S არის დეტექტორის აქტიური არე.

გამომავალი სიგნალის თანაფარდობას შემავალ სიგნალთან გაძლიერება ეწოდება. CCD დეტექტორის გამომავალი სიგნალი პროპორციულია ელექტრონების რაოდენობისა, რომლებიც აკუმულირდება და გადადის წაკითხვის რეესტრში. გაძლიერება შეიძლება გამოიხატოს შემდეგნაირად:

$$G = \frac{N_e}{N_{ph}}. \quad (1.6.2)$$

სადაც N_e არის შეგროვებული ელექტრონების რაოდენობა და N_{ph} პიქსელებზე დაცემული (დაჯახებული) ფოტონების რაოდენობა.

კიდევ ერთი მნიშვნელოვანი პარამეტრია CCD-ის ხმაურის დონე, სიბნელის ხმაურის და წაკითხვის ხმაურის ჩათვლით. სიბნელის ხმაური ეხება სიგნალის შემთხვევით რყევებს, რომლებიც ხდება შემომავალი ფოტონების არარსებობის შემთხვევაში, ხოლო წაკითხვის ხმაური ეხება ხმაურს, რომელიც წარმოიქმნება CCD-დან ელექტრული სიგნალების წაკითხვის პროცესში. ამ ხმაურის წყაროებმა შეიძლება ხელი შეუწყონ OD გაზომვის ცდომილებას. ზოგადად, CCD დეტექტორის ხმაური შეიძლება გამოიხატოს შემდეგნაირად:

$$NOISE = \sqrt{ND + NR + NF}, \quad (1.6.3)$$

სადაც ND - არის სიბნელის ხმაური, NR - არის წაკითხვის ხმაური და NF - არის ხმაური შემომავალი სინათლის რყევის (ფლუქტუაციების) გამო.

სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა (SNR) CCD დეტექტორისათვის შეიძლება ჩაიწეროს გამოსახულებით:

$$SNR = \frac{N_e \cdot G}{\sqrt{ND + NR + NF + N_e \cdot G}}, \quad (1.6.4)$$

სხვა ფაქტორებმა, როგორცაა ინტეგრაციის დრო და სინათლის წყაროს ინტენსივობა, რომელიც გამოიყენება ნიმუშის გასანათებლად, ასევე შეიძლება

გავლენა იქონიოს OD გაზომვის სიზუსტეზე. აქედან გამომდინარე, მნიშვნელოვანია ყველა შესაბამისი პარამეტრის გათვალისწინება და ექსპერიმენტული პირობების ოპტიმიზაცია, რათა მივიღოთ ყველაზე ზუსტი OD გაზომვა.

ამ ფორმულების კომბინაციით, ჩვენ შეგვიძლია დავაკავშიროთ CCD დეტექტორის ფიზიკური პარამეტრები ნიმუშის OD-თან. მაგალითად, ჩვენ შეგვიძლია გამოვიყენოთ QE, გაძლიერება და ხმაური დეტექტორის SNR-ის გამოსათვლელად, რაც თავის მხრივ შეიძლება გამოვიყენოთ ნიმუშის მინიმალური აღმოჩენილი OD-ის დასადგენად. ალტერნატიულად, ჩვენ შეგვიძლია გამოვიყენოთ OD და სიგნალის გადაცემა ოპტიკური სიმძლავრისა და ხმაურის სიმძლავრის გამოსათვლელად, რომელიც შემდეგ შეიძლება გამოვიყენოთ დეტექტორის QE-ისა და გაძლიერების გამოსათვლელად.

QE არის CCD-ის მიერ წარმოქმნილი ფოტოელექტრონების რაოდენობის თანაფარდობა თითოეული შემხვედრი ფოტონისთვის. ის ჩვეულებრივ გამოხატულია პროცენტულად. კავშირი QE-სა და OD-ს შორის შეიძლება გამოიხატოს შემდეგნაირად:

$$OD = -\log_{10} \left(\frac{QE}{100} \right). \quad (1.6.5)$$

SNR არის სიგნალის დონის თანაფარდობა მთლიან ხმაურთან. კავშირი OD-სა და SNR-ს შორის შეიძლება გამოიხატოს შემდეგნაირად:

$$OD = -\log_{10} (SNR)$$

სადაც SNR მოცემულია შემდეგით:

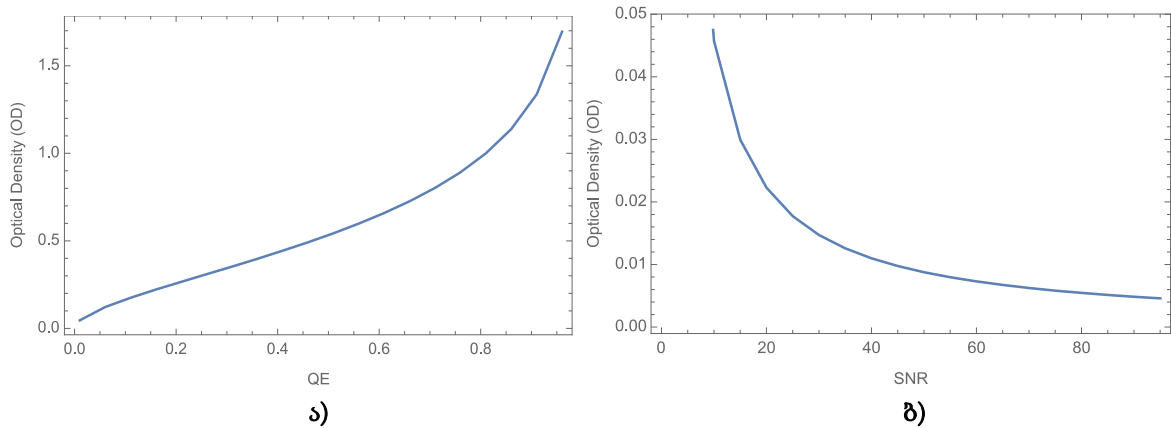
$$SNR = \frac{\text{სიგნალი}}{\text{ხმაური}} = \frac{SIGNAL}{NOISE}. \quad (1.6.6)$$

ეს ფორმულები საშუალებას გვაძლევს გავიგოთ, როგორ მოქმედებს კვანტური ეფექტურობა QE, ხმაური და SNR ცვლილებები CCD დეტექტორის OD-ზე.

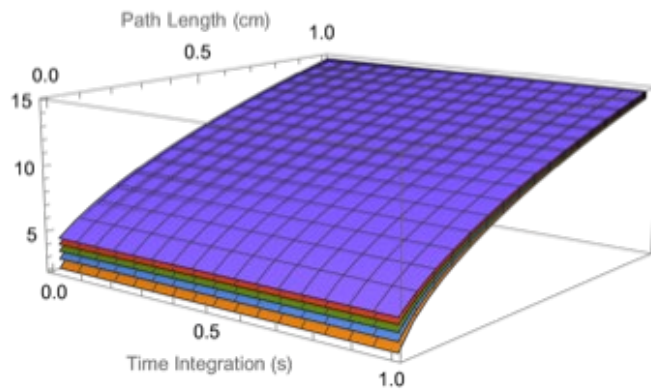
OD-ის ფორმულა QE, SNR და ბილიკის სიგრძის თვალსაზრისით შეიძლება გამოისახოს როგორც:

$$OD = -\log_{10} \left(\frac{\text{სიგნალი} + \text{ხმაური}}{QE \cdot \text{ინტენსივობა} \cdot \text{ბილიკის სიგრძე}} \right), \quad (1.6.7)$$

ინტენსივობა - არის სინათლის წყაროს ინტენსივობა, path_length არის კუვეტის ბილიკის სიგრძე, მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ ცვლადების ერთეულები უნდა იყოს თანმიმდევრული, რომ ფორმულა იყოს მართებული. სიგნალი და ხმაური, როგორც წესი, იზომება რაოდენობაში, ხოლო ინტენსივობა იზომება ვტ/მ²-ში და ბილიკის სიგრძე სმ-ში. QE არის განზომილებიანი რაოდენობა, რომელიც წარმოადგენს CCD მიერ შთანთქმული ფოტონების ნაწილს.



ნახ.6.1. ა) OD-ს დამოკიდებულება QE-ზე, ბ) OD-ს დამოკიდებულება SNR-ზე



ნახ.6.2. SNR სამგანზომილებიანი დამოკიდებულება სხივის ბილიკის სიგრძესა და დეტექტორის ინტეგრაციის დროზე, როცა კონცენტრაციაა: $c = 0.01$ მოლ/ლ, ხოლო მოლური შთანთქმის კოეფიციენტი $\epsilon = 20000$ ლ/(მოლ·სმ)

StellarNet-ის სპექტრომეტრებს გააჩნიათ შემდეგი მახასიათებლები:

- პიქსელის ზომა: დაახლოებით 14-16 მიკრონი;
- პიქსელების რაოდენობა: შეიძლება 100-1000, კონკრეტული მოდელის მიხედვით;
- სპექტრული დიაპაზონი: UV-დან NIR-მდე, კონკრეტული ბადეების მოდელისა და კონფიგურაციის მიხედვით;

- კვანტური ეფექტურობა: დაახლოებით 50-80% ტალღის სიგრძის მიხედვით
- სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა: შეიძლება განსხვავდებოდეს კონკრეტული მოდელისა და სამუშაო პირობების მიხედვით, მაგრამ ჩვეულებრივ ძალიან მაღალია (ხშირად 500:1-ზე მეტი);
- გაგრილების სისტემა: CCD დეტექტორი თერმოელექტრულად გრილდება ხმაურის შესამცირებლად და სტაბილურობის გასაუმჯობესებლად.

მართალია, რომ სპექტროსკოპიაში გამოიყენება CCD სენსორები, რომლებსაც გააჩნიათ უნიკალური უპირატესობა ვიდრე BlackCommet სპექტრომეტრებს, მაგალითად:

- Sony ICX834: ეს არის პოპულარული CCD სენსორია, რომელიც გამოიყენება ბევრ მაღალი ხარისხის სამეცნიერო ფოტოკამერებსა და სპექტროსკოპებში. მას აქვს მაღალი კვანტური ეფექტურობა (QE), 80%-ზე მეტი ხილული ტალღის სიგრძის დიაპაზონში.
- Teledyne e2v CCD231-84: ეს არის მაღალი ხარისხის უკუნათების CCD სენსორი ძალიან დაბალი ხმაურით და შესანიშნავი UV/VIS მგრძობელობით. ამ სენსორებს დიდი ფართობი 28 x 28 მმ, რაც კარგად არის შესაფერისი მაღალი გარჩევადობის სპექტროსკოპისთვის.
- Fairchild Imaging CIS2521F: ეს არის დიდი ფორმატის CCD სენსორი 36 x 24 მმ გამოსახულების ფართობით, რაც მას იდეალურს ხდის აპლიკაციებისთვის, რომლებიც საჭიროებენ ფართო ხედვას. მას აქვს მაღალი QE 70%-ზე მეტი ხილული ტალღის სიგრძის დიაპაზონში და ხმაურის ძალიან დაბალი დონე, რაც მას შესაფერისს ხდის დაბალი სინათლის სპექტროსკოპისთვის.
- Hamamatsu S7031-1006: ეს არის მაღალი სიჩქარის CCD სენსორი, რომელსაც შეუძლია წამში 1000 სპექტრის გადაღება. მას აქვს მაღალი მგრძობელობა ხილულ და ახლო ინფრაწითელ რაიონებში, რაც მას კარგად შეეფერება დროში გადაჭრილი სპექტროსკოპისთვის.

§ 1.7. CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის QE გაუმჯობესება

CCD - სენსორის კვანტური ეფექტურობა (QE) არის საზომი, თუ რამდენად ეფექტურად გარდაქმნის მოწყობილობა შემომავალ ფოტონებს ელექტრულ მუხტად. CCD-სენსორის კვანტური ეფექტურობა გამოითვლება ფორმულით:

$$QE = \frac{\text{წარმოქმნილი ელექტრონების რაოდენობა}}{\text{დაცემული ფოტონის რაოდენობა}}$$

$$QE = \frac{I_e t}{P_m h f} \quad (1.7.1)$$

I_e - არის ფოტოდენი (დენი, რომელიც გამოწვეულია ფოტოგენერირებული ელექტრონების ნაკადით), t - ინტეგრაციის დროა, P_m - დაცემული ფოტონების ოპტიკური სიმძლავრეა, $h = 6.63 \cdot 10^{-34}$ ჯ·წმ - პლანკის მუდმივაა, ხოლო f - დაცემული სინათლის სიხშირეა.

საერთო ჯამში, არსებობს მრავალი შესაძლო გზა სამომავლო კვლევისთვის, რათა გააუმჯობესოს სპექტროსკოპიაში გამოყენებული CCD სენსორების მოქმედება და ამან შეიძლება მნიშვნელოვანი გავლენა იქონიოს სპექტრული გაზომვების მგრძობელობაზე, სტაბილურობასა და სიზუსტეზე.

ჩამოთვლილ პრობლემატიკიდან, განსაკუთრებით უნდა აღვნიშნოთ CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის (QE) გაუმჯობესებისათვის წარმოებული კვლევები. ეს გარემოება მოგვცემს უფრო მაღალ QE და შეიძლება გამოიწვიოს უკეთესი მგრძობელობა და სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა. მაგრამ, იბადება კითხვა, როგორ შეიძლება მივაღწიოთ კვანტური ეფექტურობის (QE) გაუმჯობესებას. აქ მოცემულია რამდენიმე შესაძლო გზა CCD სენსორების QE-ის გასაუმჯობესებლად:

- **სენსორის მასალის გაუმჯობესება:** CCD სენსორის QE განისაზღვრება სენსორული მასალის თვისებებით, როგორცაა მისი ზოლი და შთანთქმის კოეფიციენტი. კვლევა შეიძლება ფოკუსირებული იყოს ახალი სენსორული მასალების შემუშავებაზე, რომლებსაც აქვთ მაღალი QE სპექტრის გარკვეულ ნაწილში. მაგალითად, ზოგიერთმა ბოლოდროინდელმა კვლევამ აჩვენა პეროვსკიტის მასალების, როგორც შთანთქმელი ფენის გამოყენების

პერსპექტივა CCD სენსორებში, რაც საშუალებას იძლევა მივიღოთ უფრო მაღალი QE ხილულ და ახლო IR რეგიონებში.

- **სენსორის დიზაინის ოპტიმიზაცია:** CCD სენსორის დიზაინს ასევე შეუძლია მნიშვნელოვანი გავლენა მოახდინოს მის QE-ზე. კვლევა შეიძლება ფოკუსირებული იყოს სენსორის ფენების სისქის და ლეგირებული კონცენტრაციის ოპტიმიზაციაზე, ასევე ზედაპირის პასივაციაზე და ანტირეფლექსურ საფარებზე, რათა გააუმჯობესოს QE სპექტრის კონკრეტულ ნაწილებში.
- **უკუნათების განხორციელება:** უკუნათების მქონე CCD სენსორებს აქვთ უფრო მაღალი QE უპირატესობა, ვიდრე წინა მხრიდან ნათებას, რადგან მას არ აქვს დამატებითი ნაერთები ფენაზე, რომელიც შთანთქმავს შემომავალ შუქს. კვლევა შეიძლება ფოკუსირებული იყოს ახალი ტექნიკის შემუშავებაზე უკუნათების CCD სენსორებისთვის, როგორცაა გათხელებული ნაერთების ან ტექნოლოგიის მეშვეობით.
- **ზედაპირის რეკომბინაციის შემცირება:** ზედაპირის რეკომბინაცია სენსორის ფენებს შორის ინტერფეისებზე შეიძლება შეამციროს CCD სენსორების QE. კვლევა შეიძლება ფოკუსირებული იყოს ზედაპირის პასივაციის ახალი ტექნიკის ან მუხტის გადაცემის სტრუქტურების შემუშავებაზე, რომლებიც ამცირებს ზედაპირის რეკომბინაციას და აუმჯობესებს QE-ს.

საერთო ჯამში, CCD სენსორების QE-ის გაუმჯობესება არის კვლევის აქტიური სფერო და არსებობს მრავალი შესაძლო სტრატეგია, რომელიც შეიძლება გამოყენებულ იქნას ამ მიზნის მისაღწევად.

თავის მხრივ, სენსორის მასალის გაუმჯობესება არის CCD სენსორის კვანტური ეფექტურობის (QE) გაზრდის ერთ-ერთი გზა. აქ მოცემულია რამდენიმე გზა სენსორის მასალის პოტენციურად გასაუმჯობესებლად:

- **ახალი მატერიალური კომპოზიციების შემუშავება:** მკვლევარებს შეუძლიათ გამოიკვლიონ ახალი მასალების კომპოზიციები, რომლებსაც აქვთ უფრო მაღალი შთანთქმის კოეფიციენტი ან დაბალი ზოლის ენერგია, რადგან ამ თვისებებს შეუძლია გაზარდოს CCD სენსორის QE. მაგალითად, ზოგიერთი კვლევა

ფოკუსირებულია ჰიბრიდული ორგანულ-არაორგანული პეროვსკის მასალების გამოყენებაზე, როგორც შთანთქმის ფენა CCD სენსორებში. ეს მასალები აჩვენებს შესაძლებლობას მივიღოთ მაღალი QE ხილულ და ახლო IR რეგიონებში.

- **კრისტალის ხარისხის გაუმჯობესება:** სენსორის მასალის კრისტალურმა ხარისხმა შეიძლება გავლენა მოახდინოს მის QE-ზე. მკვლევარებს შეუძლიათ იმუშაონ მაღალი ხარისხის კრისტალების ზრდის ტექნიკის შემუშავებაზე, როგორცაა ორთქლის ფაზის ეპიტაქსიის ან მოლეკულური სხივის ეპიტაქსიის გამოყენება, რომელსაც შეუძლია გააუმჯობესოს სენსორის მასალის QE.
- **დეფექტების შემცირება:** სენსორის მასალის დეფექტებმა შეიძლება შეამციროს მისი QE მუხტის მატარებლების რეკომბინაციის ცენტრების შექმნით. მკვლევარებს შეუძლიათ იმუშაონ დეფექტების შემცირების ახალი ტექნიკის შემუშავებაზე, როგორცაა მაღალი ტემპერატურის ანეილირების ან ქიმიური დამუშავების გამოყენება დეფექტების ადგილების გამორიცხვისათვის.
- **სისქის და ლეგირების კონცენტრაციის ოპტიმიზაცია:** სენსორის ფენების სისქე და ლეგირების კონცენტრაციამ შეიძლება გავლენა იქონიოს მათ QE-ზე. მკვლევარებს შეუძლიათ ამ პარამეტრების ოპტიმიზაცია, რათა მიაღწიონ უმაღლესი QE სპექტრის კონკრეტულ ნაწილებს.

მთლიანობაში, სენსორული მასალის გაუმჯობესება პერსპექტიული გზაა CCD სენსორების QE-ის გაზრდისთვის. ბუნებრივია არსებობს მრავალი პოტენციური სტრატეგია, რომელიც მკვლევარებს შეუძლიათ გამოიყენონ ამ მიზნის მისაღწევად.

მაგრამ, ჩვენ კვლევისას ვიფარგლებით იმ შესაძლებლობებით რაც გვაქვს. კერძოდ, ახალი მასალების ტექნიკურად უშუალოდ დამზადების შესაძლებლობა, იმის გამო, რომ არ გვაქვს ასეთ სენსიტიურ ლაბორატორიულ დანადგარებთან წვდომა ბუნებრივია პრობლემატურია, თუმცა არსებობს რამდენიმე ნაბიჯი, რომლის განხორციელებითაც შესაძლებელია ჩვენს ხელთ არსებული სპექტრომეტრული ტექნიკის კვანტური ეფექტურობის (QE) პოტენციურად გაზრდა:

- **ექსპერიმენტის ინსტალაციის ოპტიმიზაცია:** აუცილებელია დავრწმუნდეთ, რომ ნიმუში სწორად არის მომზადებული და რომ ჩვენი ექსპერიმენტის ინსტალაცია ოპტიმიზებულია მაქსიმალური სინათლის გამტარუნარიანობისთვის. ეს

დაგვეხმარება დავრწმუნდეთ, რომ სინათლის მაქსიმალური რაოდენობა აღწევს დეტექტორს. ამ გარემოებამ შეიძლება გააუმჯობესოს ჩვენი გაზომვის საერთო მგრძობელობა და სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა.

- **შესაბამისი ტექნიკის კალიბრაცია:** დეტექტორის ზუსტი დაკალიბრება მნიშვნელოვანია ზუსტი გაზომვების უზრუნველსაყოფად. აუცილებელია დავრწმუნდეთ, რომ ვიყენებთ შესაბამისი კალიბრაციის ტექნიკას, როგორცაა დაკალიბრებული სინათლის წყაროს ან ეტალონური ნიმუშის გამოყენება.
- **მონაცემთა დამუშავება:** მონაცემების დამუშავების გზამ ასევე შეიძლება გავლენა მოახდინოს ჩვენი დეტექტორის QE-ზე. აუცილებელია დავრწმუნდეთ, რომ გამოვიყენებთ მონაცემთა დამუშავების შესაბამისი ტექნიკა, როგორცაა ფონის გამოკლების ან ხმაურის შემცირების ტექნიკა, რაც საბოლოოდ მოგვცემს სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის გაუმჯობესების ერთ-ერთ შესაძლებლობას.
- **CCD დეტექტორის ჩანაცვლება:** თუ ამოცანის მოთხოვნებიდან გამომდინარე ამჟამინდელი დეტექტორი ზღუდავს ჩვენს შესაძლებლობას, რათა მივაღწიოთ სასურველ QE-ს, ბუნებრივია უნდა განვიხილოთ სხვა ტიპის დეტექტორის გამოყენება, რომელიც უფრო მეტად შეეფერება ჩვენს კონკრეტულ აპლიკაციას. მაგალითად, შეგვიძლია გამოვიყენოთ სხვა ტიპის დეტექტორი, როგორცაა InGaAs დეტექტორი ახლო ინფრაწითელი გაზომვებისთვის ან ფოტომამრავლი (PMT) დაბალი განათების დონის გაზომვისთვის.

მნიშვნელოვანია გვახსოვდეს, რომ მიუხედავად იმისა, რომ ეს ნაბიჯები პოტენციურად გვეხმარება ჩვენი დეტექტორის QE-ის გაუმჯობესებაში, ისინი შეიძლება ყოველთვის არ იყოს საკმარისი და აუცილებელი ხდება შეფასების ანალიზური მეთოდების დამუშავებაც.

ერთ-ერთი ძირითადი ამოცანა, რომელიც მოცემული სადოქტორო თემის ფარგლებში მიზნად დავისახეთ არის დეტექტორის სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის გაუმჯობესება, ამ თვალსაზრისით კვლევა შეიძლება წარიმართოს ქვემოთ ჩამოთვლილი მიმართულებებიდან ერთ-ერთის ან რამდენიმეს ერთად განვითარებით:

- **ფონის გამოკლება:** ფონის სიგნალი ქმნის დამატებითი დამახინჯების ეფექტებს. ფონის გამოკლება დაგვეხმარება გავაუმჯობესოთ სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა და შევამციროთ ნებისმიერი ფონური ხმაურის ან ფონური ჩარევის გავლენა. ეს განსაკუთრებით სასარგებლოა ფლუორესცენციის ან რამანის სპექტროსკოპიაში, სადაც ფონის სიგნალი შეიძლება იყოს მნიშვნელოვანი.
- **გამარტივება და ფილტვრა:** ჩვენი მონაცემების გამარტივება და ფილტვრის ტექნიკის გამოყენება დაგვეხმარება ხმაურის შემცირებაში და სიგნალის საერთო ხარისხის გაუმჯობესებაში. არსებობს მრავალი განსხვავებული ფილტვრის ტექნიკა, რომელიც შეიძლება გამოყენებულ იქნას ჩვენს შემთხვევაში, მაგალითად: Savitzky-Golay ან wavelet ფილტვრის ტექნიკა.
- **საბაზისო შესწორება:** გაზომვის საბაზისო ხაზის გასწორება დაგვეხმარება თქვენი შედეგების სიზუსტის გაუმჯობესებაში ნებისმიერი საბაზისო დრეიფების (ფლუქტუაციების) ან გამრუდების მოხსნით. არსებობს რამდენიმე საბაზისო კორექტირების მეთოდი, როგორცაა პოლინომიური მორგება, პიკის გამოვლენა ან სლაინის ინტერპოლაცია.
- **დეკონვოლუცია:** დეკონვოლუცია არის მათემატიკური ტექნიკა, რომელიც გამოიყენება სპექტრში გადაფარული სიგნალების გამოსაყოფად. ეს შეიძლება იყოს გამოსადეგი იმ სიტუაციებში, როდესაც ორი ან მეტი სიგნალი ერთსა და იმავე სპექტრულ რეგიონში ერთმანეთს ფარავს, რაც ართულებს სასურველი სიგნალების ინდივიდუალური მახასიათებლების ამოხსნას.
- **ნორმალიზაცია:** მონაცემების ნორმალიზება დაგვეხმარება შევადაროთ სპექტრები, რომლებსაც აქვთ განსხვავებული ინტენსივობა ან მასშტაბები. არსებობს სხვადასხვა ნორმალიზაციის ტექნიკა, როგორცაა პიკის ნორმალიზაცია ან არეალის ნორმალიზაცია.

მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ მონაცემთა დამუშავების შესაბამისი ტექნიკა დამოკიდებული იქნება კონკრეტულ აპლიკაციასა და გაზომვის ტიპზე. აქედან გამომდინარე, გავიარეთ კონსულტაცია დარგის ექსპერტებთან და მივმართეთ შესაბამის ლიტერატურას, რათა დაგვედგინა მონაცემთა დამუშავების ყველაზე შესაფერისი ტექნიკა ჩვენი კონკრეტული ექსპერიმენტისთვის.

BlackCommet დეტექტორის CCD სენსორის მახასიათებლების ოპტიმიზაციისათვის ერთ-ერთი ტექნიკა არის აპარატურული შესაძლებლობების პროგრამულად მართვა. ამ თვალსაზრისით უნდა გამოვყოთ კვლევები შემდეგი მიმართულებით:

- **გამოსახულების დამუშავების ალგორითმები:** გამოსახულების დამუშავების ეფექტური ალგორითმების დანერგვა შეიძლება დაგვეხმაროს ხმაურის შემცირებაში და გავაუმჯობესოთ დეტექტორის სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა. ეს შეიძლება მოიცავდეს ისეთ ტექნიკას, როგორცაა ფონის გამოკლება, ბრტყელი ველის კორექტირება ან დეკონვოლუცია.
- **დრო და სინქრონიზაცია:** დეტექტორის დრომ და სინქრონიზაციამ შეიძლება გავლენა იქონიოს მის მუშაობაზე. ამ პარამეტრების ოპტიმიზაცია დაგვეხმარება გაზომვების სტაბილურობისა და სიზუსტის გაუმჯობესებაში. ეს შეიძლება მოიცავდეს ტექნიკას, როგორცაა ზუსტი ტრიგერის განხორციელება, ინტეგრაციის დროის ოპტიმიზაცია ან წაკითხვის ხმაურის მინიმიზაცია.
- **მონაცემთა შეგროვება და შენახვა:** მონაცემთა ეფექტური შეგროვება და შენახვა დაგვეხმარება გაზომვების სიჩქარისა და სიზუსტის გაუმჯობესებაში. ეს შეიძლება მოიცავდეს ტექნიკას, როგორცაა მონაცემთა გადაცემის სიჩქარის ოპტიმიზაცია, მონაცემთა რეალურ დროში შეკუმშვის განხორციელება ან მონაცემთა სწრაფი შენახვის სისტემის დანერგვა.

თუმცა, მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ BlackCommet დეტექტორის CCD სენსორის კოდის ოპტიმიზაცია რთული ამოცანაა, რომელიც მოითხოვს როგორც დეტექტორის, ასევე გამოყენებული პროგრამირების ენის დრმა ცოდნას. ქვემოთ მოცემულია ერთ-ერთი კოდი, რომელიც სპეციალურად შეიქმნა ჩვენს ხელთ არსებული დეტექტორისათვის (BlackCommet) და რომლის მიზანია, მოახდინოს გადაღებული სპექტრების გაფილტვა და დამუშავება ეტალონური სპექტრებთან შედარების გზით. კოდი წარმოდგენილია wolfram -ის პროგრამული პაკეტის Mathematics ენაში (იხ. დანართი 1)

ამ კოდში, ჩვენ პირველად ვტვირთავთ CCD სენსორით ფორმირებულ სპექტრულ გამოსახულებას იმპორტის ფუნქციის გამოყენებით. შემდეგ ჩვენ ვასრულებთ ფონის

გამოკლებას გამოსახულების მედიანას გამოთვლით MedianFilter ფუნქციის გამოყენებით და გამოვაკლებთ მას ორიგინალ გამოსახულებას ImageSubtract ფუნქციის გამოყენებით.

შემდეგ, ჩვენ ვასრულებთ ბრტყელი ველის კორექტირებას ბრტყელი ველის გამოსახულების ჩატვირთვით იმპორტის ფუნქციის გამოყენებით და გავამრავლებთ ფონზე გამოკლებულ სურათზე ImageMultiply ფუნქციის გამოყენებით.

და ბოლოს, ჩვენ ვასრულებთ დეკონვოლუციას წერტილის გავრცელების ფუნქციის (PSF) ჩატვირთვით იმპორტის ფუნქციის გამოყენებით და ბრტყელი ველის შესწორებული სურათის დეკონვოლუციით ImageDeconvolve ფუნქციის გამოყენებით.

შემდეგ ImageCollage ფუნქციის გამოყენებით ვქმნით კომპოზიტურ გამოსახულებას, რომელიც აჩვენებს CCD სენსორით ფორმირებულ ორიგინალ, ფონის გამოკლებულ, ბრტყელ ველში შესწორებულ და მათემატიკურად დამუშავებულ (დეკონვულირებულ და ნორმირებულ) გამოსახულებებს.

დისერტაციის I თავის ძირითადი შედეგი

პირველი თავი დეტალურად განიხილავს ოპტიკურ-ელექტრონული სისტემების ფუნდამენტურ პრინციპებსა და გამოყენებას, ხაზს უსვამს ოპტიკური სიმკვრივისა და შთანთქმის მნიშვნელობას სპექტრული ანალიზის კონტექსტში. იგი წარმოგიდგენთ სიგნალის გადაცემის სიჩქარის გაზომვის სხვადასხვა მეთოდს, ხაზს უსვამს ფაზის და იმპულსური სპექტრომეტრების როლს ფლუორესცენციის და ფოსფორესცენციის სპექტრების დაჭერაში. გარდა ამისა, იგი იკვლევს სინათლის შთანთქმის თეორიულ საფუძვლებს თხევად გარემოში და ხაზს უსვამს სიგნალის შემცირების ტექნიკის კრიტიკულ გავლენას ოპტიკური გაზომვების სიზუსტისა და სიზუსტის გაზრდაზე.

დისკუსიები BlackCommet CCD დეტექტორის მახასიათებლებზე და CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის გაუმჯობესებაზე ხაზს უსვამს სპექტროსკოპიის ტექნოლოგიების უწყვეტ მიღწევებს.

დისერტაციის მეორე თავი ადგენს საფუძველს შემდგომ თავებში ელექტრონული გადასვლებისა და ვიბრაციული პროცესების შემდგომი შესწავლისთვის, რაც ქმნის ძლიერ საფუძველს ადაპტირებულ ნახევარგამტარ CCD დეტექტორებში რთული

ურთიერთქმედების გასაგებად და მათი გამოყენების განხილვას სხვადასხვა აპლიკაციებში.

თავი II. ელექტრონული გადასვლების და ვიბრაციული პროცესების თეორიული ანალიზი - ფრანკ-კონდონის პრინციპი სპექტროსკოპიულ აპლიკაციებში

§ 2.1. CCD დეტექტორით ნივთიერების ოპტიკური თვისებების შესწავლა მოლეკულურ დონეზე. ფრანკ-კონდონის პრინციპი

CCD ტექნოლოგია ფართოდ გამოიყენება გამოსახულების ვიზუალიზაციის აპლიკაციებში, მოლეკულებში ელექტრონულ გადასვლებთან დაკავშირებული სპექტრული ინფორმაციის მისაღებად. მოლეკულური სპექტრების შესწავლის თვალსაზრისით გადამწყვეტ როლს თამაშობს ფრანკ-კონდონის პრინციპი, განსაკუთრებით ულტრაიისფერ და ხილულ რეგიონებში. ელექტრონულ გადასვლებს თან ახლავს ვიბრაციული ცვლილებები მოლეკულებში.

CCD მოწყობილობა მუშაობს შემომავალი ფოტონების ელექტრონულ სიგნალად გარდაქმნის გზით. ცხადია შესაძლებელია ამ ელექტრონული სიგნალის გაზომვა და ანალიზი. როდესაც მოლეკულა გადის ელექტრონულ გადასვლას, როგორც ეს აღწერილია ფრანკ-კონდონის პრინციპით, ის ასხივებს ან შთანთქმავს სინათლეს ულტრაიისფერ ან ხილულ სპექტრში. ეს შუქი შეიძლება დაიჭიროს CCD სენსორმა სპექტრომეტრში, რათა გაანალიზოს მოლეკულის სპექტრული თვისებები. მიღებული სპექტრული მონაცემები შეიძლება გამოყენებულ იქნას მოლეკულების ელექტრონული და ვიბრაციული მდგომარეობის შესახებ დეტალების დასადგენად.

CCD-ზე დაფუძნებული სპექტრომეტრი იჭერს ნივთიერების მიერ გამოსხივებულ ან შთანთქმულ შუქს, როდესაც ის ელექტრონულ გადასვლებს განიცდის. CCD სენსორი გარდაქმნის ამ სინათლეს ელექტრულ სიგნალად, ქმნის სპექტრს, რომელიც ასახავს სინათლის ინტენსივობას სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე.

CCD-ის მიერ დაჭერილი სპექტრი შემდეგ შეიძლება გაანალიზდეს კონკრეტული ელექტრონული გადასვლების დასადგენად. ფრანკ-კონდონის პრინციპი იძლევა თეორიულ ჩარჩოს ამ გადასვლების გასაგებად, განსაკუთრებით ფოკუსირებულია ვერტიკალურ გადასვლებზე სხვადასხვა ვიბრაციულ დონეებს შორის მოლეკულის ელექტრონულ მდგომარეობებში. სპექტრალური ხაზების ინტენსივობისა და პოზიციის გაანალიზებით, შეგვიძლია გამოვიტანოთ ინფორმაცია

გარდამავალ ელექტრონულ გადასვლებში ჩართული ვიბრაციული მდგომარეობების შესახებ და როგორ შეესაბამება ისინი ფრანკ-კონდონის პრინციპს.

სპექტრული ანალიზის შედეგად მიღებული ინფორმაცია შეიძლება გამოყენებულ იქნას მოლეკულების და მათი ელექტრონული კონფიგურაციების იდენტიფიცირებისთვის, მოლეკულური გადასვლების დინამიკის გასაგებად და ნივთიერებების თვისებების მოლეკულურ დონეზე გამოსაკვლევად. ეს განსაკუთრებით სასარგებლოა ისეთ სფეროებში, როგორცაა ქიმია, ფიზიკა და მასალათმცოდნეობა, სადაც გადამწყვეტია მასალების ელექტრონული და ვიბრაციული სტრუქტურის გაგება.

მოლეკულებში ელექტრონული ენერჯის ცვლილებით გამოწვეული გამოსხივება მიმდინარეობს მხოლოდ სპექტრის ულტრაიისფერ ან ხილულ არეში. ელექტრონული აგზნებისას იცვლება მოლეკულის ელექტრონული გარსის კონფიგურაცია, რის შედეგადაც იცვლება მოლეკულის ბირთვებს შორის ურთერთქმედების ძალა და როგორც შედეგი იცვლება ასევე მოლეკულის როგორც რხევითი, ასევე ბრუნვითი მოძრაობებიც. ელექტრონული გადასვლები ძალიან სწრაფად ხდება. ამისათვის საჭირო დრო მოლეკულის რხევითი მოძრაობის პერიოდის მხოლოდ მცირე ნაწილს შეადგენს. ამიტომ ითვლება, რომ ელექტრონული გადასვლების დროს მოლეკულის ატომები უძრავი რჩებიან, ანუ რჩებიან იმ ადგილებში, რომლებშიც ისინი ელექტრონული გადასვლის მომენტში იმყოფებოდნენ. ამ მიახლოებას ფრანკ-კონდონის პრინციპი ეწოდება. ფრანკ-კონდონის პრინციპის თანახმად ელექტრონული გადასვლები ბირთვებს შორის მანძილის ფიქსირებული მნიშვნელობისათვის ხორციელდება. ეს ნიშნავს, რომ ელექტრონული გადასვლები დასაშვებია მხოლოდ იმ სათანადო რხევით დონეებს შორის, რომლებიც სხვადასხვა ელექტრონულ კონფიგურაციებს შეესაბამებიან და ერთ ვერტიკალზე მდებარეობენ. სხვა სიტყვებით, რომ ვთქვათ გადასვლები ხორციელდება სხვადასხვა კონფიგურაციის იმ რხევით დონეებს შორის, რომელთაც რხევითი მოძრაობის აღმწერი ტალღური ფუნქციების მაქსიმუმები ერთ ვერტიკალზე აქვთ განლაგებული. ამ პრინციპის გამოყენება საგრძნობლად ამარტივებს მოლეკულური სპექტრების გამოთვლას.

სიმეტრიის თვისებების გარდა, რომლებიც განსაზღვრავენ ნებისმიერი გადასვლის შერჩევის წესებს, ელექტრონულ-რხევით გადასვლებში დიდ როლს ასრულებს ბირთვების რხევითი მოძრაობის აღმწერი ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ხარისხი.

განვიხილოთ დიპოლური გადასვლის მატრიცული ელემენტის სტრუქტურა

$$\langle e, \nu | \vec{m} | e', \nu' \rangle = \int \Psi_{e\nu}^* \vec{m} \Psi_{e'\nu'} d\vec{r} d\vec{R}. \quad (2.1.1)$$

სადაც $\Psi_{e\nu} = \psi_e(\vec{r}, R) \psi_\nu(\vec{R})$, e ელექტრონული მდგომარეობის ინდექსია, ხოლო ν - რხევითი მდგომარეობის კვანტური რიცხვი, რომელიც შეესაბამება მოცემულ ელექტრონულ მდგომარეობას e . $\psi_\nu(\vec{R})$ სწრაფად ოსცილირებადი ფუნქციაა, ხოლო ψ_e ნელა იცვლება $\psi_\nu(\vec{R})$ -თან შედარებით R -ის ცვლილებისას, ამიტომ ტალღური ფუნქციის ელექტრონული ნაწილი შეიძლება გავიტანოთ ინტეგრალის გარეთ და, შეგვიძლია, ინტეგრალი ასეთად წარმოვადგინოთ:

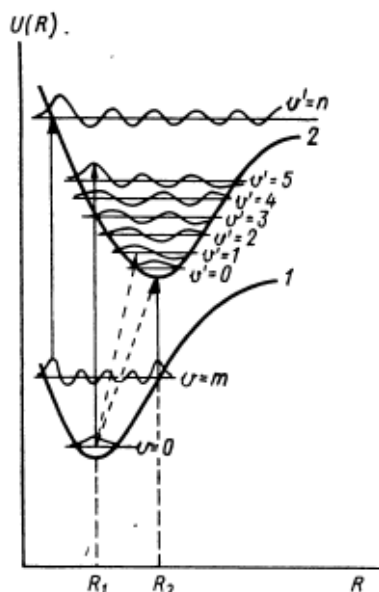
$$\langle e, \nu | \vec{m} | e', \nu' \rangle = \langle e | \vec{m} | e' \rangle \int \psi_\nu^* \psi_{\nu'} d\vec{R}, \quad (2.1.2)$$

სადაც:

$$\langle e | \vec{m} | e' \rangle = \int \psi_e^* \vec{m} \psi_{e'} d\vec{r}. \quad (2.1.3)$$

ამრიგად, დიპოლური გადასვლის მატრიცული ელემენტი პროპორციულია ინტეგრალის $\langle \psi_\nu | \psi_{\nu'} \rangle = \int \psi_\nu^* \psi_{\nu'} d\vec{R}$, რომლის სიდიდე დამოკიდებულია ბირთვული ტალღური ფუნქციების ხარისხზე. ამ ინტეგრალს უწოდებენ ფრანკ-კონდონის ფაქტორს. როგორც ცნობილია პოტენციალური ორმოს გარეთ ტალღური ფუნქცია ψ_ν ექსპონენციალურად მცირდება, ამიტომ გადაფარვის ინტეგრალი, მაგალითად, ძირითადი რხევითი დონეებისთვის $\nu = 0$ და $\nu' = 0$, რომლებიც დაშორებულნი არიან სიდიდით $(R_2 - R_1)$ ძალზე მცირეა. თუ ასეთი გადასვლა ხორციელდება, ეს იმას ნიშნავს, რომ ელექტრონული გადასვლის მცირე დროის განმავლობაში ბირთვები იცვლიან მდებარეობას $(R_2 - R_1)$ სიდიდით, რომელიც მოლეკულის ზომის რიგისაა, ეს კი ნაკლებად მოსალოდნელია.

ფრანკ-კონდონის კოეფიციენტის სიდიდე და, მაშასადამე, გადასვლის ალბათობაც მნიშვნელოვანია ისეთი საწყისი და საბოლოო მდგომარეობებისათვის,



ნახ.2.1. ელექტრონულ-რხევითი ვერტიკალური გადასვლები, რომლებიც შეესაბამებიან ფრანკ-კონდონის პრინციპს.

როდესაც მათ შორის გადასვლა შესაძლებელია ბირთვების კოორდინატების და იმპულსების ცვლილების გარეშე. სწორედ ეს არის ფრანკ-კონდონის პრინციპის არსი ნახ.2.1-ზე ასეთი გადასვლები ნაჩვენებია ვერტიკალური ხაზებით (მათ ხშირად „ვერტიკალურ“ გადასვლებს უწოდებენ): $v = 0 \Leftrightarrow v' = 3,4,5$; $v = m \Leftrightarrow v' = 0$; $v = m \Leftrightarrow v' = n$. გადასვლები ბირთვების გადაადგილებით და იმპულსების ცვლილებით ნაკლებად მოსალოდნელია, მაგალითად, გადასვლა $v = 0 \Leftrightarrow v' = 0,1$.

იმ დონეებზე, რომელთათვისაც $v, v' \gg 1$, ბირთვების მოძრაობა კვაზისკლასიკურია. ამიტომ ბირთვები დროის უმეტეს ნაწილს ატარებენ მობრუნების წერტილის ახლოს და მათ აქვთ თითქმის ნულოვანი იმპულსი. სწორედ მობრუნების წერტილის ახლოს ხორციელდება ყველაზე ხშირი გადასვლა.

§ 2.2. n განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის გადაფარვის ინტეგრალის გამოთვლა

ფრანკ-კონდონის ეფექტს განსაკუთრებული მნიშვნელობა აქვს სხვადასხვა ორგანული ნივთიერების ოპტიკური თვისებების კვლევისას.

მრავალგანზომილებიანი ფრანკ-კონდონის (FC) გადაფარვის ინტეგრალების შესწავლა თეორიულად საჭიროა მრავალატომური მოლეკულების სხვადასხვა

ელექტრონულ მდგომარეობებს შორის გამოსხივების და არაგამოსხივების პროცესების მექანიზმის გამოსაკვლევად [121]. 2008 წელს გამოქვეყნდა კვლევა [11], რომელმაც წარმოადგინა მრავალგანზომილებიანი FC ინტეგრლების შეფასების მარტივი მეთოდი ჰარმონიული ოსცილატორის მიახლოებაზე დაყრდნობით და დუშინსკის ეფექტის [26] გათვალისწინებით. მომდევნო კვლევამ აჩვენა, თუ როგორ შეიძლება n განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის ზედდების ინტეგრალის გამოთვლა და შემოწმდა მიღებული ფორმულის პრაქტიკული გამოყენება SeO_2^- -ის რხევითი პიკების სპექტრის სიმულაციის საფუძველზე.

საწყისი ელექტრონული მდგომარეობისთვის n განზომილებიანი ჰარმონიული ოსცილატორის რხევითი ტალღური ფუნქციები მოიცემა შემდეგი სახით:

$$|v'_1 v'_2 \dots v'_n\rangle = \prod_{i=1}^n N_{v'_i} H_{v'_i}(\sqrt{\alpha'_i} Q'_i) \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha'_i Q'_i\right), \quad (2.2.1)$$

სადაც, $|v'_1 v'_2 \dots v'_n\rangle$ - მრავალატომიანი მოლეკულის რხევითი ტალღური ფუნქციაა, v'_i არის რხევითი კვანტური რიცხვები i -ურ რხევით დონეზე, $H_{v'_i}(x)$ არის ჰერმიციული მრავალწევრი, რომელიც დამოკიდებულია v'_i - კვანტურ რიცხვზე, $\sqrt{\alpha'_i} Q'_i$ - ტალღური ფუნქციის ნაწილია, რომელიც აღწერს რხევით მოძრაობას, ხოლო $\exp\left(-\frac{1}{2} \alpha'_i Q'_i\right)$ - ტალღური ფუნქციის ექსპონენციალური ნაწილია, რომელიც ასევე აღწერს რხევით მოძრაობას. $N_{v'_i}$ - ნორმირების ფაქტორია თითოეული v'_i კვანტური რიცხვისათვის, რომელიც გამოსახება გამოსახულებით:

$$N_{v'_i} = \left(\frac{\sqrt{\alpha'_i}}{2^{v'_i} v'_i! \sqrt{\pi}}\right)^{1/2}, \quad (2.2.2)$$

სადაც $\alpha'_i = \omega'_i/\hbar$ - პარამეტრი დამოკიდებულია ω'_i ელექტრონული მდგომარეობის i -ურ დონეზე რხევის სიხშირეზე. პოლიატომური მოლეკულის ვიბრაციულ ტალღურ ფუნქციებს ძირითად მდგომარეობაში ან დაბალი ვიბრაციული აგზნების მქონე მდგომარეობაში, აქვს ანალოგიური სახე:

$$\langle v_1 v_2 \dots v_n | = \prod_{i=1}^n N_{v_i} H_{v_i}(\sqrt{\alpha_i} Q_i) \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha_i Q_i\right), \quad (2.2.3)$$

მრავალატომიანი მოლეკულის ორ ვიბრაციულ მდგომარეობას შორის $\langle v_1 v_2 \dots v_n | v'_1 v'_2 \dots v'_n \rangle$ მატრიცული ელემენტი მოიცემა გამოსახულებით:

$$\begin{aligned} \langle v_1 v_2 \dots v_n | v'_1 v'_2 \dots v'_n \rangle &= \\ &= N \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n \left[\exp\left(-\frac{1}{2} \alpha'_i Q_i'^2\right) \times H_{v'_i}(\sqrt{\alpha'_i} Q_i') \right] \\ &\times \prod_{i=1}^n \left[\exp\left(-\frac{1}{2} \alpha_i Q_i^2\right) \right. \\ &\left. \times H_{v_i}(\sqrt{\alpha_i} Q_i) \right] dQ_1 dQ_2 \dots dQ_n, \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

სადაც, $\langle v_1 v_2 \dots v_n |$ - ვექტორ-სვეტი შეესაბამება მოლეკულის საწყის რხევით მდგომარეობას, $|v'_1 v'_2 \dots v'_n \rangle$ - შეესაბამება მოლეკულის საბოლოო რხევით მდგომარეობას, ხოლო:

$$N = \frac{1}{\pi^{n/2}} \left(\frac{\sqrt{\prod_{i=1}^n (\alpha_i \alpha'_i)}}{2 \sum_{i=1}^n (v_i + v'_i) \prod_{i=1}^n (v_i! v'_i!)} \right)^{1/2}, \quad (2.2.5)$$

ნორმირების კოეფიციენტია.

ამრიგად, (2.2.1) და (2.2.3) ფორმულები არის ჰერმიციული პოლინომების, ექსპონენციალური ფუნქციების და ნორმალიზების ფაქტორების პროდუქტი პოლიატომურ მოლეკულაში თითოეული ვიბრაციული მდგომარეობისთვის. ეს ფორმულები გამოიყენება ვიბრაციული ტალღის ფუნქციების აღსაწერად და ხსნის მოლეკულების ოპტიკურ თვისებებს. (2.2.4) ფორმულა აღწერს მატრიცის ელემენტს მოლეკულის ორ ვიბრაციულ მდგომარეობას შორის ყველა განზოგადებული ვიბრაციული კოორდინატების ინტეგრალის თვალსაზრისით. იგი ითვალისწინებს ამ მდგომარეობებს შორის გადასვლის ალბათობას და აღწერს ცვლილებებს ვიბრაციულ ტალღის ფუნქციებში ამ გადასვლის დროს.

§ 2.3. დიატომურ მოლეკულაში ელექტრონული გადასვლების მოდელირება

განვიხილოთ დიატომური მოლეკულის შემთხვევა. როდესაც დიატომური მოლეკულა გადადის აგზნებულ ელექტრონულ მდგომარეობაში, რომლის ენერგიაც

ΔE_{elec} ენერგიაზე მაღალია. ეს ნიშნავს, რომ ელექტრონები მოლეკულაში გადადიან უფრო დაბალი ენერგიის ელექტრონული მდგომარეობიდან უფრო მაღალი ენერგიისკენ. ეს გადასვლა შეიძლება მოხდეს, როდესაც მოლეკულა შთანთქავს ენერგიას, როგორც წესი, სინათლის სახით.

ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების აღსაწერად ვისარგებლოთ მორზეს პოტენციური ენერგიის ფუნქციით, რომელიც კარგად აღწერს დიატომური მოლეკულის პოტენციური ენერგიას, როგორც ატომებს შორის მანძილის ფუნქციას. ფილიპ მ. მორზემ თავის ნაშრომში [78] წარმოადგინა მორზეს პოტენციალი, მოდელი დიატომური მოლეკულის პოტენციური ენერგიისთვის მის ატომებს შორის მანძილის ფუნქციით. იგი ფართოდ გამოიყენება კვანტურ მექანიკაში და მოლეკულურ ფიზიკაში მოლეკულების ვიბრაციული სტრუქტურის მოდელების აღსაწერად:

$$V(\omega, d, \rho, r) = D(1 - e^{-3\sqrt{\omega D}(r-\rho)})^2, \quad (2.3.1)$$

სადაც: $\omega = \omega_0/\omega_1$ - აგზნებული და ძირითადი მდგომარეობების სიხშირეების შეფარდებაა, $D = D_1/D_0$ - წარმოადგენს დისოციაციის ენერგიების ფარდობას აგზნებულ (D_1) და ძირითად (D_0) მდგომარეობებში, $\rho = R_1/R_0$ - ბირთვებს შორის მანძილების შეფარდებაა წონასწორობის მდგომარეობაში, R_1 - შეესაბამება წონასწორულ აგზნებულ მდგომარეობას, ხოლო R_0 წონასწორულ ძირითად მდგომარეობას. ერთი სიტყვით ρ - წარმოადგენს წონასწორული კავშირის სიგრძეს, ანუ ნაწილაკებს შორის მანძილს, როდესაც პოტენციური ენერგია მინიმუმია, r - ნაწილაკებს შორის რეალური მანძილია.

ვიბრაციული ენერგიის ქვედა ზღვარს შეესაბამება ძირითად მდგომარეობაში ბირთვთაშორის წონასწორული მანძილი [11]:

$$r_0(\omega, d, \rho, v) = \rho - 0.3352 \frac{\sqrt{D}}{\omega} \cdot \log \left\{ 1 + \frac{0.003651}{D} \sqrt{(0.5 + v)\omega(15000D - 750(0.5 + v)\omega)} \right\}, \quad (2.3.2)$$

ხოლო ვიბრაციული ენერგიის ზედა ზღვარს კი აგზნებულ მდგომარეობაში ბირთვთაშორისი წონასწორული მანძილი:

$$r_1(\omega, D, \rho, \nu) = \rho - 0.3352 \frac{\sqrt{D}}{\omega} \cdot \log \left\{ 1 - \frac{0.003651}{D} \sqrt{(0.5 + \nu)\omega(15000D - 750(0.5 + \nu)\omega)} \right\} \quad (2.3.3)$$

დიატომური მოლეკულის ვიბრაციული ენერჯის დონე დაკავშირებულია ν - ვიბრაციული კვანტურ რიცხვთან [82]:

$$E(\omega, D, \nu) = 3\omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - 0.15 \frac{\omega^2}{D} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2 \quad (2.3.4)$$

შედეგად ტალღური ფუნქცია გამოთვლების შემდეგ მიიღებს სახეს:

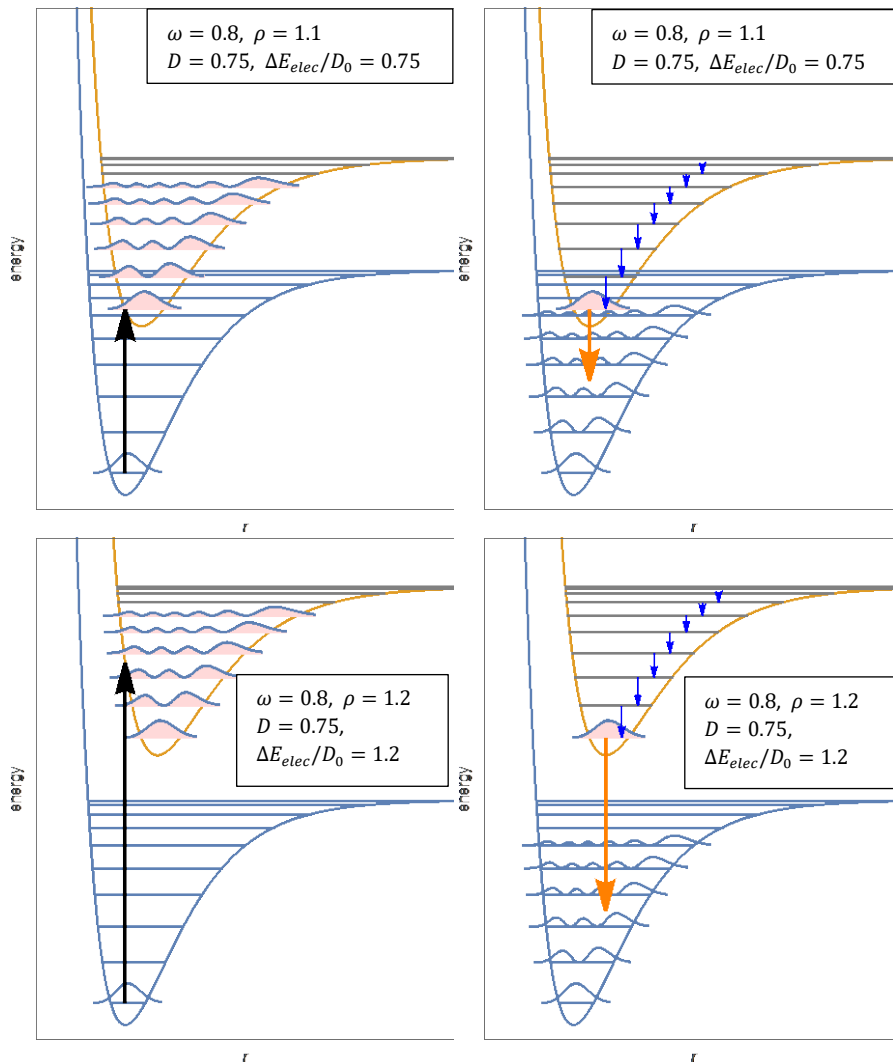
$$\Psi(\omega, D, \rho, \nu, r) = \left(\frac{\nu! \cdot 3\omega \left(\frac{20d}{\omega} - 2\nu - 1 \right)}{\sqrt{d} \cdot \Gamma \left(\frac{20d}{\omega} - \nu \right)} \right)^2 e^{-x/2} x^{10(d/\omega) - \nu - 1/2} L_\nu^n(x), \quad (2.3.5)$$

სადაც $x = \frac{20D}{\omega} e^{-\frac{3\omega}{\sqrt{D}}(r-\rho)}$ აღნიშვნაა, $\Gamma \left(\frac{20d}{\omega} - \nu \right)$ - გამა ფუნქციაა, ხოლო $L_\nu^n(x)$ - წარმოადგენს ლაგერის განზოგადოებულ პოლინომს, რომლის ხარისხია ν , ხოლო რიგი $n = \frac{20D}{\omega} - 2\nu - 1$.

თხევად მდგომარეობაში, ინდივიდუალური ბრუნვითი დონეები ზოგადად არ არის დაშვებული, რაც იმას ნიშნავს, რომ ბრუნვითი გადასვლები ცალსახად არ შეინიშნება. ამიტომ, ელექტრონული გადასვლები აღიწერება ვიბრაციული პროცესებით, რაც გულისხმობს ერთდროულ ცვლილებებს როგორც ვიბრაციულ, ასევე ელექტრონულ კვანტურ რიცხვებში. ეს გადასვლები განაპირობებს მოლეკულის ვიბრაციული ენერჯის დონის ცვლილებებს.

ჩვენ შეგვიძლია ავაგოთ პოტენციური ენერჯის მრუდები დიატომურ მოლეკულაში ელექტრონული გადასვლებისას, როგორც შთანთქმის, ასევე ფლუორესცენციის დროს. ვიზუალიზაციის მიზნებისთვის მორზეს პოტენციალი მასშტაბირებულია და გადიდებულია 15-ჯერ. შედარებისათვის საყრდენ პოტენციალად განსაზღვრულია $V(1,1,1,r)$, რომელთანაც ხდება $V(\omega, D, \rho, r)$ - პოტენციალის შედარება. (2.3.4) ფორმულით განვსაზღვროთ ამ ენერჯის დონეები ($r_0(\omega, D, \rho, \nu) - r_1(\omega, D, \rho, \nu)$) დიაპაზონში, როცა კვანტური რიცხვები ν იცვლება 0-დან 10-მდე. მოცემული $E(\omega, D, \nu)$ ენერგეტიკული დონისათვის გამოვთვალოთ

ალბათობის სიმკვრივე (კვადრატული ტალღური ფუნქცია) (2.3.5) ფორმულით, რომელიც ავსებს ენერგეტიკული მრუდების ქვეშ არსებულ ფართობს და ამით ვიზუალურად ვაჩვენოთ ნაწილაკების პოვნის ალბათობა კონკრეტულ პოზიციაზე.



ნახ.2.3.1. ძირითადი და აგზნებული ელექტრონული მდგომარეობების შთანთქმის (მარცხნივ) და ფლუორესცენციის (მარჯვნივ) პოტენციური ენერგიების მრუდები ატომთაშორის მანძილისა და ენერგიის სხვადასხვა მნიშვნელობებისათვის

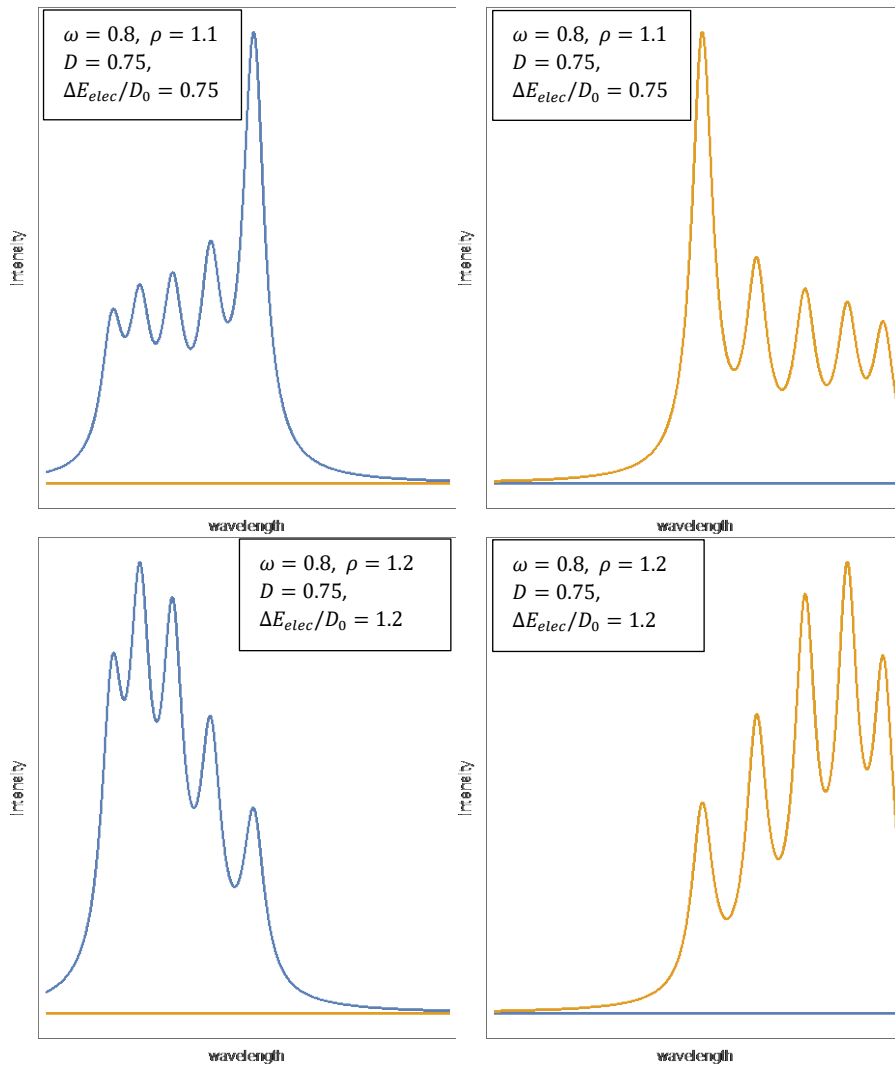
ნახ.2.3.1-ზე წარმოდგენილია ძირითადი და აგზნებული ელექტრონული მდგომარეობები პოტენციური ენერგიის მრუდებით. ეს მრუდები ასახავს, თუ როგორ იცვლება მოლეკულის პოტენციური ენერგია ატომთაშორისი მანძილის ფუნქციის მიხედვით. ძირითადი მდგომარეობის პოტენციური ენერგიის მრუდი, როგორც წესი, ნაჩვენებია ლურჯი ფერის მრუდით, ხოლო აგზნებული მდგომარეობის პოტენციური ენერგიის მრუდი გამოსახულია წითლად.

ვიბრაციული დონის ალბათობის სიმკვრივე, როგორც ძირითად $|\psi_v^{(0)}|^2$, ასევე აგზნებულ $|\psi_{v'}^{(1)}|^2$, მდგომარეობაში აღწერს მოლეკულის ყოფნის ალბათობას კონკრეტულ რხევით დონეზე. ზოგადად, ისინი აღწერენ, თუ როგორ ხდება რხევითი გადასვლები ორატომიან მოლეკულაში, როცა იცვლება ელექტრონის, როგორც ელექტრონული, ასევე რხევითი მდგომარეობა. ნახ.2.3.1-ზე წამოდგენილი პოტენციური ენერჯიისა და რხევითი ენერჯიის დონის მრუდები ვიზუალურ წარმოდგენას გვაძლევს ამ გადასვლებისა და ალბათობის სიმკვრივეთა შესახებ თითოეულ ელექტრონულ დონეზე.

როდესაც მოლეკულა შთანთქავს ფოტონს, ელექტრონების გადაწყობა ხდება ბევრად უფრო სწრაფად, ვიდრე მძიმე ბირთვების მოძრაობა. ეს ამართლებს ბორნ-ოპენჰაიმერის (Born-Oppenheimer) [12] მიახლოებას, რომელიც გამოყოფს ელექტრონულ და ბირთვულ მოძრაობებს. შედეგად, ელექტრონული გადასვლები შეიძლება იყოს მიახლოებული ვერტიკალური გადასვლებთან (იხილეთ შავი ისარი) r ბირთვულ დისტანციებზე აღზნებულ მდგომარეობაში და უახლოვდება მის მაქსიმალურ მნიშვნელობას ძირითად მდგომარეობაში.

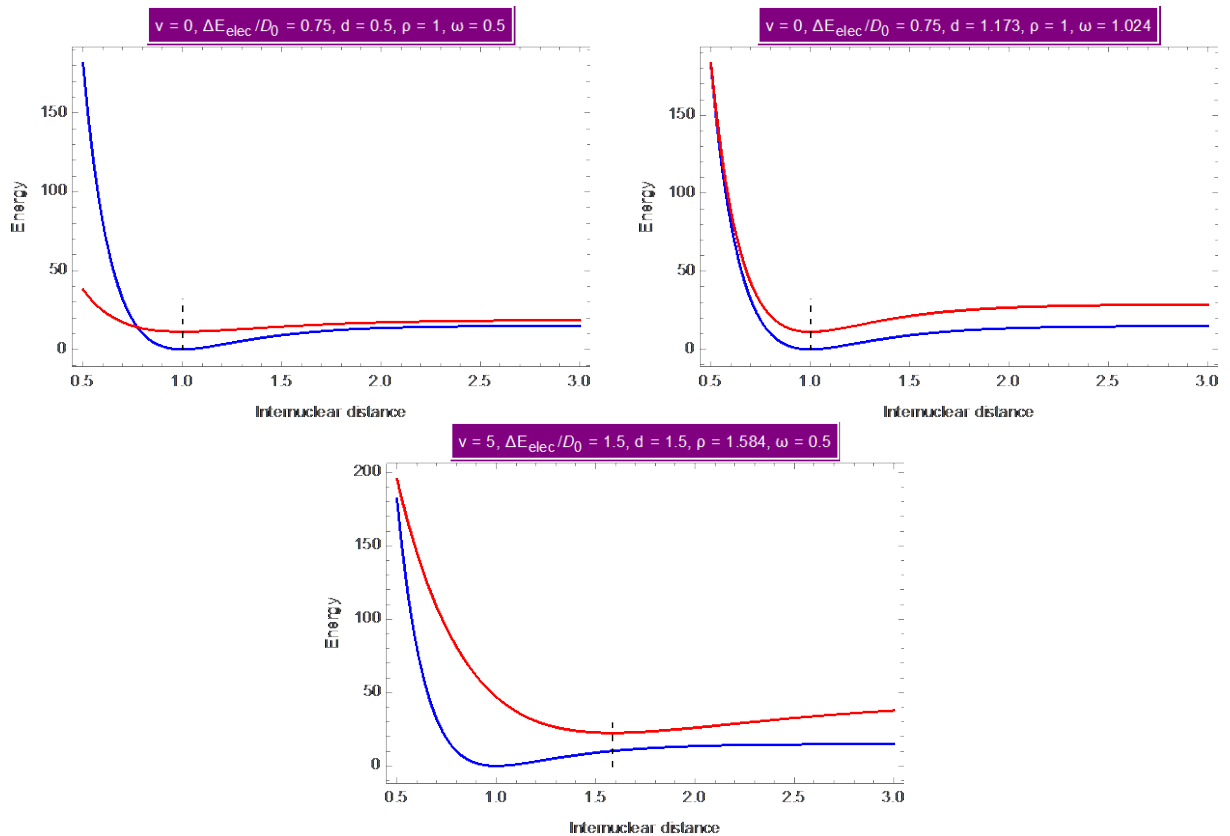
ფრანკ-კონდონის პრინციპის თანახმად, რხევითი პიკების ფარდობითი ინტენსივობა მიღებულ სპექტრში ძირითადი ($\psi_v^{(0)}$) და აგზნებული ($\psi_{v'}^{(1)}$) მდგომარეობის რხევით ტალღურ ფუნქციებს შორის გადაფარის ინტეგრალის კვადრატის პირდაპირპროპორციულია. ეს პრინციპი ითვალისწინებს იმ ფაქტს, რომ ბირთვები ელექტრონებთან შედარებით გაცილებით ნელა მოძრაობენ ელექტრონული გადასვლების დროს, რაც უპირატესობას ანიჭებს ვიბრაციულ მდგომარეობას, რომელიც მაქსიმალურად გადაიფარება საწყისი რხევითი მდგომარეობით.

ნახ.2.3.2-ზე წარმოდგენილია ნახ.2.3.1-ზე ნაჩვენების გადასვლების შესაბამისი შთანთქმისა და ფლუორესცენციის სპექტრები. ეს სპექტრები ასახავს ელექტრონული გადასვლის შედეგად წარმოქმნილი ვიბრაციის კომპონენტების ფარდობით ინტენსივობას. სპექტრი ასახავს აგრეთვე აღზნებული მდგომარეობის ვიბრაციული დონეების გადაფარვას, ამასთან, თითოეული კომპონენტის ინტენსივობა დამოკიდებულია გადაფარვის ხარისხზე ძირითადი მდგომარეობის ვიბრაციულ ტალღურ ფუნქციასთან მიმართებაში.



ნახ.2.3.2. ძირითადი და აგზნებული ელექტრონული მდგომარეობების შთანთქმის (მარცხნივ) და ფლუორესცენციის (მარჯვნივ) სპექტრები ატომთაშორის მანძილისა და ენერჯის სხვადასხვა მნიშვნელობებისათვის

ვიბრაციული კომპონენტების ფარდობითი ინტენსივობა შთანთქმის სპექტრში დამოკიდებულია ორი ელექტრონული მდგომარეობის სხვადასხვა მოლეკულურ პარამეტრზე. თუმცა, ის ყველაზე მგრძობიარეა წონასწორულ მდგომარეობაში მყოფ ბირთვებს შორის (R_0 და R_1) მანძილის სხვაობის მიმართ. ეს სხვაობა გავლენას ახდენს ვიბრაციული ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ხარისხზე და განსაზღვრავს ვიბრაციული პიკების ფარდობით ინტენსივობას.



ნახ.2.3.3. პოტენციური ენერგიების მრუდები ძირითადი (ლურჯი) და აგზნებული (წითელი) ელექტრონული მდგომარეობებისათვის

ნახ.2.3.3-ის პირველ გრაფიკზე წარმოდგენილია პოტენციური ენერგიის მრუდები ძირითადი (ლურჯი) და აგზნებული (წითელი) ელექტრონული მდგომარეობებისათვის, უმნიშვნელო ელექტრონული ენერგიის სხვაობისას $\Delta E_{elec}/D_0 = 0.75$ და მორზე მცირე პოტენციური ორმოს შემთხვევაში. ორივე მდგომარეობისათვის ატომთაშორისი წონასწორული მანძილი ერთნაირია, მაგრამ ენერგიის სხვაობა ამ ორ მდგომარეობას შორის მცირდება. ელექტრონული გადასვლები ძირითადი მდგომარეობიდან აგზნებულ მდგომარეობაში განხორციელდება პოტენციური ორმოს მინიმუმის მახლობლად $r = 1$, ე.ი. გადასვლა ხდება ატომთაშორისი მანძილის შეუცვლელად ფრანკ-კონდონის პრინციპის შესაბამისად.

მეორე გრაფიკი აჩვენებს, რომ როცა მორზე პოტენციური ორმოს სიღრმე იზრდება $D = 1.173$, მას შეესაბამება მოლეკულების უფრო მყარი კავშირი ძირითად ელექტრონულ მდგომარეობაში, ფარდობითი სიხშირე იზრდება $\omega = 1.024$, რაც მიუთითებს უფრო მყარ კავშირებს ან ვიბრაციულ ენერგიებს შორის დიდ სხვაობას.

ძირითადი ელექტრონული მდგომარეობის პოტენციური ორმო უფრო ღრმაა პირველ გრაფიკზე წარმოდგენილ შემთხვევასთან შედარებით. ეს კი მიუთითებს უფრო მყარ მოლეკულურ კავშირზე ან დისოციაციის უფრო მაღალ ენერგიაზე.

მესამე გრაფიკზე წარმოდგენილია შემთხვევა $\nu = 5$ ვიბრაციული კვანტური რიცხვით, რაც მიუთითებს მოლეკულაში უფრო მაღალ ვიბრაციულ დონეზე. ელექტრონულ მდგომარეობებს შორის ენერგიების სხვაობა $\Delta E_{elec}/D_0 = 1.5$ თითქმის ორჯერ მეტია, ვიდრე წინა ორ შემთხვევაში, რაც მიუთითებს ფოტონის ზემოქმედებით უფრო მაღალი ენერგეტიკული დონიდან გადასვლებს, მაგალითად დასაშვებია გადასვლები სპექტრის ინფრაწითელი დიაპაზონიდან ხილულ დიაპაზონში. უფრო ღრმა პოტენციური ორმოები და გაზრდილი ბირთვთაშორისი წონასწორული მანძილი აგზნებულ ელექტრონულ მდგომარეობაში განაპირობებს მოლეკულის მნიშვნელოვან რეკონფიგურაციას. მაშასადამე, მოლეკულაში ელექტრონული აგზნებისას კომფორტული მდგომარეობა მიიღება შედარებით დიდი ბირთვთაშორისი მანძილის შემთხვევაში. მოლეკულას აგზნებულ მდგომარეობაში აქვს უფრო ფართო პოტენციური ორმო, რაც მიუთითებს აგზნებულ მდგომარეობაში კავშირის სიგრძის უფრო მეტ მოქნილობაზე, ვიდრე ძირითად ელექტრონულ მდგომარეობაში.

ერთი სიტყვით, ყველაზე სავარაუდო ელექტრონული გადასვლები არის ის გადასვლები, რომლებიც ხდება ვერტიკალურად ერთი პოტენციური ორმოდან (მინიმუმიდან) მეორე ორმოში. გადასვლის ალბათობა დაკავშირებულია საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ვიბრაციულ ტალღურ ფუნქციების გადაფარვასთან. რაც უფრო დიდია გადაფარვა, მით უფრო ინტენსიურია გადასვლა (თუმცა ტალღური ფუნქციები აქ არ არის გამოსახული). ნახ.2.3.3-ზე წარმოდგენილი ვიზუალიზაცია საშუალებას იძლევა განვსაზღვროთ, თუ როგორ მოქმედებს ვიბრაციული კვანტური რიცხვი, ელექტრონული ენერგიის სხვაობა, მორზეს პოტენციალის სიღრმე, წონასწორული მანძილი და სიხშირე პოტენციური ენერგიის მრუდებზე და, შესაბამისად, მოლეკულის სპექტრალურ გადასვლებზე.

§ 2.4. დეტექტირებული სიგნალის 3D ანალიზი

ფრანკ-კონდონის პრინციპის CCD მახასიათებლებთან დაკავშირება მათემატიკურად გულისხმობს, რომ CCD დეტექტორები არეგისტრირებს ელექტრულ სიგნალს, რომელიც გენერირდება დაცემული შუქის ინტენსივობით. ეს სიგნალი პროპორციულია დეტექტორზე დაცემული სიგნალის ინტენსივობის:

$$S(v, \lambda) = QE(\lambda) \cdot I(v, \lambda), \quad (2.4.1)$$

სადაც $QE(\lambda)$ განისაზღვრება (1.7.1) ფორმულით. მაგრამ, ჩვენ აღვნიშნეთ, რომ მოლეკულურ სპექტრებში სპექტრული ხაზების ფარდობითი ინტენსივობის პროგნოზირებისთვის შეიძლება გამოვიყენოთ ფრანკ-კონდონის პრინციპი. ორ ვიბრაციულ დონეს შორის გადასვლის ალბათობა სხვადასხვა ელექტრონულ მდგომარეობაში პროპორციულია მათი ვიბრაციული ტალღის ფუნქციების გადაფარვის ინტეგრალის კვადრატისა. მათემატიკურად, ეს გამოიხატება როგორც ფრანკ-კონდონის ფაქტორი (FCF):

$$FCF(v, v_0) = \left| \int \psi_v(r) \psi_{v_0}(r) dr \right|^2. \quad (2.4.2)$$

სადაც $\psi_{v_0}(r)$ და $\psi_v(r)$ - ვიბრაციული ტალღური ფუნქციებია შესაბამისად ძირითად და აგზნებულ ელექტრონულ მდგომარეობებში, r – ბირთვული კოორდინატებია.

მოცემული ელექტრონული გადასვლისთვის, ინტენსივობა $I(\lambda)$ - შეიძლება დავუკავშიროთ ვიბრაციულ გადასვლებს v - ვიბრაციული დონიდან v' ვიბრაციულ დონეზე.

$$I(v, \lambda) \propto FCF(v, v_0) \cdot g(\lambda), \quad (2.4.3)$$

სადაც $g(\lambda)$ - ფუნქცია ითვალისწინებს ყველა სხვა ფაქტორებს, რომლებიც გავლენას ახდენენ ინტენსივობაზე, როგორცაა: ელექტრონული გადასვლის დიპოლური მომენტი და მდგომარეობების სიმკვრივე.

მაშასადამე CCD დეტექტორის მიერ დეტექტირებული ელექტრონული სიგნალი (2.4.3)-ის (2.4.1)-ში გათვალისწინების შემდეგ, მიიღებს სახეს:

$$S(v, \lambda) \propto FCF(v, v_0) \cdot g(\lambda) \cdot QE(\lambda). \quad (2.4.4)$$

ცხადია სხვა CCD მახასიათებლები ასევე შეიძლება იყოს მოდელში. მაგალითად, სიბნელის დენი, წაკითხვის ხმაური და CCD-ს მატრიცის წრფივობა გავლენას მოახდენს საბოლოო რეგისტრირებულ სიგნალზე. ზოგადად დეტექტირებული სიგნალი შეიძლება ასე ავსახოთ:

$$S_{total}(v, \lambda) = S(v, \lambda) \cdot D \cdot NOISE, \quad (2.4.5)$$

სადაც $NOISE$ - ხმაური განისაზღვრება (1.8.3) ფორმულით. CCD დეტექტორის წრფივობა უზრუნველყოფს, იმას, რომ დარეგისტრირებული ელექტრული სიგნალი პირდაპირპროპორციულია სინათლის ინტენსივობის CCD-ის დინამიური დიაპაზონისთვის.

კვანტური ეფექტურობის ან მგრძნობელობის ფუნქცია კონკრეტული CCD-სთვის, როგორცაა StellarNet-ის CCD-დეტექტორი BlackComet სპექტრომეტრში, ჩვეულებრივ უზრუნველყოფილი იქნება მწარმოებლის მიერ. ის ჩვეულებრივ იცვლება ტალღის სიგრძით და შეიძლება იყოს საკმაოდ რთული, ხშირად საჭიროებს კალიბრაციას ცნობილი სპექტრის მეორე სინათლის წყაროსთან შედარებით. BlackComet სპექტრომეტრის CCD-ის კვანტური ეფექტურობის მრუდები დაახლოებით გაუსიანი ფორმისაა, პიკს აღწევს იქ, სადაც CCD ყველაზე მგრძნობიარეა და იკლებს მისი დიაპაზონის კიდეებისკენ.

ვთქვათ Black-Comet სპექტრომეტრში CCD მგრძნობელობის ფუნქცია მოიცემა გაუსიანი ფორმით:

$$g(\lambda) = \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{2\sigma_\lambda^2}\right]$$

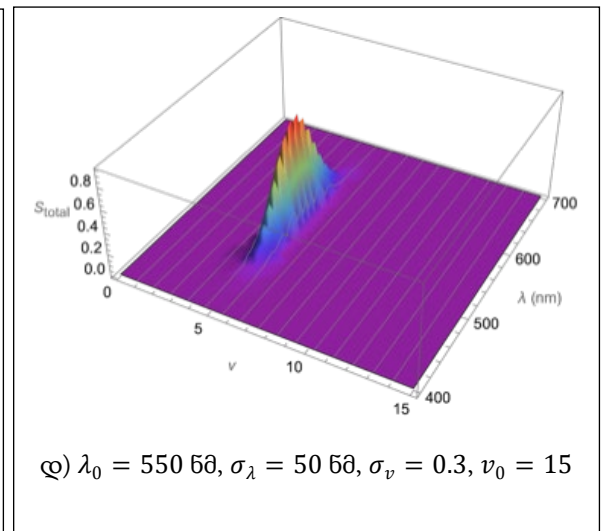
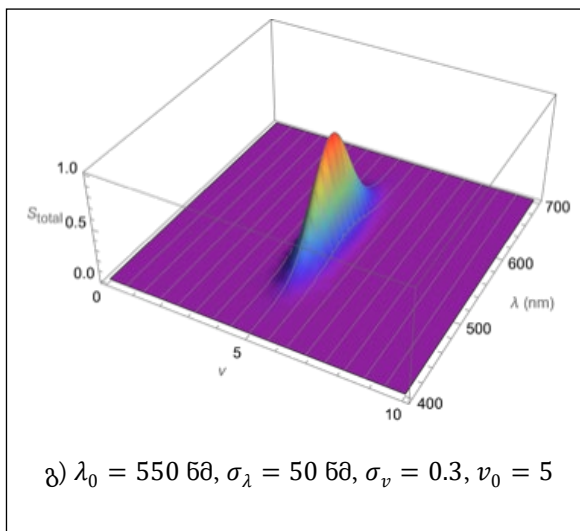
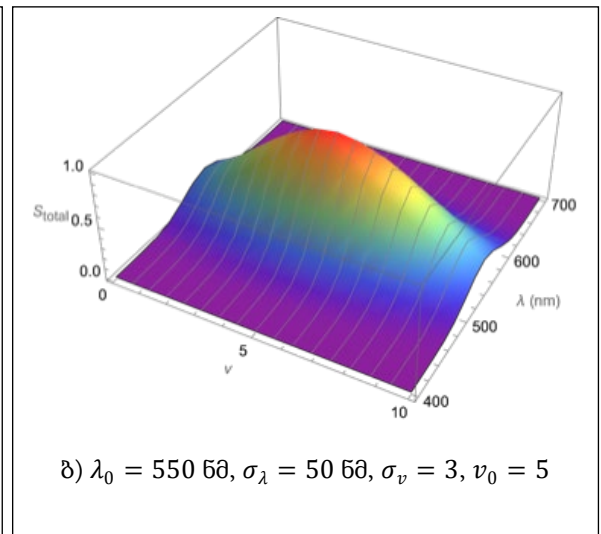
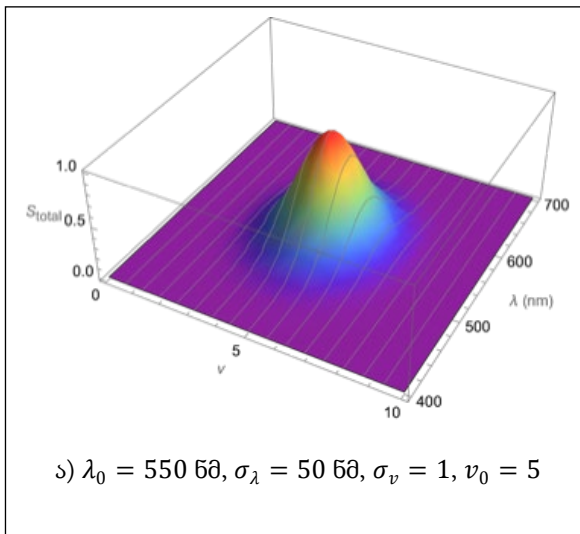
სადაც, λ_0 - ტალღის სიგრძეა (ნმ-ში), სადაც CCD მგრძნობელობა პიკს აღწევს, λ - ტალღის სიგრძეა (ნმ), σ_λ - CCD მგრძნობელობის მრუდის სტანდარტული გადახრა.

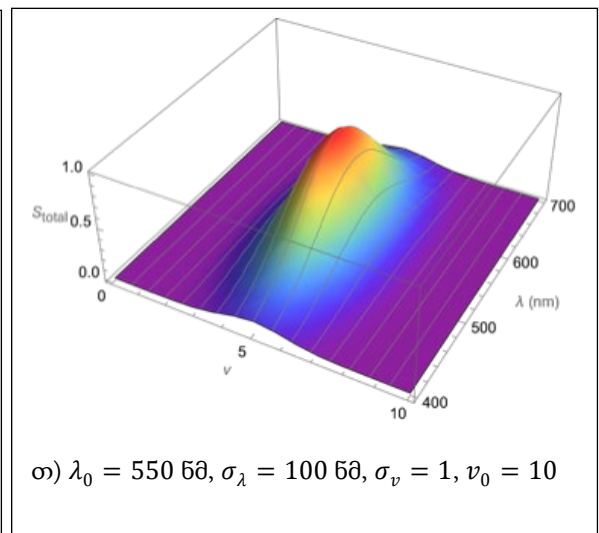
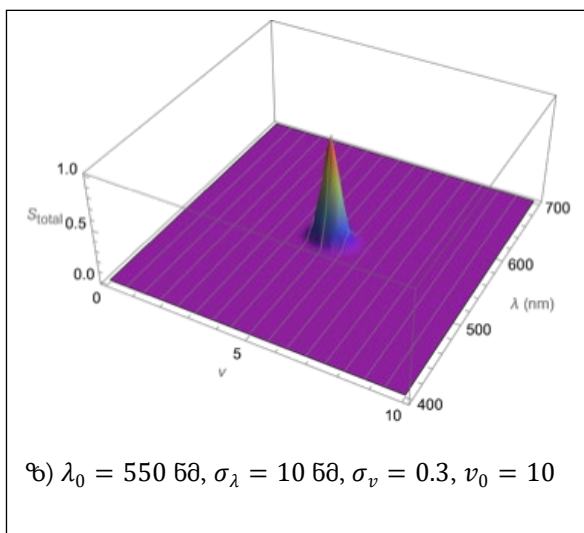
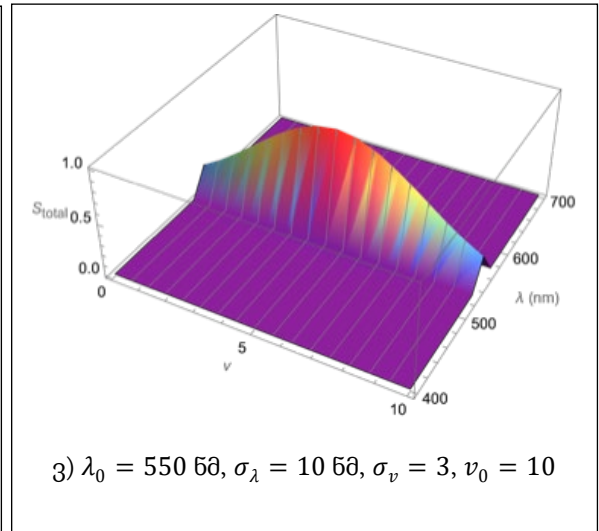
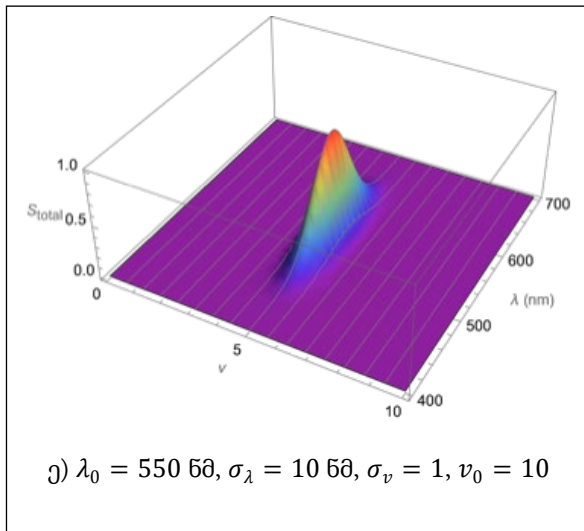
გამოთვლების სიმარტივისათვის ვისარგებლოთ ფრანკ-კონდონის ფაქტორის გამარტივებული გამოსახულებით:

$$FCF(v, v_0) = \exp\left[-\frac{(v - v_0)^2}{2\sigma_v^2}\right]$$

v_0 – შეესაბამება CCD დეტექტორის ვიზრაციის გავრცელების საწყის წერტილს, ის ფაქტიურად შეესაბამება სინათლის ფოტონის დაცემის წერტილს, σ_v – ასახავს ვიზრაციული ტალღის გავრცელების სიგანეს. (2.4.4) და (2.4.5) ფორმულების საშუალებით CCD დეტექტორის სიგნალის დეტექტირების მგრძობელობა შეიძლება გამოვთვალოთ გამარტივებული ფორმულით:

$$S_{total}(v, \lambda) = FCF(v, v_0) \cdot g(\lambda). \quad (2.4.6)$$





ნახ.2.4.1. CCD დეტექტორის მიერ დეტექტირებული სიგნალის 3D განაწილება ვიბრაციული ტალღური რიგების $\nu = 1 \dots 15$ და ტალღის სიგრძის $\lambda = 400 - 700 \text{ ნმ}$ მიხედვით

ნახ.2.4.1 წარმოდგენილი თითოეული 3D გრაფიკი გვიჩვენებს მკაფიო პიკს, რომელიც შეესაბამება CCD-ის მიერ გამოვლენილ ყველაზე ინტენსიურ სიგნალს. ამ პიკის შესატყვისი ტალღის სიგრძე 550 ნმ-ის ტოლია BlackComet სპექტრომეტრის CCD მახასიათებლის შესაბამისად. ამავე დროს, პიკს შეესაბამება ვიბრაციის დონე უმაღლესი ფრანკ-კონდონის ფაქტორით. როცა CCD დეტექტორზე სხივის დაცემის წერტილის კოორდინატები იცვლება $\nu_0 = 1 \dots 10$ შუალედში, პიკი არის ვიწრო, რაც მიუთითებს კონკრეტულ ვიბრაციულ დონეზე ელექტრონული გადასვლების მაღალ ალბათობაზე.

$\nu_0 = 1$ და $\nu_0 = 10$ მნიშვნელობებისას გვაქვს მნიშვნელოვანი გადაფარვა საწყის და საბოლოო ელექტრონული დონეების ვიბრაციულ ტალღურ ფუნქციებს შორის.

ვიბრაციის განაწილების სიგანის σ_v ცვლილება გვიჩვენებს, რომ უფრო დიდი ვიბრაციული სიგანისას (მაგალითად $\sigma_v = 3$) პიკი გაინრთხმევა რხევითი კვანტური რიცხვის ღერძის გასწვრივ. ეს გაგანიერება უნდა მიუთითებდეს უფრო მაღალ ტემპერატურაზე და თანახმად ბოლცმანის განაწილებისა, უფრო მეტი ვიბრაციული დონის დასახლებაზე, ან შეიძლება ასახავდეს მოლეკულური პოტენციალის არაჰარმონიულობას. როცა ვიბრაციის განაწილების სიგანე მცირეა ($\sigma_v = 0.3$), შეიმჩნევა უფრო მკვეთრი პიკები, როგორც ვიბრაციულ კვანტურ რიცხვში, ასევე ტალღის სიგრძის განზომილებაში, რაც გულისხმობს, რომ CCD-ს აქვს მაღალი მგრძობელობის ვიწრო დიაპაზონი და გადასვლები უფრო შერჩევითია.

ნახ.2.4.1 ვ) ნახაზიდან ჩანს, რომ როცა $\sigma_v = 3$, $\nu_0 = 10$, შეინიშნება მრავალი პიკი, რაც გვამღევეს იმ ვარაუდის საფუძველს, რომ CCD ასახავს მრავალი ვიბრაციული გადასვლის შესაძლებლობას. ეს შეიძლება მიუთითებდეს, რომ მოლეკულურ სისტემას აქვს რამდენიმე ვიბრაციული დონე მსგავსი გადასვლის ალბათობით და CCD საკმარისად მგრძობიარეა, რომ განასხვავოს ეს გადასვლები ტალღის სიგრძის დიაპაზონში.

უფრო მაღალი σ_g მნიშვნელობისას CCD იჭერს გადასვლების უფრო ფართო დიაპაზონს, რაც სასარგებლოა რთული სპექტრების ანალიზისთვის. და პირიქით, უფრო დაბალი σ_g მნიშვნელობისას CCD ახორციელებს შერჩევით დეტექტირებას, რაც შეიძლება მომგებიანიც კი იყოს კონკრეტული გადასვლების იზოლირებისთვის.

ν_0 -ის შერჩევა გავლენას ახდენს სიგნალის პიკის გასწორებაზე ვიბრაციულ დონეებთან. კერძოდ, დაბალი ν_0 - ნიშნავს, რომ მოლეკულას აქვს ძლიერი გადასვლის ალბათობა ქვედა ვიბრაციული დონიდან, ხოლო უფრო მაღალი ν_0 -ისას კი პირიქით სავარაუდოა გადასვლები მაღალი ვიბრაციული დონეებიდან.

მოკლედ, გრაფიკული ანალიზი მიუთითებს, რომ ორივე მოლეკულური მახასიათებლები (წარმოდგენილი ფრანკ-კონდონის ფაქტორებით) და CCD-ის ტალღის სიგრძის მგრძობელობის პროფილი გადამწყვეტ როლს თამაშობს აღმოჩენილი სიგნალის ინტენსივობის განსაზღვრაში. ნახ.2.4.1-ზე წარმოდგენილი გრაფიკები უნიკალურია და შესაძლებელია გამოყენებული იქნას მოლეკულური სპექტროსკოპიისა და CCD-ის აღმოჩენის შესაძლებლობებს შორის კორელაციის

გაგებაში, რაც საბოლოოდ ხელს შეუწყობს სპექტროსკოპიული გაზომვების ოპტიმიზაციას და ექსპერიმენტების სწორად დაგეგმვას.

როდესაც მოლეკულები შთანთქავენ ან ასხივებენ სინათლეს, მათ შეუძლიათ გაიარონ გადასვლა სხვადასხვა ენერგეტიკულ მდგომარეობას შორის. ფრანკ-კონდონის პრინციპი უზრუნველყოფს სპექტრული ხაზების ინტენსივობის პროგნოზირების საშუალებას შთანთქმის და ემისიის სპექტრებში. მასში ნათქვამია, რომ ელექტრონული გადასვლები იმდენად სწრაფად ხდება ბირთვულ მოძრაობასთან შედარებით, რომ ბირთვები ფაქტობრივად სტაციონარულია გადასვლის დროს. ამრიგად, ყველაზე ინტენსიური გადასვლები არის ისეთები, სადაც საწყისი და საბოლოო ელექტრონული მდგომარეობების ვიბრაციულ ტალღურ ფუნქციებს აქვთ უდიდესი გადაფარვა. ფრანკ-კონდონის ფაქტორები არის რიცხვითი მნიშვნელობები, რომლებიც წარმოადგენენ ვიბრაციულ დონეებს შორის გადასვლის ალბათობას სხვადასხვა ელექტრონულ მდგომარეობაში. ეს ფაქტორები დამოკიდებულია საწყისი და საბოლოო მდგომარეობების ვიბრაციული ტალღური ფუნქციების გადაფარვის ინტეგრალის კვადრატზე.

სპექტროსკოპიაში CCD სენსორი გამოიყენება ნიმუშიდან გამოსხივებული ან შთანთქმული სინათლის სპექტრული განაწილების დასაფიქსირებლად. კვანტური ეფექტურობა (QE) განსაზღვრავს თუ რამდენად იჭერს CCD სინათლეს და ის შეიძლება განსხვავდებოდეს სინათლის ტალღის სიგრძის მიხედვით.

როდესაც ნიმუში დასხივებულია შუქით სპექტროსკოპიულ ექსპერიმენტში, გამოსხივებული ან შთანთქმის სინათლის ინტენსივობა სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე მოდულირებულია ფრანკ-კონდონის ფაქტორებით, რაც შემდეგ გამოვლინდება CCD-ის მიერ. მაშასადამე, CCD-ის მიერ დაფიქსირებულ მთლიან სიგნალზე ($S_{total}(v, \lambda)$) გავლენას მოახდენს ნიმუშის როგორც შინაგანი სპექტრული თვისებები (კვანტური მექანიკით და ფრანკ-კონდონის პრინციპით), ასევე CCD-ის ტექნიკური მახასიათებლებით (როგორცაა მისი QE სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე).

დისერტაციის II თავის ძირითადი შედეგები

დისერტაციის მეორე თავი ეძღვნება ელექტრონული გადასვლებისა და ვიბრაციული პროცესების თეორიულ ანალიზს, ფრანკ-კონდონის პრინციპის გამოყენებას სპექტროსკოპიულ აპლიკაციებში.

დისერტაციის მეორე თავში რთული გამოკვლევის საშუალებით, განხილულია ფუნდამენტური პრინციპები, რომლებიც მართავენ ამ გადასვლებს და აჩვენებენ, თუ როგორ მოქმედებს ფრანკ-კონდონის პრინციპი მოლეკულური სპექტროსკოპიის სფეროში. ანალიზი არა მხოლოდ ასახავს დიატომურ მოლეკულებში ელექტრონული გადასვლების ძირითად მექანიკას, არამედ ახორციელებს n -განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის ინტეგრალების კომპლექსურ დომენს, სთავაზობს ყოვლისმომცველ გამოთვლის მიდგომას, რომელიც აძლიერებს სპექტრული ქცევების გაგებას.

ეს თავი არა მხოლოდ ხელს უწყობს აკადემიურ დიალოგს სპექტროსკოპიულ ანალიზზე, არამედ ხაზს უსვამს თეორიული ჩარჩოების კრიტიკულ მნიშვნელობას სპექტრული შედეგების ინტერპრეტაციასა და პროგნოზირებაში, რითაც ქმნის მყარ საფუძველს ამ სფეროში მომავალი ექსპერიმენტული და ანალიტიკური მცდელობებისთვის.

თავი III. CCD მახასიათებლების მოდელირება ზოგიერთ პრაქტიკულ აპლიკაციაში

§3.1. კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორის მოდელი სტიმულირებული და სპონტანური გამოსხივების შეფასებისას

ფლუორესცენტულმა სპექტროსკოპიამ მიაღწია წინსვლას, მათ შორის ლაზერული წყაროების გამოყენების ჩათვლით, რამაც განაპირობა სინათლის წყაროების გაუმჯობესება და უფრო მაღალი გარჩევადობის სპექტრომეტრების შექმნა და მათი სხვადასხვა აპლიკაციებში გამოყენების ზრდა. ფლუორესცენტული სპექტროსკოპიის გამოყენება გარემოს ხარისხის შეფასებაში არის ერთ-ერთი ისეთი სფერო [117].

ხაზგასასმელია ერთ-ერთი თანამედროვე მეთოდი ლაზერით ინდუცირებული ფლუორესცენცია (LIF), რომელიც გავრცელებული მეთოდია თანამედროვე ფლუორესცენტული სპექტროსკოპიაში. ლაზერების წყაროები უფრო ინტენსიური და რაც მთავარია ორიენტირებული სინათლის წყაროებია საკვლევი ნიმუშისადმი, რამაც შეიძლება გამოიწვიოს უფრო მაღალი SNR ჩვეულებრივი სინათლის წყაროებთან შედარებით [18].

გარდა ამისა, გაიზარდა სამეცნიერო განხილვები ფლუორესცენციის სტანდარტებისა და მეთოდების შემუშავების შესახებ ქიმიური და კლინიკური ანალიზისას. ამ სტანდარტების გაანალიზება მნიშვნელოვან ინფორმაციას იძლევა SNR-ის დაკალიბრებისას ჩვენი სპეციფიკური პირობების მიხედვით, მაგალითად, ღვინის ნიმუშის ან სისხლის (ერიტროციტების) ნიმუშის კვლევისას [23, 108].

ახალი სპექტროსკოპიული მეთოდების შემუშავება და გამოყენება დეტალური და ტექნიკურია და ხშირად სპეციფიკურია. სრული იმპლემენტაციისთვის საჭირო იქნება სპეციფიკური სპექტროსკოპიული ტექნიკის სიღრმისეული ცოდნა და BlackComet სპექტრომეტრის CCD-ის შესახებ არსებული ინფორმაციის ხელმისაწვდომობა.

ღვინის ფლუორესცენციული სპექტროსკოპიისთვის BlackComet სპექტრომეტრის გამოყენებისას, გასათვალისწინებელია, რომ მას აქვს დინამიური დიაპაზონი 2000:1 და მაღალი სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა 1000:1. იმის გათვალისწინებით, რომ

BlackComet სპექტრომეტრს აქვს 1 ნმ-ზე ნაკლები ოპტიკური გარჩევადობა 25 მკმ მესერით და ეფექტურად მუშაობს UV-VIS-NIR დიაპაზონში (200-1080 ნმ ან 220-1100 ნმ სხვადასხვა მოდელებისთვის), შესაძლებელია ვმართოთ აგზნება/ემისური მონაცემები. გამოვყოთ აგზნების ტალღის სიგრძე, რომელიც შეესაბამება ღვინოში შემავალი ნაერთების შთანთქმის პიკს.

აღსანიშნავია, რომ BlackComet სპექტრომეტრი იკვებება პირდაპირ კომპიუტერის USB პორტიდან, მას აქვს შიდა მეხსიერება წინასწარ დაყენებული კალიბრაციისთვის, რაც გაამარტივებს პროცესს და მონაცემთა შეგროვებას. სპექტრომეტრი ასევე იძლევა ურთიერთშემცვლელ მესერებს, რაც უზრუნველყოფს მოქნილობას გარჩევადობისა და მგრძობელობის კორექტირებისთვის ჩვენი ფლუორესცენციის გაზომვის საჭიროებებზე დაყრდნობით. CCD მატრიცა საკმაოდ მდგრადია შემთხვევითი ხმაურისთვის. ჩვენ შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ სისტემის მაღალი ეფექტურობა შემთხვევით ხმაურს უმნიშვნელოს ხდის ნიმუშის ანალიზისას [41, 58-59, 61, 97].

ამ თანამედროვე მიდგომების შესახებ ყოვლისმომცველი დეტალები, ასახულია შემდეგ წყაროებში [105-107].

როგორც ცნობილია, კვანტური მექანიკა აღწერს ენერგიას, როგორც კვანტიზებულს, რაც იმას ნიშნავს, რომ ატომები და მოლეკულები არსებობენ დისკრეტულ ენერგეტიკულ მდგომარეობებში. ფოტონებს, რომლებიც წარმოადგენენ სინათლის კვანტებს, შეუძლიათ ურთიერთქმედება ატომებთან, რაც იწვევს ელექტრონულ გადასვლებს ამ მდგომარეობებს შორის. ენერგიათა სხვაობა ორ ენერგეტიკულ მდგომარეობას შორის გადასვლა $|0\rangle$ დან $|1\rangle$ -ზე, რომლებსაც შეესაბამება ენერგიები, შესაბამისად: E_0 და E_1 , აღიწერება პლანკის რეზონანსული თანაფარდობით:

$$\hbar\omega = E_1 - E_0. \quad (3.1.1)$$

ამ რეზონანსული პირობის დაკმაყოფილებისას შესაძლებელია სამი სახის გადასვლა:

- **შთანთქმა:** ატომი გადადის უფრო დაბალი ენერგიის მდგომარეობიდან უფრო მაღალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში ფოტონის შთანთქმით.

• **სტიმულირებული ემისია:** დაცემული ფოტონი აიძულებს ატომს გადავიდეს უფრო მაღალი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში, ათავისუფლებს რა იმავე ენერგიის ფოტონს.

• **სპონტანური ემისია:** ატომი სპონტანურად გადადის უფრო მაღალი ენერგეტიკული მდგომარეობიდან დაბალ ენერგეტიკულ მდგომარეობაში და ასხივებს ფოტონს.

ამ პროცესების ტემპები შეიძლება აღწერილი იქნას შემფოთების თეორიის გამოყენებით, რომელსაც მივყავართ აინშტაინის კოეფიციენტებამდე შთანთქმისა და სტიმულირებული ემისიისათვის:

$$W_{abs} = W_{stim\ em} = \frac{4\pi^2}{3\hbar^2} \rho(\omega) |\langle 0|\mu|1\rangle|^2 \quad (3.1.2)$$

სადაც μ - ელექტრული დიპოლის მომენტის ოპერატორია, $\rho(\omega)$ - გამოსხივების სპექტრული სიმკვრივეა ω სიხშირეზე. სპონტანური გამოსხივების სიჩქარე შეიძლება განვსაზღვროთ გამოსახულებით:

$$W_{spont\ em} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\langle 0|\mu|1\rangle|^2 \quad (3.1.3)$$

გასათვალისწინებელია, რომ სპონტანური ემისიის სიჩქარე დამოკიდებულია სიხშირის კუბზე, რაც მიუთითებს მის მნიშვნელობაზე მაღალი ენერგიის (მაგ., ოპტიკური) გადასვლებისთვის.

ოსცილატორის ძალა:

$$f_{0,1} = \frac{2m_e\omega}{3\hbar e^2} |\langle 0|\mu|1\rangle|^2 \quad (3.1.4)$$

უგანზომილებო პარამეტრია, რომელიც განსაზღვრავს ორ ენერგეტიკულ მდგომარეობას შორის გადასვლის ძალის ზომას. m_e და e - ელექტრონის მასა და მუხტია. $f_{0,1}$ - ოსცილატორის ძალა მოთავსებულია 0-სა და 1-ს შორის დასაშვები გადასვლებისათვის.

კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორის მოდელი კარგად აღწერს ველში ფოტონების ქცევას. ფოტონის ანჰილაციის (ფოტონის რიცხვის ერთით შემცირება) ალბათობა შეიძლება ჩავწეროთ გამოსახულებით:

$$|\langle n_\omega - 1 | a_\omega | n_\omega \rangle|^2 = n_\omega. \quad (3.1.5)$$

ხოლო ფოტონის წარმოქმნის ალბათობა (ფოტონის რიცხვის ერთით გაზრდა) განისაზღვრება გამოსახულებით:

$$|\langle n_\omega + 1 | a_\omega^+ | n_\omega \rangle|^2 = n_\omega + 1. \quad (3.1.6)$$

სადაც, a_ω და a_ω^+ - არის ფოტონის ანჰილაციისა და წარმოქმნის ოპერატორები, ხოლო n_ω - ფოტონების რიცხვია.

§3.2. ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის სიმძლავრის გადაცემის კოეფიციენტის შეფასება

განვიხილოთ შემთხვევა, როცა სინათლე ზემოქმედებს ბიოლოგიურ სტრუქტურაზე, მაგალითად სისხლის ერითროციტების ან სხეულის კანის მემბრანის პოლარიზებულ მოლეკულებზე. ამ შემთხვევაში დომინანტური ეფექტია სინათლის გაბნევა და შთანთქმა. ყველაზე მნიშვნელოვანი პარამეტრი არის სიმძლავრის სიმკვრივე $\phi(r, Z)$ (მვტ/მმ²), რომელიც წარმოადგენს ენერჯის წყაროს ფუნქციას. დაცემული სხივის ოპტიკური სიმძლავრე აღვნიშნოთ P (ვტ)-თი, ხოლო სხივის დაცემის წერტილში, სხივის მიერ წარმოქმნილი ლაქის რადიუსი კი - R (მმ). გაბნეული გამოსხივების გავრცელება აღიწერება ფოტონების გადატანის განტოლებით [112]:

$$(\vec{S} \cdot \nabla) \vec{L}(r, \vec{S}) = \frac{d\vec{L}}{dS} = -\alpha_t L(r, \vec{S}) + \alpha_s \int_{4\pi} \vec{P}(\vec{S}, \vec{S}') \vec{L}(r, \vec{S}') d\vec{S}', \quad (3.2.1)$$

სადაც, $\vec{L}(r, \vec{S})$ (მვტ/მმ² სტრად) - სიკაშკაშის ცვლილების სიჩქარეა $r(x, y, z)$ - წერტილში, რომელიც \vec{S} მიმართულებაზე მდებარეობს. სინათლის დაცემის მიმართულებაა \vec{S}' .

$$\alpha_t = \alpha_s + \alpha_a. \quad (3.2.2)$$

α_t (მმ⁻¹) - მილევის კოეფიციენტი, α_s - გაბნევის კოეფიციენტი, ხოლო α_a - შთანთქმის კოეფიციენტი. $\vec{P}(\vec{S}, \vec{S}')$ - ფაზური ფუნქციაა.

ამოვხსნათ (3.2.1) ფოტონის გადატანის განტოლება $\vec{L}(r, \vec{S})$ მიხედვით, რომელიც წარმოადგენს სიკაშკაშეს $r(x, y, z)$ წერტილში \vec{S} მიმართულებაზე, რისთვისაც საჭიროა

გავაინტეგრალთ $\vec{L}(r, \vec{S})$ სხეულოვან 4π კუთხის მიხედვით, რომ მივიღოთ სრული ინტენსივობა $I(r)$ $r(x, y, z)$ წერტილში. შემდეგ განვსაზღვროთ $\phi(r, Z)$ სიმძლავრის სიმკვრივე სრული ინტენსივობის $I(r)$ და სხივის განიკვეთის ფართობის σ საშუალებით. სხივის განიკვეთის ფართობი დამოკიდებულია სინათლის წყაროს მიერ ნიმუშზე დაცემის შედეგად მიღებული ლაქის R რადიუსზე. დავამყაროთ კავშირი ოპტიკურ P სიმძლავრესა და $\phi(r, Z)$ სიმძლავრის სიმკვრივეს შორის. ფოკუსირებულ სხივში ოპტიკური სიმძლავრე განაწილებულია ლაქის მთელ ფართობზე. თუ ჩავთვლით, რომ ლაქის ფართობი (σ_{total}) წარმოადგენს წრეს R რადიუსით, გვაქვს:

$$\phi(r, Z) = \frac{P}{\sigma_{total}} \sim \frac{P}{\pi R^2}. \quad (3.2.3)$$

(3.2.1) განტოლება იხსნება უმარტივესი იზოტროპული ფაზური ფუნქციისას: $P = 1/(4\pi)$. დიპოლიდან შედარებით დიდ მანძილზე გავცელების მიმართულებისადმი მართობულად მიმართული ველი მანძილის მიხედვით $1/r$ ეცემა. გაბნევის ამპლიტუდა განისაზღვრება ტოლობით:

$$f(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int e^{i(\vec{k}\vec{r})} V(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.2.3)$$

გაბნევის ამპლიტუდა $f(\theta, \varphi)$ დამოკიდებულია $V(\vec{r})$ პოტენციურ ენერგიაზე და გაბნევის θ კუთხეზე. როგორც ვხედავთ, გაბნევის ამპლიტუდა წარმოდგენილია ბრტყელი ტალღების ინტეგრალური ჯამის სახით. ჩვენ შეგვიძლია გავშალოთ ბრტყელი ტალღები ლეჟანდრეს პოლინომის მიხედვით და ვიპოვოთ გაბნევის ამპლიტუდისა და დიფერენციალური გაბნევის განიკვეთის გამოსახულება:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta} \cdot \sin(\delta) \cdot L_l(\cos(\theta)) \right|^2. \quad (3.2.4)$$

k – დაცემული ფოტონების ტალღური რიცხვია, l - შეესაბამება გაბნეული ნაწილაკების ორბიტალურ კუთხურ იმპულსს, რომლითაც ჯამდება თითოეული ნაწილობრივი ტალღა და მიიღება ჯამური გაბნევის შედეგი. $(2l+1)$ - წარმოიქმნება l -ნაწილობრივი ტალღის გადაგვარების შედეგად, რაც აიხსნება იმით, რომ ყოველი l -ის მნიშვნელობას შეესაბამება მაგნიტური კვანტური რიცხვი $m = (2l+1)$, თითოეული შეესაბამება

სივრცეში განსხვავებულ ორბიტალურ ორიენტაციას. δ - ფაზური ძვრის გამოწვეული პოტენციალი, L_l - ლეჟანდრის მრავალწევრია, θ - გაბნევის კუთხეა.

$V(\vec{r})$ - პოტენციალი გავლენას ახდენს δ ფაზურ ძვრებზე. სრული განივი კვეთა შეიძლება გამოთვლილი იქნას (3.2.4) ფორმულიდან ინტეგრირების გზით:

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} (\sin(\delta_l))^2 \right|. \quad (3.2.5)$$

ოპტიკური თეორემა აკავშირებს სრულ განივ კვეთას გაბნევის ფრონტალურ $f(\theta = 0)$ ამპლიტუდასთან:

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \text{Im} f(\theta = 0). \quad (3.2.6)$$

ეს ფორმულა ადგენს კავშირს ფრონტალურ გაბნევის ამპლიტუდის წარმოსახვით ნაწილსა და სრულ განივკვეთას შორის.

მოკლედ, სიმძლავრის სიმკვრივე არის ერთეული ფართობის სიმძლავრე, რომელიც პირდაპირ გაზომვად ფიზიკურ სიდიდეს წარმოადგენს, ხოლო სიმძლავრის კოეფიციენტი უფრო რთული ფუნქციაა, რომელიც ადგენს, თუ როგორ მოქმედებს სიმძლავრის სიმკვრივეზე სინათლის გარემოსთან ურთიერთქმედება კონკრეტულ პირობებში.

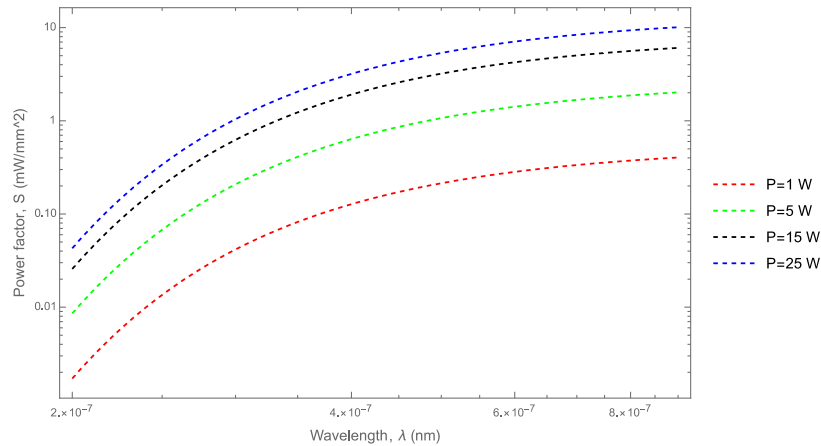
ზემოთ მოყვანილი გამოსახულებები საშუალებას გვაძლევს გამოვთვალოთ ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის სიმძლავრის გადაცემის კოეფიციენტი [115]:

$$S(\lambda, P, \delta, d) \sim \frac{P}{4\pi\delta^2} \exp \left[- \left(\frac{\sin(0.5)}{\lambda} \right)^2 + \frac{d}{\delta} \right], \quad (3.2.7)$$

სადაც, P - სინათლის წყაროს ოპტიკური სიმძლავრეა λ - ტალღის სიგრძეა, δ - არის ბიოლოგიური ქსოვილის ოპტიკური სისქე, d - ბიოლოგიურ ქსოვილში სინათლის შეღწევის სიღრმეა. ექსპონენციალური ნაწილი მიუთითებს, რომ სიმძლავრის კოეფიციენტი $S(\lambda, P, \delta, d)$ მცირდება გაბნევის კუთხისა და სიღრმის მატებასთან ერთად, მაგრამ იზრდება უფრო გრძელი ტალღის სიგრძისაკენ.

გამოთვლების გამარტივების მიზნით გაკეთებულია რამდენიმე დაშვება: გათვალისწინებულია, რომ გაბნევა არის დრეკადი, უგულებელყოფილია

მრავალჯერადი გაზნევის ეფექტი და სინათლის ნაკადის სისქე ისეთია, რომ ბიონაწილაკებს აქვთ განსაზღვრული იმპულსი.



ნახ.3.2.1. ბიოლოგიურ სტრუქტურებში სინათლის სიმძლავრის კოეფიციენციენტის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძეზე log-log მასშტაბში, წყაროს სხვადასხვა ოპტიკური სიმძლავრისათვის

ნახ.3.2.1-ზე წარმოადგენილია სიმძლავრის კოეფიციენტის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძეზე სინათლის წყაროს სხვადასხვა ოპტიკური სიმძლავრის მნიშვნელობებისთვის (P). აბსცისთა ღერძზე გადაზომილია ტალღის სიგრძე ნანომეტრებში (ნმ). ორდინატთა ღერძზე გადაზომილია სიმძლავრის კოეფიციენტი (მვტ/მმ²).

მრუდები ზოგადად აჩვენებს, რომ ტალღის სიგრძის ზრდასთან ერთად, სიმძლავრის კოეფიციენტი მცირდება. ბიოლოგიურ სტრუქტურას ნაკლები ენერგია მიეწოდება უფრო მაღალ ტალღის სიგრძეზე გაზნევის ზრდის გამო, ან შესაძლოა წყაროს მახასიათებლების გამო. ასევე შესაძენეია, რომ სიმძლავრის კოეფიციენტი იზრდება წყაროს ოპტიკური სიმძლავრის ზრდით, რაც მოსალოდნელი შედეგია.

აპლიკაციებში, ასეთი გრაფიკი შეიძლება გამოყენებულ იქნას სინათლის წყაროს სიმძლავრის პარამეტრების ოპტიმიზაციისას სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე, რათა მივაღწიოთ სასურველი სიმძლავრის კოეფიციენტს კონკრეტული აპლიკაციისთვის (როგორცაა, მაგალითად მიზნობრივი სინათლის თერაპია ან ანალიტიკური სპექტროსკოპია). log-log-ის სკალა გვეხმარება მნიშვნელობების ფართო დიაპაზონში არსებული შაბლონების გარჩევაში, რომელთა დაკვირვებაც რთული იქნება ხაზოვან მასშტაბში.

როგორც აღვნიშნეთ, ორატომიანი მოლეკულებისათვის ელექტრონული გადასვლები ხშირად ხდება ვიბრაციული, ხოლო იშვიათად ბრუნვითი ენერგიებით. ამიტომ ამ გადასვლებს აქვს შერჩევითი ხასიათი. თუმცა სითხეებში ბრუნვითი ენერგიები ხშირად უმნიშვნელოა, მოლეკულების სწრაფი მოძრაობის გამო, ამიტომ სითხეებში შესაძლოა განვიხილოთ მხოლოდ ვიბრაციული გადასვლები. პოტენციური ენერგიების მრუდები ძირითად და აგნებულ ენერგეტიკულ დონეებზე და მასთან დაკავშირებული ვიბრაციული ტალღური ფუნქციები გვაძლევს მახასიათებელ ვიბრაციულ სპექტრებს.

§3.3. CCD სენსორის მგრძობელობის შეფასება ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას

დაწყვილებული მუხტის მოწყობილობები (CCD) მოქმედებს იმ პრინციპით, რომ ამოიცნოს და დაამუშავოს შუქი, რაც ბიოლოგიური ქსოვილების შემთხვევაში დაკავშირებულია $S(\lambda, P, \delta, d)$ სიმძლავრის კოეფიციენტთან, რომელიც აღწერს ოპტიკური გამოსხივების გადაცემას ბიოლოგიურ ქსოვილში. სიმძლავრის კოეფიციენტი $S(\lambda, P, \delta, d)$ გავლენას ახდენს ფოტონების იმ რაოდენობაზე, რომლებიც აღწევს CCD -სენსორამდე. ბიოლოგიურ ქსოვილთან სინათლის ურთიერთქმედება ცვლის CCD-ს კვანტურ ეფექტურობას (QE). CCD-სენსორის რეაქცია ასევე დამოკიდებულია სილიციუმის (ან სხვა ნახევარგამტარული მასალის) შთანთქმის კოეფიციენტზე და მის სისქეზე:

$$I_{absorbed}(\lambda, d) = I_{incident}(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)d_0} = I_0(\lambda)e^{-\sigma_{total} \cdot Nd_0}$$

$$\alpha(\lambda) = \sigma_{total} \cdot N$$

$\alpha(\lambda)$ – შთანთქმის კოეფიციენტია, რომელიც გამოისახება N - შთანთქმული ფოტონების რიცხვითა და σ_{total} განივკვეთით. d_0 – CCD-ს აქტიური ფენის სისქეა. სიმძლავრის კოეფიციენტი $S(\lambda, P, \delta, d)$ - განსაზღვრავს $\alpha(\lambda)$ - შთანთქმის კოეფიციენტს, რომელიც გვიჩვენებს თუ დაცემული სინათლის რა ნაწილს შთანთქავს ბიოლოგიური ქსოვილები.

CCD სენსორების სპექტრული გამომახილი - მისი მგრძობელობაა, რემელიც ტალღის სიგრძის ფუნქციაა და შეიძლება ჩავწეროთ შემდეგი სახით:

$$R(\lambda) = QE(\lambda) \cdot S(\lambda, P, \delta, d).$$

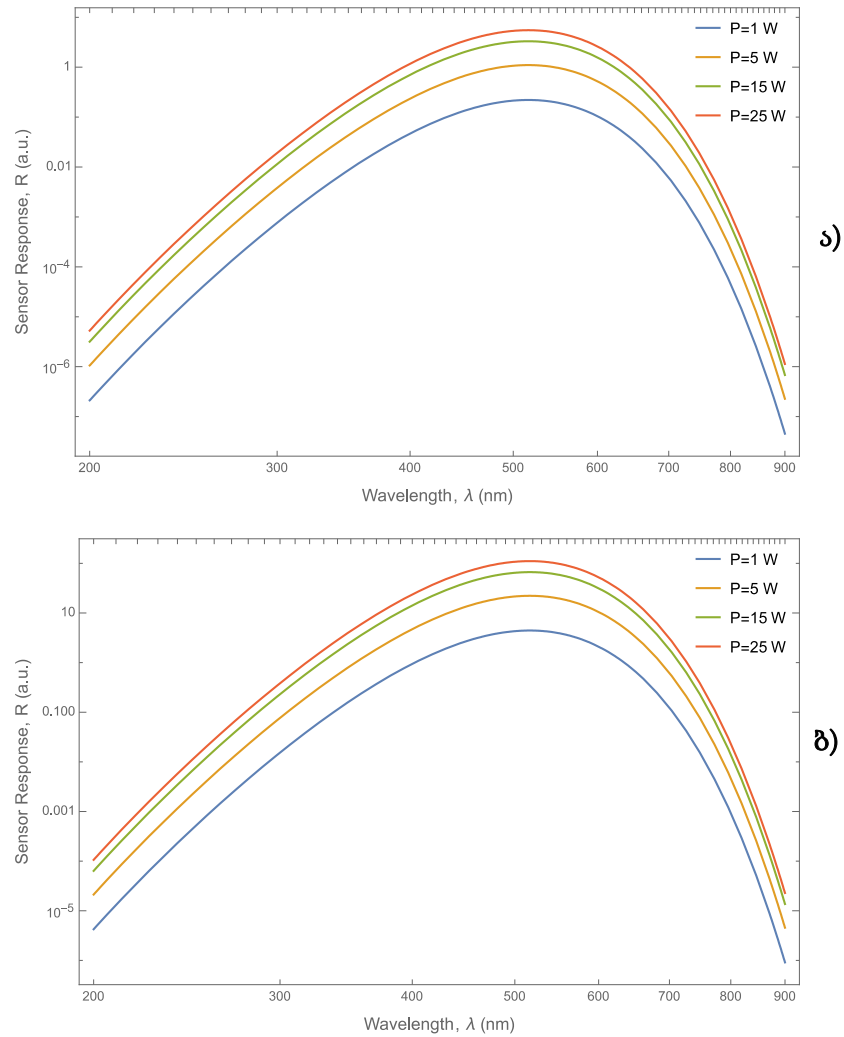
მაშასადამე, სიმძლავრის კოეფიციენტი $S(\lambda, P, \delta, d)$ პირდაპირ არის დაკავშირებული CCD სენსორის მგრძობელობაზე $R(\lambda)$, ანუ სპექტრულ გამომახილზე.

CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობა (QE) არის კრიტიკული პარამეტრი, რომელიც აღწერს რამდენად ეფექტურად შეუძლია სენსორს გარდაქმნას დაცემული ფოტონები ელექტრონებად. მიუხედავად იმისა, რომ QE თითოეული სენსორის ტექნოლოგიაზეა დამოკიდებული, არსებობს ზოგადი ტენდენციები, რომლებიც საშუალებას გვაძლევს თეორიულად შევაფასოთ QE დამოკიდებულება ტალღის სიგრძეზე (λ).

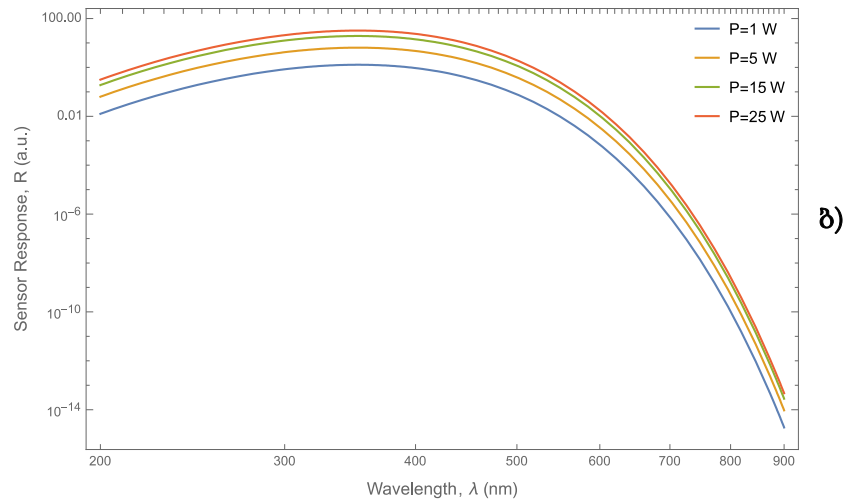
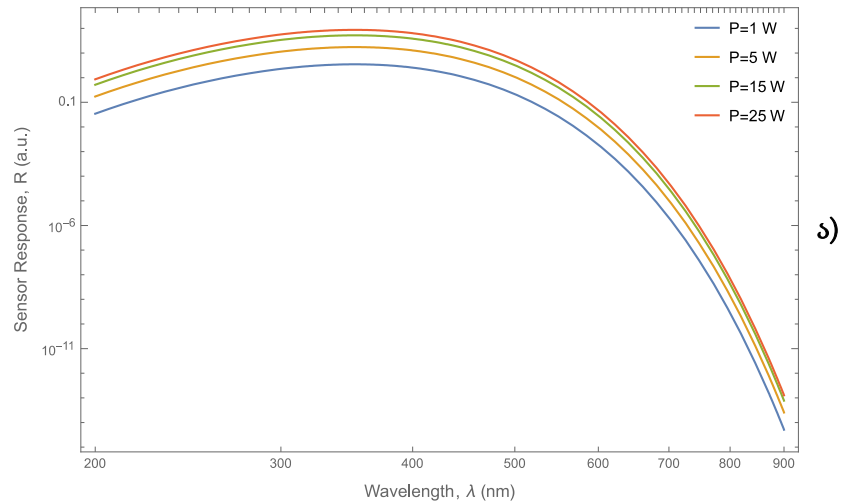
მრავალი CCD-სთვის, განსაკუთრებით ისეთებისათვის, რომლებიც გამოიყენება სამეცნიერო კვლევებში, კვანტური ეფექტურობა (QE) შეიძლება აღემატებოდეს 90%-ს ტალღის სიგრძის ხილულ დიაპაზონში. QE-ს, როგორც წესი, აქვს სპექტრული რეაგირების მრუდი, რაც იმას ნიშნავს, რომ ის იცვლება დაცემული სინათლის ტალღის სიგრძის მიხედვით. უფრო მოკლე ტალღის სიგრძისთვის (ულტრაიისფერი სხივების მიმართ), QE ხშირად მცირდება, რადგან ამ სიხშირის ფოტონები უფრო მეტად შთანთქმება სენსორის მასალის მიერ, მანამდე სანამ ისინი მიაღწევენ დაშლის რეგიონს, სადაც ისინი გარდაიქმნება ელექტრონებად. უფრო გრძელი ტალღის სიგრძის შემთხვევაში (ინფრაწითლისკენ), ფოტონებს შეუძლიათ გაიარონ გაღარიბების შრე შთანთქმის გარეშე, რითაც მცირდება მგრძობელობა ამ დიაპაზონშიც. სილიციუმზე დაფუძნებული CCD სენსორები, როგორც წესი, ამოიცნობენ ტალღის სიგრძეს, რომელიც აღემატება 1,1 მკმ-ს, რადგან ამ შემთხვევაში, ფოტონებს არ აქვთ საკმარისი ენერგია სილიციუმში ელექტრონ-ხვრელური წყვილის შესაქმნელად.

ნახ.3.3.1-ზე წარმოდგენილია CCD სენსორის მგრძობელობის $R(\lambda)$ (იგივე გამომახილის) ტალღის სიგრძეზე დამოკიდებულება სინათლის ბიოლოგიურ სტრუქტურაში გავლის შემდეგ, როცა ბიოლოგიური ქსოვილის ოპტიკური სისქე $\delta = 1$ მმ, ბიოლოგიურ ქსოვილში სინათლის შეღწევის სიღრმე კი იცვლება $d = 1$ მმ-დან

(ნახ.3.3.1 ა), $d = 2$ მმ-მდე (ნახ.3.3.1 ბ), სინათლის წყაროს სხვადასხვა P ოპტიკური სიმბლავრისას. მოდელირება შესრულებულია CCD-სენსორის კვანტური ეფექტურობის QE ტალღის სიგრძეზე გაუსური დამოკიდებულების შემთხვევაში, როცა სინათლის წყარო ცენტრირებულია $\lambda_0 = 500$ ნმ (ნახ.3.2.2) და $\lambda_0 = 300$ ნმ (ნახ.3.3.1) ტალღის სიგრძეზე.



ნახ.3.3.1. CCD-სენსორის მგრძობელობის $R(\lambda)$ დამოკიდებულება ტალღის სიგრძეზე სინათლის ბიოლოგიურ სტრუქტურაში გავლის შემდეგ, როცა $\delta = 1$ მმ, ა) $d = 1$ მმ, ბ) $d = 2$ მმ, სინათლის წყაროს სხვადასხვა P ოპტიკური სიმბლავრის შემთხვევაში, $\lambda_0 = 500$ ნმ



ნახ.3.3.2. CCD-სენსორის მგრძობელობის $R(\lambda)$ დამოკიდებულება ტალღის სიგრძეზე სინათლის ბიოლოგიურ სტრუქტურაში გავლის შემდეგ, როცა $\delta = 1$ მმ, ა) $d = 1$ მმ, ბ) $d = 2$ მმ, სინათლის წყაროს სხვადასხვა P ოპტიკური სიმძლავრის შემთხვევაში, $\lambda_0 = 300$ ნმ

ამ შედეგების გაანალიზების საფუძველზე შეგვიძლია გავაკეთოთ რიგი დასკვნები CCD-სენსორის მგრძობელობის (გამომახილის) გაზრდის შესაძლებლობის შესახებ:

1. QE მრუდი არის გაუსის მსგავსი ნიშნავს, რომ სენსორს აქვს პიკური მგრძობელობა კონკრეტულ ტალღის სიგრძეზე (რომელიც წარმოადგენს გაუსის ცენტრს). ჩვენს შემთხვევაში, სიმულაციისას QE პიკი ცენტრირებული იყო 500 ნმ-ზე და 300 ნმ-ზე. სენსორი ყველაზე ეფექტური იქნება დაცემული ფოტონების ელექტრონულ სიგნალად გადაქცევაში ამ პიკური ტალღის სიგრძეების მახლობლად.

2. ჩვენ შევისწავლეთ სენსორის რეაქცია სინათლის წყაროს სიმძლავრის სხვადასხვა მნიშვნელობებისას (1 ვტ, 5 ვტ, 15 ვტ და 25 ვტ). სიმძლავრის მატებასთან ერთად იზრდება სენსორის რეაქციაც. ეს იმიტომ ხდება, რომ უფრო მაღალი სიმძლავრის დონე ნიშნავს, რომ მეტი ფოტონი ეცემა სენსორს და შესაბამისად, გარდაიქმნება ელექტრონებად.
3. ბიოლოგიური ქსოვილში სინათლის შეღწევის სიღრმის (d) ცვლილება, ასევე ოპტიკური სიღრმის (δ) ცვლილება, ცხადია გავლენას ახდენს სენსორის გამომახილზე. ამ პარამეტრების ცვლილება ცვლის მრუდის მაქსიმუმს, რაც საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ, თუ რა სიღრმეზეა სენსორი მგრძნობიარე ბიოლოგიური ქსოვილიდან გამომავალი სიგნალის მიმართ.
4. როდესაც QE პიკი გადაინაცვლებს 500 ნმ-დან 300 ნმ-ზე, სენსორის ფარდობითი მგრძნობელობა იზრდება მოკლე ტალღის სიგრძეებზე გრძელ ტალღის სიგრძესთან შედარებით. თუ QE პიკი უფრო ახლოს იქნება ჩვენს ექსპერიმენტებში გამოყენებულ ტალღის სიგრძესთან (მაგ., თუ ჩვენი აპლიკაცია ძირითადად მოიცავს სინათლეს დაახლოებით 300 ნმ), მაშინ QE პიკი 300 ნმ იქნება უფრო მომგებიანი.
5. QE პიკის მიუხედავად, გრაფიკების საერთო ტენდენცია გვიჩვენებს, რომ CCD-ს მგრძნობელობა პიკის პერიფერიებში გრძელი ტალღის სიგრძეებისაკენ მნიშვნელოვნად მცირდება. ეს ტიპურია CCD სენსორებისთვის, სადაც რეაგირება ჩვეულებრივ მცირდება, როდესაც ტალღის სიგრძე შორდება QE პიკს, როგორც ულტრაიისფერი (UV), ასევე ინფრაწითელი (IR) სპექტრის ბოლოებისკენ.
6. აპლიკაციებისთვის, სადაც კონკრეტული ტალღის სიგრძეა საინტერესო (როგორცაა შთანთქმის სპეციფიური პიკის დამზერა სპექტროსკოპიაში), უნდა ავირჩიოთ სენსორი QE პიკით, რომელიც შეესაბამება ამ ტალღის სიგრძეს, რათა მაქსიმალურად გაიზარდოს მგრძნობელობა და სიგნალის ხარისხი.
7. სინათლის სხვადასხვა სიმძლავრისა და ოპტიკური თუ ბიოლოგიურ სრტუქტურებში სინათლის შეღწევის სიღრმის მიხედვით CCD-სენსორის მგრძნობელობის შეფასებით, შესაძლებელია ამ პარამეტრების ოპტიმიზაცია

კონკრეტული აპლიკაციებისთვის, როგორცაა მაგალითად ბიოლოგიურ ქსოვილების სპექტრული მახასიათებლების შეფასება ან ანალიტიკური გაზომვები.

8. დასასრულს, სენსორის ეფექტურობა დამოკიდებულია ტალღის სიგრძეზე, უმაღლესი მგრძობელობით QE პიკის გარშემო. სხვადასხვა სიმძლავრის დონე გავლენას ახდენს გამომახილის სიდიდეზე, ხოლო ქსოვილის შეღწევადობის ფაქტორების რეგულირება გავლენას ახდენს მგრძობელობის სიღრმეზე. პრაქტიკული გამოყენებისთვის, ეს გრაფიკები გვაწვდის ინფორმაციას სინათლის წყაროს სიმძლავრისა და სენსორის ტიპის არჩევის შესახებ, რომელიც დაფუძნებული იქნება კონკრეტული შესასწავლი ობიექტისათვის მაქსიმალური პიკის მქონე QE-ს შესაბამისი ტალღის სიგრძისათვის სიგნალ/ხმაურის საუკეთესო თანაფარდობის მიღების შესაძლებლობაზე და ამ გზით სენსორის ეფექტურობის გაზრდაზე.

§3.4. CCD სენსორის სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის შეფასება ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას

CCD-სენსორების დინამიკური დიაპაზონი არის თანაფარდობა იმ მაქსიმალური სიგნალისა, რომელიც მას შეუძლია ჩაიწეროს (დაკავშირებულია "სრული ტევადობა") და მინიმალურ აღმოჩენილ სიგნალთან (რომელსაც, ჩვეულებრივ წაკითხვის ხმაურს უწოდებენ). სიმძლავრის კოეფიციენტის $S(\lambda, P, \delta, d)$ - გამოსახულებაში შემავალი პარამეტრი P , რომელიც ასახავს სინათლის წყაროს გამოსხივების სიმძლავრეს, განსაზღვრავს იმ სინათლის ინტენსივობას, რომელიც უნდა ჩაიჭიროს CCD-სენსორმა. ე.ი. სიმძლავრის კოეფიციენტის $S(\lambda, P, \delta, d)$ დაკავშირებულია CCD-სენსორების დინამიკური დიაპაზონთანაც, რომელიც გნმარტების თანახმად ასე ჩაიწერება:

$$DinamicRange = \frac{\text{სრული ტევადობა}}{\text{წაკითხვის ხმაური}} \quad (3.4.1)$$

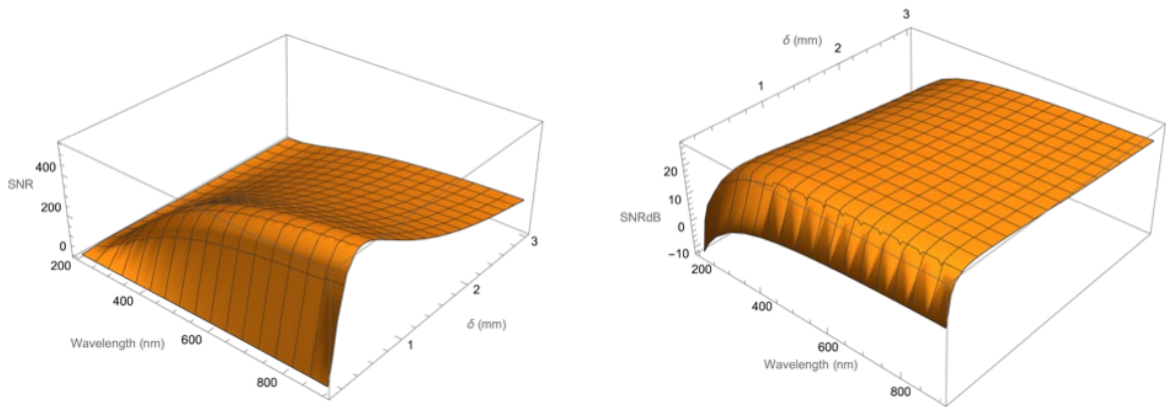
d - სიღრმე ანალოგიურია CCD სენსორის აქტიური ფენის სისქის d_0 , რომელიც განსაზღვრავს თუ რამდენი ფოტონი უნდა „გარდაიქმნას“ ელექტრონებად სრული სიმძლავრის მიღწევამდე.

და ბოლოს, CCD-ის წაკითხვის ხმაური არის ხმაური, რომელიც წარმოიქმნება დაგროვილი მუხტის ციფრულ მნიშვნელობად გადაქცევის პროცესში. ეს გავლენას ახდენს გადაღებული სურათის SNR-ზე. სიმძლავრის კოეფიციენტის $S(\lambda, P, \delta, d)$ დაკავშირებულია სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობაზე:

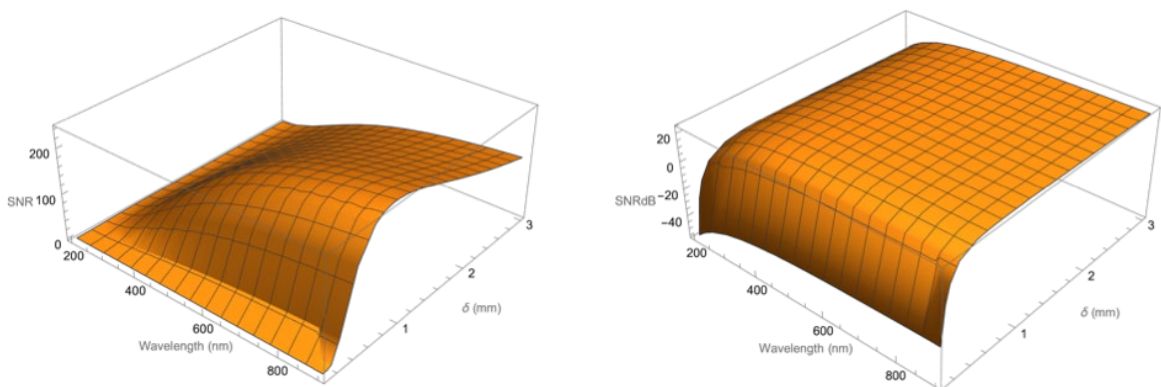
$$SNR = \frac{Signal}{Noise} = \frac{S(\lambda, P, \delta, d) \cdot t}{\sqrt{Signal + darkCurrent \cdot t + readNoise^2}}, \quad (3.4.2)$$

სადაც t - ინტეგრაციის დროა. (3.4.2) ფორმულა გამოვსახოთ დეციბელებში:

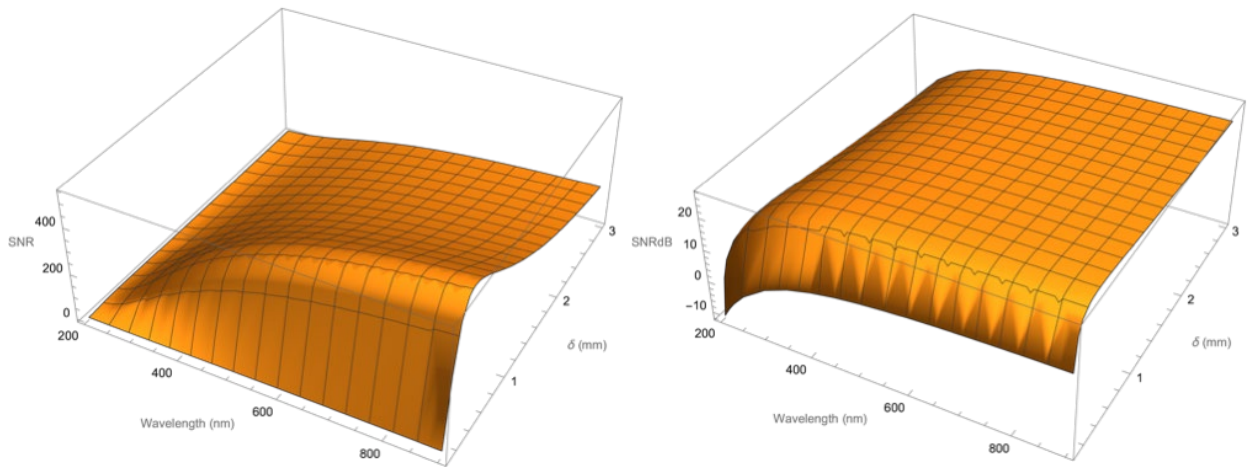
$$SNR_{log} = 10 \cdot \log SNR. \quad (3.4.3)$$



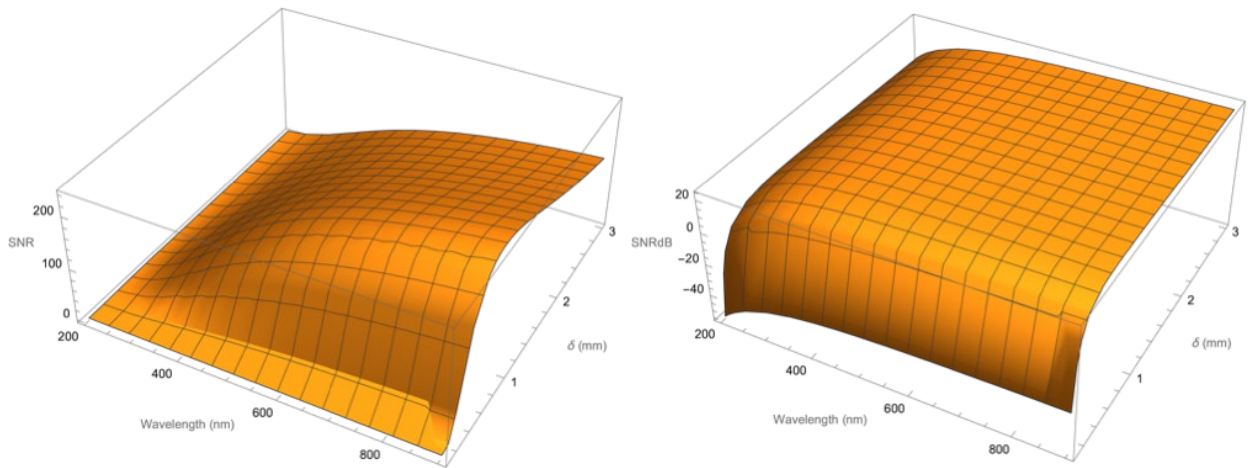
ნახ.3.4.1. სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძესა (λ) და ოპტიკურ სიღრმეზე (δ), როცა $\lambda_0 = 500$ ნმ, ინტეგრაციის დრო $t = 100$ წმ, ხოლო ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის შეღწევის სიღრმე $d = 1$ მმ



ნახ.3.4.2. სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძესა (λ) და ოპტიკურ სიღრმეზე (δ), როცა $\lambda_0 = 500$ ნმ, ინტეგრაციის დრო $t = 100$ წმ, ხოლო ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის შეღწევის სიღრმე $d = 2$ მმ



ნახ.3.4.3. სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძესა (λ) და ოპტიკურ სიღრმეზე (δ), როცა $\lambda_0 = 200$ ნმ, ინტეგრაციის დრო $t = 100$ წმ, ხოლო ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის შეღწევის სიღრმე $d = 1$ მმ



ნახ.3.4.4. სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძესა (λ) და ოპტიკურ სიღრმეზე (δ), როცა $\lambda_0 = 200$ ნმ, ინტეგრაციის დრო $t = 100$ წმ, ხოლო ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის შეღწევის სიღრმე $d = 2$ მმ

ნახ.3.4.1-3.4.4-ზე მიღებული გრაფიკების ანალიზი აჩვენებს სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) ტალღის სიგრძეზე (λ) და ოპტიკური სიღრმეზე (δ) სამგანზომილებიან დამოკიდებულებას. შედეგად შეიძლება გამოვიტანოთ რამდენიმე მნიშვნელოვანი დასკვნა:

1. როცა $\lambda_0 = 500$ ნმ, $t = 100$ წმ და $d = 1$ მმ: SNR მცირდება ტალღის სიგრძის მატებასთან ერთად. ეს მოსალოდნელი შედეგია, რადგან სენსორის მგრძნობელობა ზოგადად მცირდება ტალღის სიგრძეზე, რომელიც შორს არის პიკური მგრძნობელობისგან (λ_0). SNR ასევე მცირდება გაზრდილი ოპტიკური

სიღრმე, δ , რაც ასახავს სიგნალის სიმძლავრის შემცირებას შეღწევადობის სიღრმის მატებასთან ერთად.

2. როცა $\lambda_0 = 500$ ნმ, $t = 100$ წმ და $d = 2$ მმ: მსგავსი ტენდენცია შეინიშნება SNR-ის კლებით უფრო მაღალი ტალღის სიგრძეებისთვის და უფრო დიდი ოპტიკური სიღრმეებისთვის. ბიოლოგიური ქსოვილის სიღრმის (d) ზრდა იწვევს დაბალ SNR-ის შემცირებას ტალღის სიგრძის მთელ დიაპაზონში, რაც გვაძლევს იმის ვარაუდის გაკეთების საშუალებას, რომ სენსორის უნარი განასხვავოს სიგნალი ხმაურისგან მცირდება, და ამ უნარის დაქვეითება უფრო მკვეთრი ხდება, როცა შუქი უფრო ღრმად აღწევს ბიოლოგიური ქსოვილის სიღრმეებში.
3. როცა $\lambda_0 = 200$ ნმ, $t = 100$ წმ: ბიოლოგიურ სტრუქტურაში შუქის შეღწევის სიღრმის ზრდა $d = 1$ მმ-დან $d = 2$ მმ-მდე, გვაჩვენებს, რომ პიკური მგრძნობელობა გადადის უფრო მოკლე ტალღის სიგრძეზე (200 ნმ), SNR მრუდის ყოფაქცევა მნიშვნელოვნად იცვლება. SNR უფრო მაღალია მოკლე ტალღის სიგრძეზე, რაც შეესაბამება კვანტური ეფექტურობის (QE) პიკს 200 ნმ-თან ახლოს. თუმცა, SNR კვლავ მცირდება ოპტიკური სიღრმის (δ) ზრდით.

ერთი სიტყვით, სიმულაციური ანალიზი გვიჩვენებს, რომ სენსორის მოქმედება, როგორც დაფიქსირებულია SNR-ის მიერ, მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული სისტემის პარამეტრების ურთიერთქმედებაზე, კერძოდ: სენსორის მგრძნობელობის პიკური ტალღის სიგრძე, ინტეგრაციის დროზე, ბიოლოგიურ ქსოვილში სინათლის შეღწევის სიღრმეზე და ოპტიკური სიღრმეზე. ამ დასკვნების შედეგები ხაზს უსვამს, რომ აუცილებელია სენსორის კვანტური ეფექტურობა პიკური მგრძნობელობის შესაბამისი პიკური მნიშვნელობის განსაზღვრა და რალურ ექსპერიმენტებში მისი გათვალისწინება. ბიოლოგიური ქსოვილის სიღრმეებში შუქის შეღწევადობის მიუხედავად ადგილი აქვს სენსორის ხმაურის დონის ზრდას, რაც პოტენციურად მოითხოვს ინტეგრაციის უფრო მეტ დროს ან უფრო მგრძნობიარე აღჭურვილობას მაღალი SNR-ის მისაღწევად.

§3.5. სიგნალ/ხმაური თანაფარდობის შეფასება ცივი ატომების შთანთქმის სპექტრში

განვიხილოთ ცივი ატომებზე სინათლის შთანთქმის პროცესი და შევაფასოთ სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობას (SNR). ხმაურის რამდენიმე კომპონენტი უნდა გამოვყოთ: სიბნელის დენის ხმაური ND , რომელიც გვაქვს მაშინაც კი, როცა CCD სენსორს ფოტონები არ ხვდება. ეს არის თერმული ფენომენი, რომელიც წარმოიქმნება სილიციუმის სენსორში სპონტანურად წარმოქმნილი ელექტრონებისგან (თერმულად აგზნებული სავალენტო ელექტრონები სპონტანურად ხვდება გამტარობის ზოლში); წაკითხვის ხმაური NR - ეს არის ხმაური, რომელიც წარმოიქმნება ელექტრული სიგნალის მიღებისას. ეს ხმაური ძირითადად გამოწვეულია სენსორის დიზაინით, თუმცა ასევე შეიძლება წარმოქმნილი იქნას მონოქრომატული კამერის დიზაინითაც; NF - ფლუქტუაციური ხმაური, რომელიც გამოწვეულია CCD-სენსორის პიქსელების სივრცითი არაერთგვაროვნებით და დამოუკიდებელია სენსორის სიგნალის დონესა და ტემპერატურაზე. ერთი სიტყვით ხმაური $NOISE$ - მიიღება ამ სამი კომპონენტისაგან და განისაზღვრება (1.8.3) ფორმულით. მაგრამ, გარდა ამ ხმაურებისა აღსანიშნავია აგრეთვე NS - ფოტონის გასროლის ხმაური (Foton Shout Noise). იგი არის სტატისტიკური ხმაური, რომელიც დაკავშირებულია CCD-სენსორის პიქსელში ფოტონების მოსვლის ალბათობასთან. ვინაიდან ფოტონის გაზომვა ემორჩილება პუასონის სტატისტიკას, ფოტონის გასროლის ხმაური დამოკიდებულია გაზომილი სიგნალის დონეზე. ის დამოუკიდებელია სენსორის ტემპერატურაზე. ყველა ამ ფაქტორის გათვალისწინებით (1.8.3) ფორმულა ასე შეიძლება გადავწეროთ:

$$NOISE = \sqrt{ND^2 + NR^2 + NF^2 + NS^2}, \quad (3.5.1)$$

სადაც ND - სიბნელის დენის ხმაური, NR - წაკითხვის ხმაური, NF - ფლუქტუაციური ხმაური, NS - სტატისტიკური ხმაური. ჩვენ შეიძლება გავაერთიანოთ ხმაურთა ზოგიერთი ტიპი და წარმოვადგინოთ ის შემავალი სიგნალის (N_{in}), გამომავალი სიგნალის (N_{out}) და ფონური ხმაურის (N_{gr}) ჯამის სახით:

$$NOISE = \sqrt{N_{in}^2 + N_{out}^2 + N_{gr}^2}. \quad (3.5.2)$$

ცივი ატომების შთანთქმის პროცესი აღიწერება ნივთიერების ოპტიკური სიმკვრივით OD, ამიტომ სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა გამოვსახოთ ოპტიკური სიმკვრივით:

$$SNR = \frac{OD(x, y)}{\sqrt{NOISE^2}}. \quad (3.5.3)$$

ვისარგებლოთ ოპტიკური სიმკვრივის გამოსახულებით [28]-ის მიხედვით, რომელიც აღწერს ცივი ატომების ოპტიკური სიმკვრივის განაწილებას სენსორის ფართობზე:

$$OD(x, y) = \log\left(\frac{C_{in}(x, y) - C_{bg}(x, y)}{C_{out}(x, y) - C_{bg}(x, y)}\right) + \frac{C_{in}(x, y) - C_{bg}(x, y)}{C_{sat}^{eff}}, \quad (3.5.4)$$

სადაც:

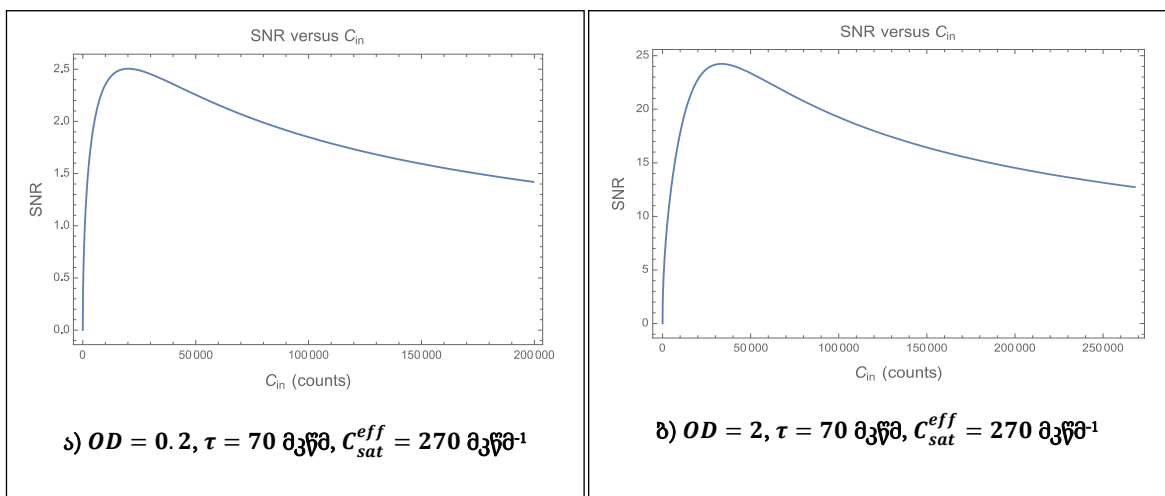
$$C(x, y) = I(x, y) \frac{A_{pix} \lambda T}{M^2 hc} QE \times \frac{\tau}{ADC}. \quad (3.5.5)$$

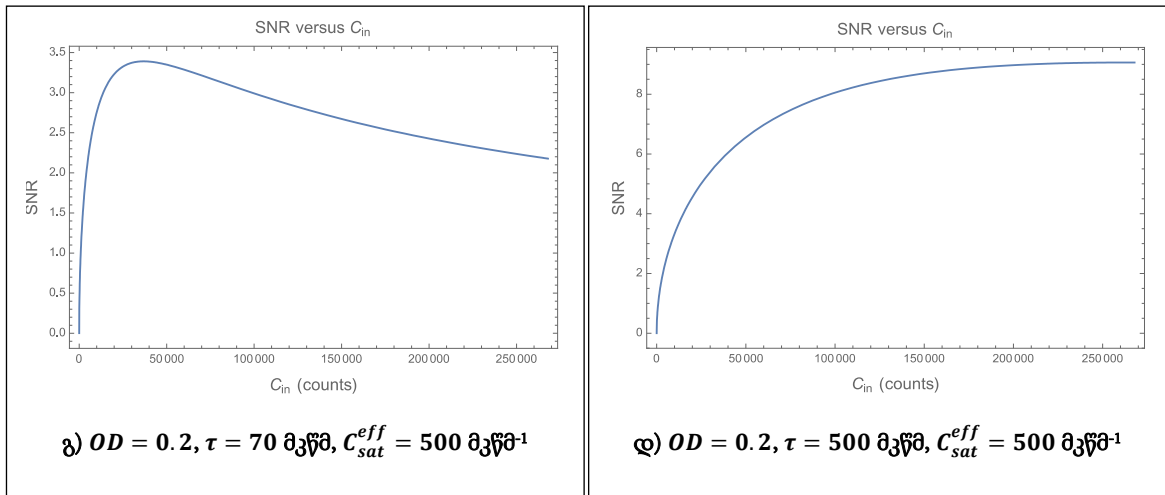
$I(x, y)$ - ატომზე განაწილებული სინათლის ინტენსივობაა, A_{pix} - CCD სენსორის პიქსელის ფართობია, $\frac{A_{pix}}{M^2}$ - პიქსელის რეალური ზომაა, რომელიც ითვალისწინებს გამოსახულების გამადიდებლობას, λ - ნიმუშზე დაცემული სინათლის ტალღის სიგრძეა, T - სიგნალის გადაცემის სიჩქარეა, QE - დეტექტორის კვანტური ეფექტურობაა, ADC - CCD-დეტექტორის ანალოგურ-ციფრული გარდაქმნის ეფექტურობაა, τ - ინტეგრაციის დროა, $C_{in}(x, y)$ - ატომზე განაწილებული დაცემული სინათლის განაწილების ფუნქციაა, $C_{out}(x, y)$ - შთანთქმის შემდეგ ატომიდან გამოსხივებული სინათლის განაწილების ფუნქციაა, $C_{bg}(x, y)$ - ფონური სიგნალის განაწილების ფუნქციაა. SNR გაიანგარიშება როგორც ლოგარითმი კორექტირებული $(C_{in}(x, y) - C_{bg}(x, y))$ სიგნალისა და კორექტირებული საყრდენი სიგნალის $(C_{out}(x, y) - C_{bg}(x, y))$ შეფადებას გამოკლებული კორექტირებული შემავალი სიგნალის შეფარდება დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მნიშვნელობასთან (C_{sat}^{eff}). მაშასადამე C_{sat}^{eff} - დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებელს, რომელიც BlackComet დეტექტორის CCD სენსორებისათვის 650000-ის ტოლია.

(3.5.1) ფორმულიდან გამოვთვალოთ სრული ხმაური, შეიძლება გამოვთვალოთ ოპტიკური სიმკვრივის $OD(x, y)$ -ს კერძო წარმოებულებით შემავალი, გამომავალი და ფუნური ხმაურის მიხედვით, რომლებიც თავის მხრივ გვიჩვენებს, თუ რამდენად მგრძობიარეა ოპტიკური სიმკვრივე შემავალი, გამომავალი და ფუნური ხმაურისადმი. ამიტომ, სრული ხმაური შეიძლება წარმოვადგინოთ შემდეგი სახით:

$$\begin{aligned}
 NOISE^2 &= \left(\frac{\partial OD(x, y)}{\partial C_{in}(x, y)} \right)^2 N_{in}^2 + \left(\frac{\partial OD(x, y)}{\partial C_{out}(x, y)} \right)^2 N_{out}^2 + \left(\frac{\partial OD(x, y)}{\partial C_{bg}(x, y)} \right)^2 N_{out}^2 \\
 &= \left(\frac{1}{C_{sat}^{eff}} + \frac{1}{C_{in} - C_{bg}} \right)^2 N_{in}^2 + \left(\frac{1}{C_{sat}^{eff}} + \frac{1}{C_{out} - C_{bg}} \right)^2 N_{out}^2 \\
 &+ \left(\frac{1}{C_{in} - C_{bg}} - \frac{1}{C_{out} - C_{bg}} \right)^2 N_{gr}^2.
 \end{aligned} \tag{3.5.6}$$

(3.5.4) და (3.5.6) გამოსახულებების (3.5.3)-ში გათვალისწინება საშუალებას გვაძლევს შევაფასოთ სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა SNR ცივი ატომების შთანთქმის სპექტრში ატომზე განაწილებული დაცემული $C_{in}(x, y)$ სინათლის განაწილების მიხედვით.





ნახ.3.5.1. სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) დამოკიდებულება დაცემული ფოტონების რიცხვზე, როცა ხმაურის კოეფიციენტი $ND = 0.6$, ელექტრონების გამრავლების კოეფიციენტი $G=6.5$, სხვადასხვა ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივისათვის (OD), ინტეგრაციის დროისათვის (τ) და დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებლისათვის (C_{sat}^{eff}),

ნახ.3.5.1-ზე წარმოდგენილია SNR დამოკიდებულება დაცემული ფოტონების რიცხვზე C_{in} , როცა იცვლება ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივე (OD), დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებელი (C_{sat}^{eff}), ინტეგრაციის დრო (τ). ნახაზების ანალიზიდან ვადგენთ, რომ:

- როცა ოპტიკური სიმკვრივე (OD) და CCD-დეტექტორის ეფექტური გაჯერება (C_{sat}^{eff}) მცირეა, სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა SNR პრაქტიკულად პიკურ მნიშვნელობას აჩვენებს, მაგრამ სწრაფად სტაბილიზირდება, რაც იმის მაჩვენებელია, რომ დეტექტორი ფოტონთა რაოდენობის ზრდასთან ერთად სწრაფად აღწევს შესაძლებლობის მაქსიმუმს.
- ოპტიკური სიმკვრივის ზრდა გავლენას ახდენს სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობაზე, რაც აიხსნება ნიმუშის მიერ სიგნალის შთანქმით. ნიმუშის მაღალი ოპტიკური სიმკვრივე (OD) განაპირობებს სიგნალის სწრაფ მიღევას და შესაბამისად სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის შემცირებას.
- CCD-დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებლის (C_{sat}^{eff}) ზრდა განაპირობებს სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) ზრდას უფრო გაფართოებულ დიაპაზონში, პრაქტიკულად გაჯერებამდე. ეს მიუთითებს, რომ დეტექტორები მაღალი გაჯერების მაჩვენებლით (C_{sat}^{eff}) ამუშავებენ უფრო მეტ ფოტონებს.

- სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა (SNR) იზრდება გაჯერების მაჩვენებლის (C_{sat}^{eff}) ზრდასთან ერთად გარკვეულ წერტილამდე, რაც CCD დეტექტორებისათვის ტიპური თვისებაა, რადგან სიგნალის ინტენსივობის ზრდა ცალსახად ხელს უწყობს SNR-ის გაუმჯობესებას მანამ, სანამ ხმაური ან სხვა ტექნიკური ფაქტორები (დეტექტორის ზღვრული მაჩვენებელი) არ შეზღუდავს მას.

დასასრულს უნდა აღვნიშნოთ, რომ ეს დაკვირვებები უდავოდ სასარგებლო შედეგს იძლევა დეტექტორის მუშაობის ოპტიმიზაციისთვის. შედეგები მნიშვნელოვანია, შესაბამისი გაზომვის პარამეტრების არჩევისა და ექსპერიმენტების სწორად დაყენებისათვის, რათა თავიდან იქნას აცილებული დეტექტორის გაჯერება, რომელიც ზღუდავს მაქსიმალურ SNR-ის მნიშვნელობის მიღწევას. ცხადია, ზუსტი დასკვნები საჭიროებს CCD დეტექტორის დეტალურ შესწავლას, რაშიც იგულისხმება დიზაინი, გასაზომი ნიმუშის თვისებები და მონაცემების შეგროვების სპეციფიკური პირობები.

§3.6. აგზნება/ემისიური სპექტრული მონაცემების ანალიტიკურ-სტატისტიკური დამუშავების მეთოდები ღვინის სპექტროსკოპიის აპლიკაციებში

კვლევა ითვალისწინებს ფლუორესცენციული სპექტროსკოპიით აგზნება/ემისიური მატრიცის (AEM) ანალიზს, პიკური კომპონენტების ანალიზისა (PCA) და ტოლერანტული ნიმუშის ეტალონთან შედარების ანალიზის (TES) საშუალებით მეთოდის დამუშავებას და მოდელირებას ღვინის პროდუქტის სორტისა და წარმოშობის მიხედვით. აღებულია ოთხი სახეობის თეთრი ქართული ღვინის 100-მდე ნიმუში. ჩვენს მიერ შერჩეული მეთოდოლოგია დაფუძნებულია ერთი მხრივ იმ აპარატურულ კომპლექსზე [9-10], რომლის მოდერნიზაცია ეტაპობრივად ხორციელდებოდა ჩვენი ჯგუფის მიერ, მეორეს მხრივ ახალი ანალიტიკური მიდგომების შემუშავებაზე [13], რომლებიც სავსებით დასაშვებია გამოყენებული იქნას საკვები პროდუქტებისა და სასმელების ტიპური ლაბორატორიული კონტროლისას.

ფლუორესცენციული სპექტრების გადაღება მოხდა StellarNet –ის მიერ წარმოებულ სპექტრომეტრის Black Comet (200-950 ნმ) გამოყენებით. სინათლის წყაროს სახით გამოყენებული იქნა სხვადასხვა სიხშირის LED ნათურები. 100 მკლ

ოდენობის ღვინის ნიმუში თავსდება კვარცის კუვეტაში და ხორციელდება სპექტრების რეგისტრირება ოთახის ტემპერატურაზე. სკანირების რაოდენობა დგინდება ერთი და იგივე ექსპერიმენტული გაზომვის შედეგად, რათა გამოვრიცხოთ დრეიფული ეფექტების ზემოქმედება ნიმუშზე. ყოველი ექსპერიმენტის დასაწყისში კალიბრირდება ეტალონი. აგზნების ტალღის სიგრძის დიაპაზონი მოთავსებულია 250-500 ნმ შუალედში, ხოლო ემისიური კი 275-600 ნმ შუალედში. გაზომვები ტარდება სხვადასხვა აგზნების ტალღის სიგრძეზე 5 ნმ ბიჯით. ტალღის სიგრძეთა სისტემა კალიბრირდება ყოველ დღე კომბინაციური გაზნევის (რამანის გაზნევის) პიკის მიხედვით, რათა გათვალისწინებული იქნას ხელსაწყოს ტალღის სიგრძის შესაძლო დრეიფი. ნიმუშის სკანირების საერთო დრო დაახლოებით შეადგენს 10 წთ-ს. გაზომვები ჩატარდა მოკლე პერიოდში (10-15 დღე), რითაც მინიმალიზირებული იქნა ატმოსფერული ეფექტებისა და ინსტრუმენტული ფლუქტუაციების გავლენა (მაგალითად ნათურის ინტენსივობის ფლუქტუაციები).

PCA შესრულებული იქნა სპექტრული მახასიათებლების აღმწერი ანალიზისათვის, ხოლო ამ მონაცემების კლასიფიკაციისათვის გამოყენებული იქნება ანალოგური კლასების TES მსუბუქი დამოუკიდებელი მოდელირება. სპექტრების გრაფიკული ვიზუალიზაციისათვის გამოყენებული იქნება SpectraWiz, LAbView და Matematica გარსაცმი. მონაცემთა ჩაწერა და დამუშავება მოხდება MS Excel-ში.

იმისათვის, რომ აგზნება-ემისიის სპექტრული მონაცემების დამუშავება მოვახდინოთ, N -ური ნიმუშის აგზნება/ემისიის ტალღის სიგრძეთა მაჩვენებლები უნდა მოვათავსოთ სამგანზომილებიან მასივში $i \times j \times k$ ზომით, სადაც i ნიმუშთა რაოდენობაა, j - გამოსხივების ტალღის სიგრძეთა რაოდენობაა, k - აგზნების ტალღის სიგრძეთა რაოდენობაა:

$$x_{ijk} = \sum_{n=1}^N a_{in} b_{jn} c_{kn} + e_{ijk}$$

N - ნიმუშთა რიცხვია. A მატრიცას a_{in} ელემენტებით პირობითად ვუწოდოთ სტრობოსკოპული, ხოლო B და C მატრიცებს შესაბამისად b_{jn} და c_{kn} ელემენტებით ეწოდება გამოსხივებისა და აგზნების დატვირთვები. e_{ijk} ელემენტები წარმოადგენს

გადახრას სტატისტიკური საშუალოდან თითოეული ნიმუშისათვის. x_{ijk} - პრაქტიკულად წარმოადგენს ფლუოროფორებიდან მიღებული სიგნალების ჯამს.

ამ მოდელის ფარგლებში მატრიცის a_{in} ელემენტები შეიძლება ინტეგრირებული იქნას როგორც ფლუოროფორების n კონცენტრაცია i ნიმუშში. დატვირთვის მატრიცის ელემენტები b_{jn} - წარმოადგენს სპექტრის მასშტაბური შეფასების საფუძველს n -ური ფლუოროფორისა j - სიხშირეზე, მაშინ როდესაც c_{kn} მატრიცის ელემენტი პროპორციულია ფლუოროფორის შთანთქმის კოეფიციენტისა k -ურ სიხშირეზე [14]. აგზნება/ემისიის მასივის (AEM) კოეფიციენტები არ შეიძლება იყოს უარყოფითი.

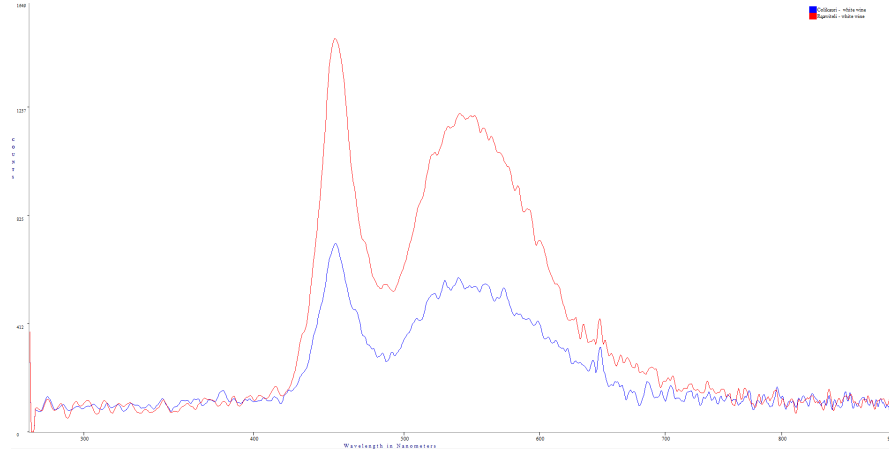
სტანდარტიზაცია სრულდება მონაცემთა დაჯგუფებით თითოეული სორტის ყურძნისათვის და მათი გეოგრაფიული წარმომავლობის მიხედვით, მაგალითად დასავლეთ საქართველო ან აღმოსავლეთ საქართველო. იმისათვის, რომ ძირითადი კომპონენტების ფლუორესცენციული სიგნალების ანალიზი შევასრულოთ აგზნების ფიქსირებულ - კონკრეტულ k -ურ სიხშირეზე საჭიროა მოვახდინოთ ორგანოზომილებიანი მატრიცის ფორმირება $i \times j$ ძირითადი საწყისი მასივიდან x_{ij} . PCA ანალიზის მიზანია შევამციროთ მატრიცის რანგი, მონაცემთა მასივიდან ზედმეტი წევრების გამორიცხვით. ამისათვის საჭიროა ვიპოვოთ მატრიცის ახალი ელემენტების მასივი j განზომილებიან სიხშირულ არეში (სივრცეში) და მოვახდინოთ მონაცემთა პროექცირება მასზე. მატრიცის ღერძები შერჩეული უნდა იქნას ისე, რომ მონაცემებს ჰქონდეს მაქსიმალური დისპერსია. აღმოჩნდება, რომ ამ ახალი მასივის ერთეულოვანი ვექტორები წარმოადგენს სწორედ $x x^T$ მატრიცის საკუთარ ვექტორებს. აი ამ ახალი ღერძების გასწვრივ მონაცემები შეიძლება გაშლილი იქნას როგორც:

$$x_{ij} = \sum_{r=1}^R t_{ir} p_{jr} + e_{ij}$$

სადაც R - კომპონენტების რიცხვი, ან იგივე გაშლის რიგია. t_r - წარმოადგენს შეფასებებს ანუ შერჩევის კოორდინატებს ახალ მთავარ კომპონენტურ სივრცეში, p_r - არის პროპორცია ანუ წონა, რომლითაც ძველი კომპონენტები ტრანსფორმირდება ახალ მთავარ r კომპონენტურ სივრცეში. ძირითადი კომპონენტის ანალიზის იდეა მდგომარეობს იმაში, რომ გავაანალიზოთ მხოლოდ ის კომპონენტები, რომლებიც

პასუხობენ დიდ დისპერსიას. ამიტომ $R \ll j$. e_{ij} ითვალისწინებს ცდომილებებს ძირითად კომპონენტთა სივრცეში.

PCA ანალიზით ავაგებთ ცხრილებს და გრაფიკებს კონკრეტული ჯგუფის ნიმუშისათვის.



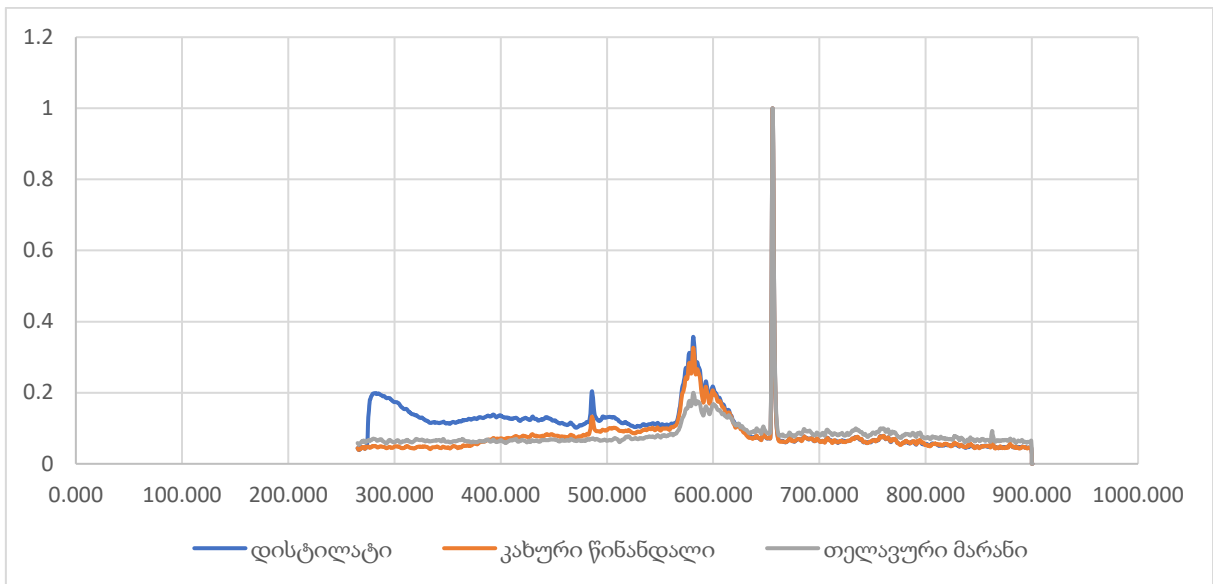
ნახ.3.6.1. ქართული თეთრი ღვინის ემისიური სპექტრები: ცოლიკაური (ლურჯი), რქაწითელი (წითელი)

ამრიგად, იმისათვის, რომ ღვინის კლასიფიცირება მოვახდინოთ სახეობის მიხედვით საჭიროა შერჩეული იქნას ქვეჯგუფის მონაცემთა ბაზა, რომელსაც შეიძლება ვუწოდოთ შესასწავლი ჯგუფი, რომელიც ცნობილი სახეობის ღვინის შემთხვევაში მოიცავს მრავალ (რამოდენიმე ათეულ) ნიმუშს. PCA ანალიზი დამოუკიდებლად სრულდება თითოეული ცნობილი სახეობის ქვეჯგუფზე. ეს მონაცემები გვაძლევს სივრცით სურათს ძირითადი კომპონენტებით. ცხადია ამ სივრცითი გამოსახულების ზედაპირი ძალიან მგრძნობიარეა შერჩეული ქვეჯგუფის მონაცემებისადმი, ამიტომ მომდევნო ეტაპზე ხორციელდება სტატისტიკური საშუალოდან მაღალი დისპერსიის მქონე კომპონენტების ანალიზი და გამორიცხვა. რაც ხორციელდება შერჩეული ჯგუფისა და ძირითადი კომპონენტების შედარებით. უფრო სწორედ პიკებს შორის მანძილის განსაზღვრით. თუ მანძილი რაიმე კრიტიკულ მნიშვნელობაზე s_0 მცირეა, მაშინ საკვლევი ნიმუში მიეკუთვნება შესადარებლად გამოყენებულ კლასს. როგორც კი ასეთი პროცედურა შესრულდება შეიქმნება მოდელი თითოეული სორტის ღვინისათვის, რაც შეიძლება გამოყენებული იქნას ეტალონად.

ღვინის სპექტრის დამუშავება და ანალიზი მოიცავს რამდენიმე საფეხურს იმისდა მიხედვით, თუ რა სპექტროსკოპიის მეთოდს ვიყენებდით (მაგ., ულტრაიისფერი, ხილული, თუ ინფრაწითელი სპექტროსკოპია) და ღვინის რა მახასიათებლებით ვართ დაინტერესებული. შეიძლება ითქვას, რომ ღვინის სპექტრის დამუშავების ზოგადი გეგმა ასეთია:

- სპექტრის მონაცემების მომზადება და დაკალიბრირება. ეს მოიცავს ფონის კორექციას, წყლის შთანთქმის კომპენსაციას (თუ გამოიყენება დეიტერიუმი).
- სპექტრის დამახასიათებელი პიკების განსაზღვრა, რომლებიც შეესაბამება სხვადასხვა ქიმიურ ნაერთებს.
- ჩვენს მიერ გადაღებული სპექტრები უნდა შედარდეს ქიმიური ნაერთების სპექტრის მონაცემთა ბაზებს. თუმცა ეს საკითხი ხანგრძლივი და შრომატევადია. პროექტის ფარგლებში მისი მოსწრება ვერ მოხერხდებოდა, და შესაძლებელია დაიგეგმოს მომდევნო კვლევებისას. ამასთან, ანალიზი საჭიროებს ქიმიკოსების და სპეციალისტების კონსულტაციას- ჩართულობას.
- ჩვენ გამოვიყენეთ მრავალვარიანტული ანალიზის ტექნიკა (PARAFAC), როგორცაა PCA (ძირითადი კომპონენტის ანალიზი) მონაცემების ძირითადი მახასიათებლების ხაზგასასმელად. განვახორციელეთ მონაცემების სტატისტიკური ანალიზი, რათა დაგვედგინა ნიმუშები ან განსხვავებები ღვინის სხვადასხვა ნიმუშებს შორის.
- მნიშვნელოვანია PARAFAC-ის ანალიზის შედეგების ვიზუალიზაცია, რათა გავიგოთ ფლუორესცენციის ნიმუშები და კორელაცია ნიმუშებს შორის. მას შემდეგ რაც გადავიღეთ ღვინის ფლუორესცენტული სპექტრებს, შევინახავთ მონაცემებს Excel-ის ცხრილში. ცხრილში პირველი სვეტი წარმოადგენს აგზნების ტალღის სიგრძეებს, მეორე სვეტი შეესაბამება ემისიის ტალღის სიგრძეს, ხოლო მესამე სვეტი წარმოადგენს ფლუორესცენციის ინტენსივობას. ამ მონაცემებიდან ფლუორესცენციის ძირითადი კომპონენტების ამოსაღებად შევქმენით კოდი Mathematica პაკეტში (იხ.დანართი 2. დამუშავებული ნორმირებული სპექტრების ფორმირება), რომელიც უზრუნველყოფს ფლუორესცენტული სპექტროსკოპიის მონაცემების გამოძახებას ფაილიდან

(Excel, CSV და ა.შ.) და 3D ტენზორის ფორმირებას, დიდი ტენზორების მართვას (FindTensorFactors), სპექტრული პროფილებისა და პიკური კომპონენტების წვლილის ანალიზს, ნორმირებული სპექტრების ფორმირებას (ნახ.3.6.2).



ნახ.3.6.2. ქართული ღვინის (კახური წინანდალი და თელავური მარანი) და დისტილატის დამუშავებული ნორმირებული ფლუორესცენციული სპექტრები, ნიმუშის დეიტერიუმის ნათურით აგზნებისას

ამჯერად გვაქვს დაგროვილი მონაცემები, რომლებიც სასურველია გავატაროთ კონსულტაციაზე ქიმიკოსებთან, სომელიეებთან, ღვინის ექსპერტებთან ან სპექტროსკოპიის სპეციალისტებთან შედეგების უფრო ზუსტი ინტერპრეტაციისთვის (იხ. დანართი 3. ღვინის ნიმუშის სპექტრები).

ღვინის დეიტერიუმის ნათურით სპექტროსკოპიისას რამდენიმე მოლეკულა არის შესაძლებელი აღმოვაჩინოთ, კერძოდ: **1. ფლავონოიდები:** ფლავონოიდები არის ფენოლური ნაერთების კლასი, მათ შორის *კვერცეტინი*, *კვერცეტინ გლიკოზიდები* და *რუტინოიდები*, რომლებსაც შეუძლიათ ღვინოს ფერი და არომატი მისცეს. სპექტროსკოპია შეიძლება გამოყენებულ იქნას მათი სტრუქტურისა და კონცენტრაციის გასაანალიზებლად. **2. ტანინები:** ტანინები ფენოლური ნაერთების კიდევ ერთი ჯგუფია, რომელსაც შეუძლია გავლენა მოახდინოს ღვინის გემოსა და სტრუქტურაზე. სპექტროსკოპია დაგვეხმარება შევისწავლოს სხვადასხვა ტიპის ტანინები და მათი გავლენა ღვინის ორგანოლეპტიკურ მახასიათებლებზე. **3.**

ალკოჰოლი: სპექტროსკოპია შეიძლება გამოყენებულ იქნას ღვინის ალკოჰოლის შემცველობის გასაზომად, **4. შაქარი და მჟავები:** ღვინოში არსებული შაქრები და მჟავები ასევე შეიძლება გაიზომოს სპექტროსკოპიით.

ალკოჰოლის (ეთანოლის) გამოვლენა ულტრაიისფერი (UV) და ხილული (Vis) სპექტროსკოპიით შეიძლება განხორციელდეს დეიტერიუმის ან წყალბადის ნათურის გამოყენებით. ორივე ნათურა შეიძლება იყოს ეფექტური, მაგრამ მათი გამოყენება ცხადია დამოკიდებულია კონკრეტულ ექსპერიმენტულ მოთხოვნებზე და ნიმუშის მახასიათებლებზე.

დეიტერიუმის ნათურა გამოიყენება სპექტრის UV რეგიონში და მისი უპირატესობა ის არის, რომ დეიტერიუმს აქვს წყლის უფრო დაბალი შთანთქმის თვისებები. ეს თავიდან აიცილებს წყლის შთანთქმის გავლენას სპექტრზე, რაც მნიშვნელოვანია წყალხსნარების ანალიზისას, როგორცაა ღვინო.

წყალბადის ნათურა გამოიყენება სპექტრის ხილულ რეგიონში და უფრო გრძელი ტალღის სიგრძეზე UV რეგიონში. ის შეიძლება ეფექტური იყოს, თუ ტალღის სიგრძის უფრო ფართო დიაპაზონის დაფარვა გჭირდებათ. ავარჩიეთ ოპტიმალური ტალღის სიგრძე ეთანოლის ანალიზისთვის. ეთანოლისთვის დამახასიათებელი ტალღის სიგრძეა 210 ნმ და 275 ნმ.

რაც შეეხება ნივთიერებების გამოვლენას, დეიტერიუმის სინათლის წყარო ხშირად გამოიყენება წყალხსნარების სპექტროსკოპიაში, რათა თავიდან იქნას აცილებული შთანქთმა წყლის მოლეკულების მხრიდან ულტრაიისფერ რეგიონში. რაც მნიშვნელოვანია, ბიომოლეკულების შესწავლისას.

ჩვენი დასკვნები ძირითად ეხება გამზომ მოწყობილობას. ეს შედეგები ეხება StellarNet ის მიერ წარმოებული BlackCommet სპექტრომეტრების CCD-დეტექტორებს, კერძოდ:

1. სპექტრები აჩვენებს სიგნალის საშუალო დონის უფრო დიდ ცვლილებას მოცემული ინტეგრაციის დროისას, შესაძლოა გაზომვებს შორის თერმული ფლუქტუაციების გამო. ამიტომ სპექტრომეტრისათვის შეირჩა თერმული სტაბილიზაციის ოპტიმალური დონე. როგორც გაზომვებმა აჩვენა თერმული

- სტაბილიზაციის მისაღწევად, სიგნალის საშუალო დონე ათვლილი უნდა იქნას დაახლოებით 100 ინტეგრაციით 180 მლწმ-ში.
2. სპექტრომეტრის ერთ-ერთი ძირითადი მახასიათებელია ე.წ. „სიბზნელის დენი“ (dark current), რომელიც საშუალოდ შეადგენს პიკური მნიშვნელობის დაახლოებით 0,25% (~40000 ფოტონი, 100 ინტეგრაციით). ეს მონაცემები ათვლილი იქნა დეიტერიუმისა და ჰალოგენური სინათლის წყაროს კომბინირებულ სპექტრში.
 3. სხვადასხვა ინტეგრაციის დროს შეგროვებული მონაცემები აჩვენებს, რომ სანამ ინტეგრაციის დრო არ გაიზრდება ~2000 მლწმ-მდე სიგნალის ციფრული მონაცემების შეგროვება გრძელდება. ინტეგრაციის დროის შემდგომი გაზრდა იწვევს სიბზნელის დენის დაახლოებით წრფივ ზრდას.
 4. ინტეგრაციის დროის ცვალებადობა ავლენს ფიქსირებული შაბლონის ხმაურის პიკებს ჩაწერილ სპექტრში: როცა ინტეგრაციის დრო < 150 მლწმ-ზე ნაკლებია, ადგილი აქვს სიბზნელის დენის შემცირებას და მას შეესაბამება 717,5 ნმ ტალღის სიგრძე; ინტეგრაციის დრო > 500 მლწმ-ზე ავლენს სიბზნელის დენის ორ მნიშვნელოვან პიკს ტალღის სიგრძეებზე: 717,5 ნმ და 666,6 ნმ.
 5. როდესაც ვადარებთ LED ნათებას ჰალოგენურ სინათლის წყაროსთან მხედველობაში უნდა მივიღოთ, რომ ინტეგრაციის დროის ცვალებადობა ავლენს ფიქსირებული შაბლონის ხმაურის პიკებს ჩაწერილ სპექტრში: LED შუქდიოდები იყენებენ ნახევარგამტარულ მასალებს, რომლებიც ძაბვის მიწოდების შემდეგ ასხივებენ შუქს და ახასიათებთ ელექტროლუმინესცენციას. რაც შეეხება ჰალოგენურ ნათურებს, ისინი შეიცავენ აირს, როგორცაა ბრომი ან იოდი და მისი მოქმედების პრინციპი ეფუძნება ნაპერწკლურ განხმუხტვას. ამიტომ ცხადია LED შუქდიოდები ბევრად ენერგოეფექტულია, რომ არაფერი ვთქვათ მოხმარების ხანგრძლიობაზე ისინი ამავე დროს გამოყოფენ ნაკლებ სითბოს, მათი საშუალებით მიიღწევა ფერთა აღქმის მაღალი ეფექტურობა და ამავე დროს ახასიათებთ შედარებით მაღალი მიმართული ქმედება.
 6. დეიტერიუმის ნათურები უზრუნველყოფს სინათლის ფართო სპექტრს ულტრაიისფერი (UV) რეგიონში. ისინი გამოიყენება ულტრაიისფერ-ხილულ

სპექტროსკოპიაში ნიმუშების გასაანალიზებლად, რომლებსაც შეიძლება ჰქონდეთ შთანთქმა ულტრაიისფერ რეგიონში. ისინი ასევე გამოიყენება ოპტიკურ დეტექტორებში, სადაც საჭიროა UV შუქი. რაც შეეხება ჰალოგენურ ნათურებს, ისინი ფართოდ გამოიყენება სპექტრის ხილულ რეგიონში და ზოგჯერ ახლო ინფრაწითელ რეგიონში. როდესაც დეიტერიუმისა და ჰალოგენურ ნათურებს ვაერთიანებთ ერთ წყაროში ეს უზრუნველყოფს სინათლის ფართო სპექტრულ დიაპაზონს. ამრიგად, დეიტერიუმის ნათურის გამოყენებისას ულტრაიისფერ რეგიონში და ჰალოგენური ნათურის ხილულ რეგიონში, შესაძლებელია მივიღოთ ფართო დიაპაზონი, რომელიც მოიცავს სპექტრის როგორც UV, ასევე ხილულ რეგიონებს. სინათლის კომბინირებული წყაროები ხშირად გამოიყენება სამეცნიერო და ლაბორატორიულ ინსტრუმენტებში, როგორცაა სპექტრომეტრები, სადაც საჭიროა სპექტრის სხვადასხვა რეგიონში მუშაობა სინათლის ემისიის სრულად გასაანალიზებლად.

III თავის ძირითადი შედეგები

დისერტაციის მესამე თავი ხაზს უსვამს CCD სენსორებში სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის შეფასების მნიშვნელობას სხვადასხვა აპლიკაციებისთვის, მათ შორის ბიოლოგიური სტრუქტურების სპექტროსკოპიული ანალიზისთვის.

იგი სწავლობს CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის (QE) გაზრდის მეთოდებსა და შედეგებს. აქცენტირებულია მეღვინეობის აპლიკაციებში და ცივი ატომის სპექტროსკოპიაში გამოყენებული სპექტროსკოპიული მოწყობილობების მუშაობის გაუმჯობესებაზე.

ხმაურის მახასიათებლების დეტალური გამოკვლევა და შთანთქმის/ემისიის სპექტრული მონაცემების ანალიტიკურ-სტატისტიკური დამუშავება ხაზს უსვამს CCD სენსორების ოპტიმიზაციის აუცილებლობას სპექტროსკოპიული გაზომვების უფრო მაღალი სიზუსტისა და საიმედოობის მისაღწევად.

დისერტაციის III თავი გვთავაზობს სიგნალის დამუშავების პრაქტიკული გამოწვევებისა და სპექტროსკოპიის ტექნოლოგიური წინსვლის პოტენციალის განვითარების გზებს განსაკუთრებით იმ აპლიკაციებში, რომლებიც საჭიროებენ მაღალ მგრძობელობას და სიზუსტეს.

დასკვნები

ოპტიკურ-ელექტრონული სისტემების შესწავლის შედეგად გაანალიზებულია ოპტიკური სიმკვრივისა და შთანთქმის გავლენა სპექტრალურ ანალიზზე. სინათლის შთანთქმის თეორიული საფუძვლების კვლევიდან გამომდინარე ხაზგასმულია სიგნალის შემცირების ტექნიკის კრიტიკული გავლენა გაზომვების სიზუსტეზე. განხილულია დაწყვილებული მუხტის მოწყობილობების (CCD) მახასიათებლები, კვანტური ეფექტურობის (QE) გავლენა დეტექტორზე და წარმოდგენილია მისი გაუმჯობესების გზები.

გაანალიზებულია ფრანკ-კონდონის პრინციპის გამოყენება სპექტრალურ აპლიკაციებში. ანალიზი ასახავს როგორც დიატომურ მოლეკულებში ელექტრონული გადასვლების მექანიკას, ასევე სთავაზობს გამოთვლის მიდგომას, რომელიც აძლიერებს სპექტრალური ქცევების გაგებას.

შეფასებულია ბიოლოგიურ აპლიკაციებში CCD სენსორის მგრძობელობა და წარმოდგენილია სხვადასხვა ტალღის სიგრძის ტალღების ბიოლოგიურ სტრუქტურაში გავლის შედეგები, საიდანაც ჩანს, რომ:

- გაუსური QE-სათვის CCD სენსორს აქვს პიკური მგრძობელობა კონკრეტულ ტალღის სიგრძეზე (რომელიც წარმოადგენს გაუსის ცენტრს, 500 ნმ და 300 ნმ-ზე). სენსორი ყველაზე ეფექტურია დაცემული ფოტონების ელექტრონულ სიგნალად გადაქცევაში ამ პიკური ტალღის სიგრძეების მახლობლად.
- სენსორის რეაქცია სინათლის წყაროს სიმძლავრის სხვადასხვა მნიშვნელობებისას (1 ვტ, 5 ვტ, 15 ვტ და 25 ვტ) აჩვენებს, რომ სიმძლავრის მატებასთან ერთად იზრდება სენსორის რეაქციაც. ეს იმიტომ ხდება, რომ უფრო მაღალი სიმძლავრის დონე ნიშნავს, რომ მეტი ფოტონი ეცემა სენსორს და შესაბამისად, გარდაიქმნება ელექტრონებად.
- ბიოლოგიური ქსოვილში სინათლის შეღწევის სიღრმის (d) ცვლილება, ასევე ოპტიკური სიღრმის (δ) ცვლილება, ცხადია გავლენას ახდენს სენსორის გამომახილზე. ამ პარამეტრების ცვლილება ცვლის მრუდის მაქსიმუმს, რაც საშუალებას გვაძლევს განვსაზღვროთ, თუ რა სიღრმეზეა სენსორი მგრძობიარე ბიოლოგიური ქსოვილიდან გამომავალი სიგნალის მიმართ.

- როდესაც QE პიკი გადაინაცვლებს 500 ნმ-დან 300 ნმ-ზე, სენსორის ფარდობითი მგრძობელობა იზრდება მოკლე ტალღის სიგრძეებზე გრძელ ტალღის სიგრძესთან შედარებით. თუ QE პიკი უფრო ახლოა ექსპერიმენტებში გამოყენებულ ტალღის სიგრძესთან, მაშინ ის უფრო მომგებიანია.
- CCD-ს მგრძობელობა პიკის პერიფერიებში გრძელი ტალღის სიგრძეებისაკენ მნიშვნელოვნად მცირდება. ეს ტიპურია CCD სენსორებისთვის, სადაც რეაგირება ჩვეულებრივ მცირდება, როდესაც ტალღის სიგრძე შორდება QE პიკს, როგორც ულტრაიისფერი (UV), ასევე ინფრაწითელი (IR) სპექტრის ბოლოებისკენ.
- აპლიკაციებისთვის, სადაც კონკრეტული ტალღის სიგრძეა საინტერესო (როგორცაა შთანთქმის სპეციფიური პიკის დამზერა სპექტროსკოპიაში), უნდა ავირჩიოთ სენსორი QE პიკით, რომელიც შეესაბამება ამ ტალღის სიგრძეს, რათა მაქსიმალურად გაიზარდოს მგრძობელობა და სიგნალის ხარისხი.
- სინათლის სხვადასხვა სიმძლავრისა და ოპტიკური თუ ბიოლოგიურ სრტუქტურებში სინათლის შეღწევის სიღრმის მიხედვით CCD-სენსორის მგრძობელობის შეფასებით, შესაძლებელია ამ პარამეტრების ოპტიმიზაცია კონკრეტული აპლიკაციებისთვის, როგორცაა მაგალითად ბიოლოგიურ ქსოვილების სპექტრული მახასიათებლების შეფასება ან ანალიტიკური გაზომვები.
- სენსორის ეფექტურობა დამოკიდებულია ტალღის სიგრძეზე, უმაღლესი მგრძობელობით QE პიკის გარშემო. სხვადასხვა სიმძლავრის დონე გავლენას ახდენს გამოძახილის სიდიდეზე, ხოლო ქსოვილის შეღწევადობის ფაქტორების რეგულირება გავლენას ახდენს მგრძობელობის სიღრმეზე. პრაქტიკული გამოყენებისთვის, QE-ს მრუდები გვაწვდის ინფორმაციას სინათლის წყაროს სიმძლავრისა და სენსორის ტიპის არჩევის შესახებ, რომელიც დაფუძნებული იქნება კონკრეტული შესასწავლი ობიექტისათვის მაქსიმალური პიკის მქონე QE-ს შესაბამისი ტალღის სიგრძისათვის სიგნალ/ხმაურის საუკეთესო თანაფარდობის მიღების შესაძლებლობაზე და ამ გზით სენსორის ეფექტურობის გაზრდაზე.

სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) ტალღის სიგრძეზე (λ) და ოპტიკური სიღრმეზე (d) დამოკიდებულების 3D გრაფიკული ანალიზი საშუალებას გვაძლევს გამოვიტანოთ რამდენიმე მნიშვნელოვანი დასკვნა:

- SNR მცირდება ტალღის სიგრძის მატებასთან ერთად ($\lambda_0 = 500$ ნმ, $t = 100$ წმ და $d = 1$ მმ). ეს მოსალოდნელი შედეგია, რადგან სენსორის მგრძობელობა ზოგადად მცირდება ტალღის სიგრძეზე, რომელიც შორს არის პიკური მგრძობელობისგან (λ_0). SNR ასევე მცირდება ოპტიკური სიღრმის ზრდით d , რაც ასახავს სიგნალის სიმძლავრის შემცირებას შეღწევადობის სიღრმის მატებასთან ერთად.
- უფრო მაღალი ტალღის სიგრძეებისთვის და უფრო დიდი ოპტიკური სიღრმეებისთვის შეინიშნება SNR-ის კლება ($\lambda_0 = 500$ ნმ, $t = 100$ წმ და $d = 2$ მმ). ბიოლოგიური ქსოვილის სიღრმის (d) ზრდა იწვევს SNR-ის შემცირებას ტალღის სიგრძის მთელ დიაპაზონში, რაც გვაძლევს იმის ვარაუდის გაკეთების საშუალებას, რომ სენსორის უნარი განასხვავოს სიგნალი ხმაურისგან მცირდება, და ამ უნარის დაქვეითება უფრო მკვეთრი ხდება, როცა შუქი უფრო ღრმად აღწევს ბიოლოგიური ქსოვილის სიღრმეებში.
- ბიოლოგიურ სტრუქტურაში შუქის შეღწევის სიღრმის ზრდა ($\lambda_0 = 200$ ნმ, $t = 100$ წმ $d = 1-2$ მმ), გვაჩვენებს, რომ პიკური მგრძობელობა გადადის უფრო მოკლე ტალღის სიგრძეზე (200 ნმ), SNR მრუდის ყოფაქცევა მნიშვნელოვნად იცვლება. SNR უფრო მაღალია მოკლე ტალღის სიგრძეზე, რაც შეესაბამება კვანტური ეფექტურობის (QE) პიკურ მნიშვნელობას (200 ნმ-თან ახლოს), თუმცა, SNR კვლავ მცირდება ოპტიკური სიღრმის (d) ზრდით.

SNR ევოლუციის ანალიზი დაცემული ფოტონების რიცხვის მიხედვით C_{in} , როცა იცვლება ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივე (OD), დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებელი (C_{sat}^{eff}), ინტეგრაციის დრო (τ), გვიჩვენებს:

- როცა ოპტიკური სიმკვრივე (OD) და CCD-დეტექტორის ეფექტური გაჯერება (C_{sat}^{eff}) მცირეა, სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა SNR პრაქტიკულად პიკურ მნიშვნელობას აჩვენებს, მაგრამ სწრაფად სტაბილიზირდება, რაც იმის

მაჩვენებელია, რომ დეტექტორი ფოტონთა რაოდენობის ზრდასთან ერთად სწრაფად აღწევს შესაძლებლობის მაქსიმუმს.

- ოპტიკური სიმკვრივის ზრდა გავლენას ახდენს სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობაზე, რაც აიხსნება ნიმუშის მიერ სიგნალის შთანქმით. ნიმუშის მაღალი ოპტიკური სიმკვრივე (OD) განაპირობებს სიგნალის სწრაფ მიღევას და შესაბამისად სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის შემცირებას.
- CCD-დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებლის (C_{sat}^{eff}) ზრდა განაპირობებს სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) ზრდას უფრო გაფართოებულ დიაპაზონში, პრაქტიკულად გაჯერებამდე. ეს მიუთითებს, რომ დეტექტორები მაღალი გაჯერების მაჩვენებლით (C_{sat}^{eff}) ამუშავებენ უფრო მეტ ფოტონებს.
- სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა (SNR) იზრდება გაჯერების მაჩვენებლის (C_{sat}^{eff}) ზრდასთან ერთად გარკვეულ წერტილამდე, რაც CCD დეტექტორებისათვის ტიპური თვისებაა, რადგან სიგნალის ინტენსივობის ზრდა ცალსახად ხელს უწყობს SNR-ის გაუმჯობესებას მანამ, სანამ ხმაური ან სხვა ტექნიკური ფაქტორები (დეტექტორის ზღვრული მაჩვენებელი) არ შეზღუდავს მას.

ღვინის აპლიკაციებში StellarNet ის მიერ წარმოებული BlackCommet სპექტრომეტრების CCD-დეტექტორების გამოყენებით ვადგენთ, რომ:

- სპექტრები აჩვენებს სიგნალის საშუალო დონის უფრო დიდ ცვლილებას მოცემული ინტეგრაციის დროისათვის, შესაძლოა გაზომვებს შორის თერმული ფლუქტუაციების გამო. ამიტომ სპექტრომეტრისათვის შეირჩა თერმული სტაბილიზაციის ოპტიმალური დონე. როგორც გაზომვებმა აჩვენა თერმული სტაბილიზაციის მისაღწევად, სიგნალის საშუალო დონე ათვლილი უნდა იქნას დაახლოებით 100 ინტეგრაციით 180 მლწმ-ში.
- სპექტრომეტრის ერთ-ერთი ძირითადი მახასიათებელია ე.წ. „სიბნელის დენი“ (dark current), რომელიც საშუალოდ შეადგენს პიკური მნიშვნელობის დაახლოებით 0,25% (~40000 ფოტონი, 100 ინტეგრაციით). ეს მონაცემები

ათვლილი იქნა დეიტერიუმისა და ჰალოგენური სინათლის წყაროს კომბინირებულ სპექტრში.

- სხვადასხვა ინტეგრაციის დროს შეგროვებული მონაცემები აჩვენებს, რომ სანამ ინტეგრაციის დრო არ გაიზრდება ~2000 მლწმ-მდე სიგნალის ციფრული მონაცემების შეგროვება გრძელდება. ინტეგრაციის დროის შემდგომი გაზრდა იწვევს სიბნელის დენის დაახლოებით წრფივ ზრდას.
- ინტეგრაციის დროის ცვალებადობა ავლენს ფიქსირებული შაბლონის ხმაურის პიკებს ჩაწერილ სპექტრში: როცა ინტეგრაციის დრო < 150 მლწმ-ზე ნაკლებია, ადგილი აქვს სიბნელის დენის შემცირებას და მას შეესაბამება 717,5 ნმ ტალღის სიგრძე; ინტეგრაციის დრო > 500 მლწმ-ზე ავლენს სიბნელის დენის ორ მნიშვნელოვან პიკს ტალღის სიგრძეებზე: 717,5 ნმ და 666,6 ნმ.
- როდესაც ვადარებთ LED ნათებას ჰალოგენურ სინათლის წყაროსთან მხედველობაში უნდა მივიღოთ, რომ ინტეგრაციის დროის ცვალებადობა ავლენს ფიქსირებული შაბლონის ხმაურის პიკებს ჩაწერილ სპექტრში: LED შუქდიოდები იყენებენ ნახევარგამტარულ მასალებს, რომლებიც ძაბვის მიწოდების შემდეგ ასხივებენ შუქს და ახასიათებთ ელექტროლუმინესცენციას. რაც შეეხება ჰალოგენურ ნათურებს, ისინი შეიცავენ აირს, როგორცაა ბრომი ან იოდი და მისი მოქმედების პრინციპი ეფუძნება ნაპერწკლურ განხმუხტვას. ამიტომ ცხადია LED შუქდიოდები ბევრად ენერგოეფექტულია, რომ არაფერი ვთქვათ მოხმარების ხანგრძლიობაზე ისინი ამავე დროს გამოყოფენ ნაკლებ სითბოს, მათი საშუალებით მიიღწევა ფერთა აღქმის მაღალი ეფექტურობა და ამავე დროს ახასიათებთ შედარებით მაღალი მიმართული ქმედება.
- დეიტერიუმის ნათურები უზრუნველყოფს სინათლის ფართო სპექტრს ულტრაიისფერი (UV) რეგიონში. ისინი გამოიყენება ულტრაიისფერ-ხილულ სპექტროსკოპიაში ნიმუშების გასაანალიზებლად, რომლებსაც შეიძლება ჰქონდეთ შთანთქმა ულტრაიისფერ რეგიონში. ისინი ასევე გამოიყენება ოპტიკურ დეტექტორებში, სადაც საჭიროა UV შუქი. რაც შეეხება ჰალოგენურ ნათურებს, ისინი ფართოდ გამოიყენება სპექტრის ხილულ რეგიონში და ზოგჯერ ახლო ინფრაწითელ რეგიონში. როდესაც დეიტერიუმისა და

ჰალოგენურ ნათურებს ვაერთიანებთ ერთ წყაროში ეს უზრუნველყოფს სინათლის ფართო სპექტრულ დიაპაზონს. ამრიგად, დეიტერიუმის ნათურის გამოყენებისას ულტრაიისფერ რეგიონში და ჰალოგენური ნათურის ხილულ რეგიონში, შესაძლებელია მივიღოთ ფართო დიაპაზონი, რომელიც მოიცავს სპექტრის როგორც UV, ასევე ხილულ რეგიონებს. სინათლის კომბინირებული წყაროები ხშირად გამოიყენება სამეცნიერო და ლაბორატორიულ ინსტრუმენტებში, როგორცაა სპექტრომეტრები, სადაც საჭიროა სპექტრის სხვადასხვა რეგიონში მუშაობა სინათლის ემისიის სრულად გასაანალიზებლად.

დისერტაცია ხაზს უსვამს მაღალი დონის ანალიტიკური კონტროლის უდიდეს მნიშვნელობას საწარმოო პროცესების წარმატებისა და თანამედროვე ტექნოლოგიების განვითარების უზრუნველსაყოფად. როდესაც ჩვენ ჩავუღრმავდებით ოპტიკურ მეთოდებს, რომლებიც ხელმისაწვდომია გარემოს ქიმიური ანალიზისთვის, ამ მეთოდების შერჩევისა და ოპტიმალურად ადაპტირების აუცილებლობა გამოკვლეული ნივთიერებების სპეციფიკასთან ჩნდება, როგორც გადამწყვეტი ამოცანა.

ამრიგად, დისერტაცია არა მხოლოდ ხელს უწყობს ცოდნის განვითარებას ოპტიკურ ანალიზში, არამედ აყალიბებს საფუძვლს ამ სფეროში მომავალი ინოვაციებისთვის, და შეაქვს წვლილი ანალიტიკური ტექნოლოგიების სიზუსტის, ადაპტირებისა და გაუმჯობესების მუდმივ საჭიროებაში.

დისერტაციაში წარმოდგენილი შედეგები გამოქვეყნებულია შემდეგ პუბლიკაციებში:

- [1] Gomidze N., **Shainidze J.**, Shengelia G., Turmanidze R. To the problems of fluorescence excitation spectrums. International scientific journal "machines. Technologies. Materials." web ISSN 1314-507X; print ISSN: 1313-0226, pp.279-282, 2018.
- [2] Gomidze N.Kh., **Shainidze J.J.**, Jabnidze I.N., Makharadze, K.A., Khajishvili M.R., Kalandadze L.G., Nakashidze O, Mshkhaladze E.N. Estimation of scintillation index for a Gaussian laser beam propagating through a random phase screen. Journal of Biological Physics and Chemistry, Vol. 20 (2020), doi: 10.4024/27GO19A.jbpc.20.03.
- [3] Gomidze N.Kh., **Shainidze J.J.**, Khajishvili M.R., Jabnidze I.N., Makharadze K.A., Kalandadze L.G., Nakashidze O.M., Surmanidze Z.J., Mskhaladze E.N., Gomidze L.N. 3D fluorescence spectroscopy to study the distribution of bioparticles. International Scientific Conference Modern Research Methods of Bio-Nano-Agents, 24-26 November, pp.21-27, BSU, Batumi. ISBN: 978-9941-488-46-7.
- [4] Khajishvili M., Gomidze N., **Shainidze J.** Estimation SNR of CCD camera for OD medium. The Eurasia Proceedings of Science, Technology, Engineering & Mathematics (EPSTEM). ISBN:978-605-73797-9-5 ISSN: 2602-3199, Publication date: 2022, Pages: 130-138.
- [5] Khajishvili M., Gomidze N., **Shainidze J.** 3D Fluorescence Spectroscopy of Liquid Media via Internal Reference Method, Research and Education: Traditions and Innovations, 59-71, https://doi.org/10.1007/978-981-19-0379-3_7
- [6] Khajishvili M., **Shainidze J.**, Makharadze K. & Gomidze N. (2023). On the development of the fluorescence excitation-emission etalon matrix algorithm of wine. The Eurasia Proceedings of Science, Technology, Engineering & Mathematics (EPSTEM), 23, 93-99.
- [7] **Shainidze J.**, Gomidze N. Creating Fluorescence Spectra Based On The Franck-Condon Factor, Open Readings 2023, p.271 81
- [8] **Shainidze, J. J.**, & Gomidze, N. K. (2023). OPTIMIZING QE OF CCD BY MODIFYING BLACKCOMET DETECTOR. *Book of Abstracts JAPMED, 12*, 44-46

შედეგები მოხსენებულია საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციებზე:

1. იაპონია-ხმელთაშუა ზღვის ქვეყნების XII საერთაშორისო სემინარი გამოყენებით ელექტრომაგნეტიზმში, მაგნიტური, ზეგამტარი, მრავალფუნქციური და ნაწილ მასალების კვლევაში (JAPMED'12), 17-20 ივლისი 2023, ბათუმი, საქართველო.

2. 66-ე საერთაშორისო კონფერენცია ფიზიკისა და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა სტუდენტებისთვის - Open Reading 2023, 18-21 აპრილი 2023, ვილნიუსი, ლიეტუვა.

დანართი 1. CCD დეტექტორის პროგრამული მართვა

კოდი Wolfram Mathematica-ში

```
(*CCD გამოსახულების გამოძახება ფაილიდან*)  
ccdImage = Import["path/to/image.fits"];  
(* ფონის კორექტირება*)  
background = MedianFilter[ccdImage, 5];  
backgroundSubtracted = ImageSubtract[ccdImage, background];  
(* ბრტყელი ველის კორექტირება*)  
flatField = Import["path/to/flatfield.fits"];  
flatFieldCorrected = ImageMultiply[backgroundSubtracted, 1/flatField];  
(*deconvolution *)  
psf = Import["path/to/psf.fits"];  
deconvolved = ImageDeconvolve[flatFieldCorrected, psf];  
(* ვიზუალიზაცია *)  
ImageCollage[{ccdImage, backgroundSubtracted, flatFieldCorrected, deconvolved}]
```

დანართი 2. დამუშავებული ნორმირებული სპექტრების ფორმირება

(* ფაილის გამოძახება *)

```
(* data = Import["path/to/your/fluorescence_data.csv"];
```

```
file = SystemDialogInput["FileOpen"];
```

```
data = Import[file];
```

(* Extract excitation wavelengths, emission wavelengths, and fluorescence intensities *)

```
{excitationWavelengths, emissionWavelengths, fluorescenceIntensities} = Transpose[data];
```

(* 3D ტენზორის ფორმირება ფაილში *)

```
tensorData = Transpose[Table[fluorescenceIntensities, {Length[emissionWavelengths]}], {2, 3, 1}];
```

(*PARAFAC decomposition *)

```
rank = 3;
```

```
{a, b, c} = FindTensorFactors[Parallelize[tensorData], rank];
```

(* Plot the factor vectors for excitation and emission wavelengths *)

```
ListLinePlot[Transpose[{excitationWavelengths, #}],
```

```
Frame -> True, FrameLabel -> {"Excitation Wavelength (nm)", "Intensity"}] & /@ a
```

```
ListLinePlot[Transpose[{emissionWavelengths, #}],
```

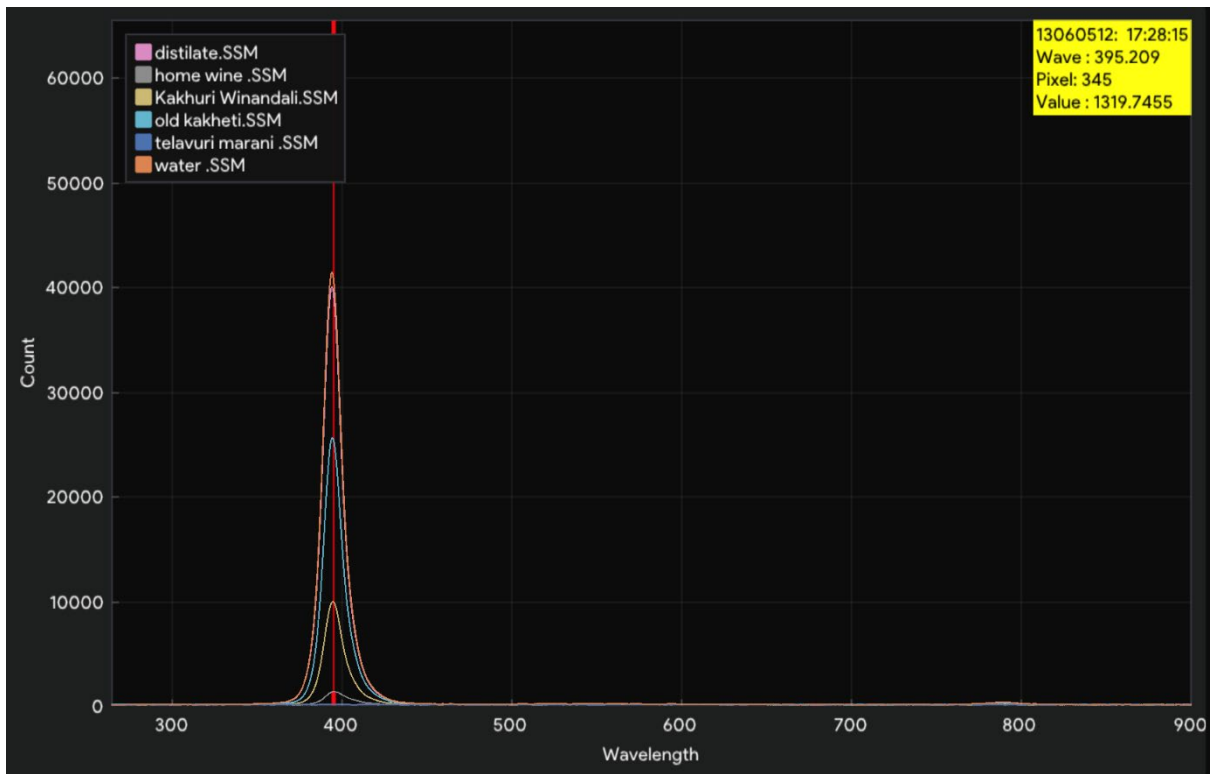
```
Frame -> True, FrameLabel -> {"Emission Wavelength (nm)", "Intensity"}] & /@ b
```

(* Plot contributions of each component to the fluorescence intensity for each sample *)

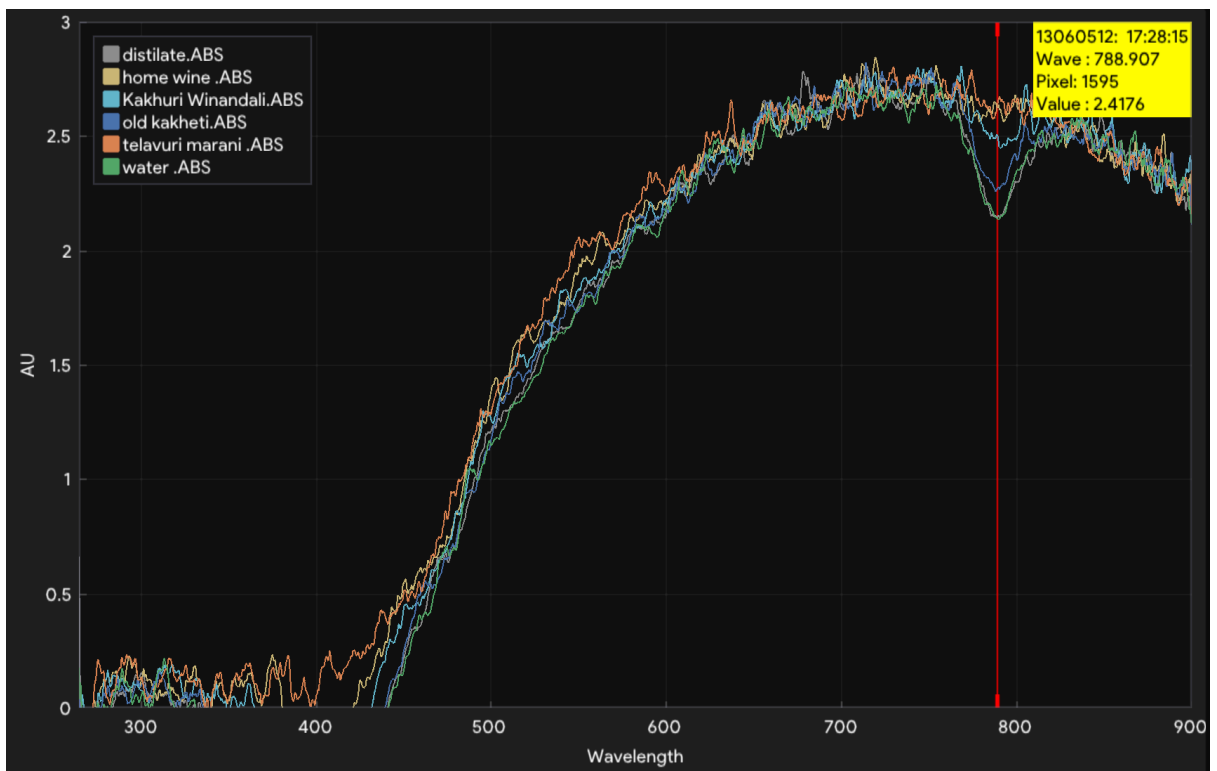
```
ListPlot[Transpose[c], PlotLegends -> Automatic, Frame -> True,
```

```
FrameLabel -> {"Sample", "Intensity"}]
```

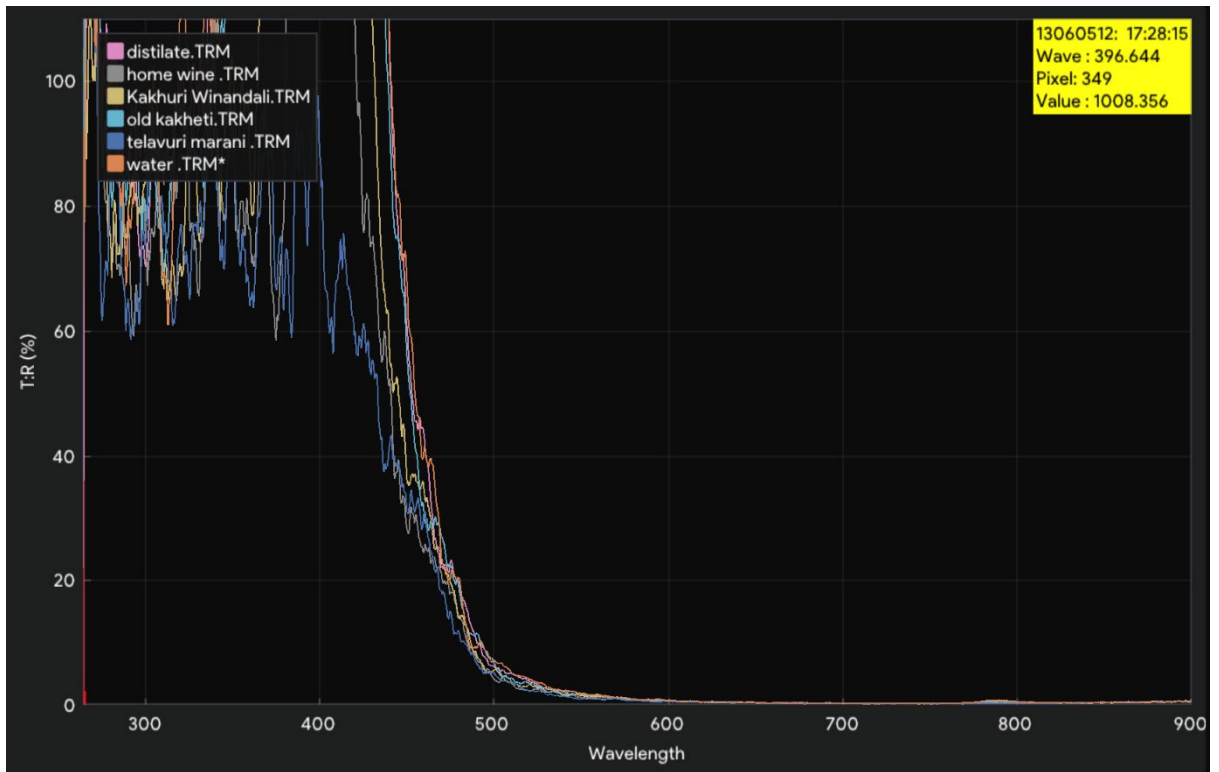
დანართი 3. ღვინის ნიმუშის სპექტრები



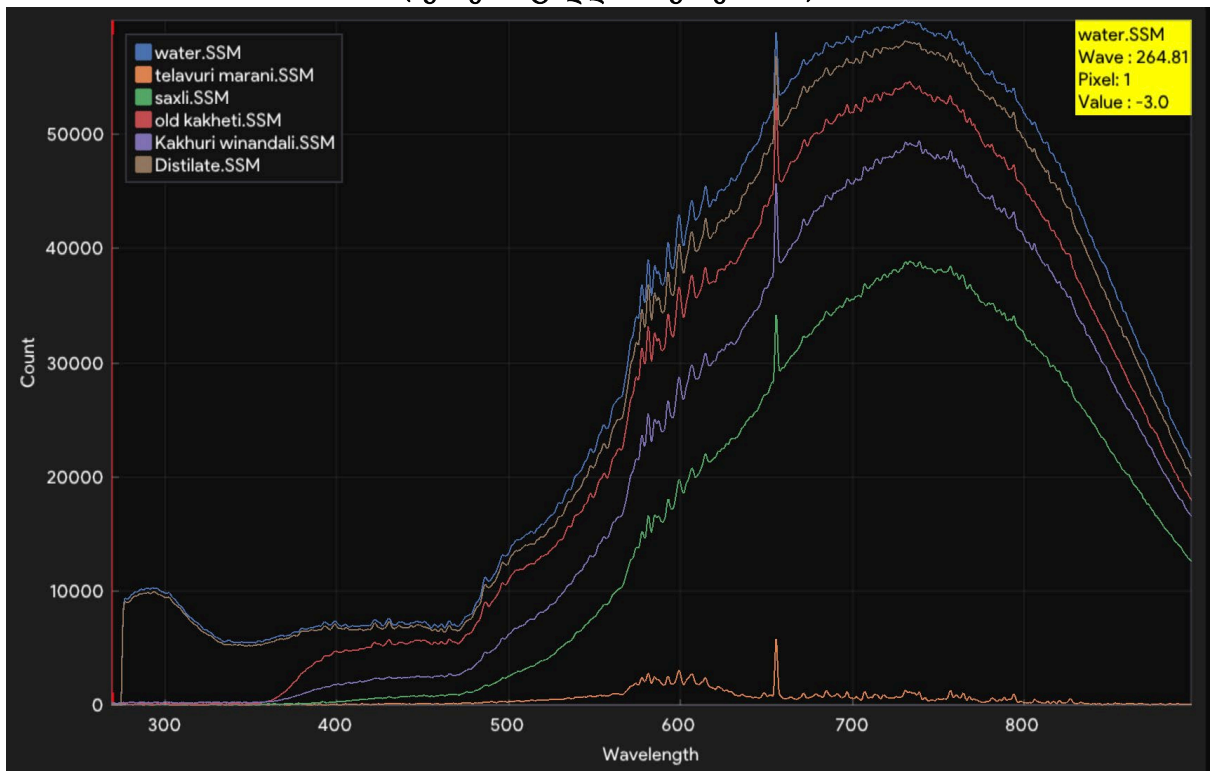
ნახ. A.1. ღვინის ნიმუშების სპექტროსკოპია ულტრაიისფერი (UV) LED ნათურით (აგზნების ტალღის სიგრძე 396 ნმ)



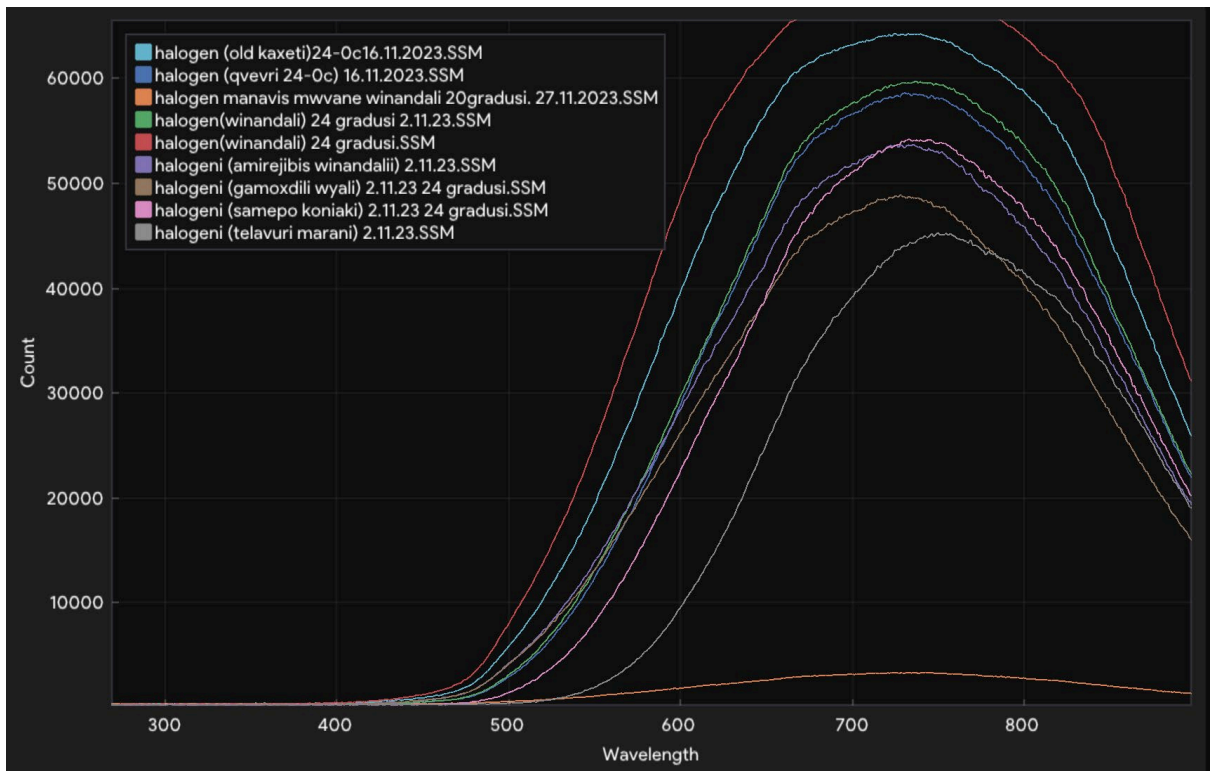
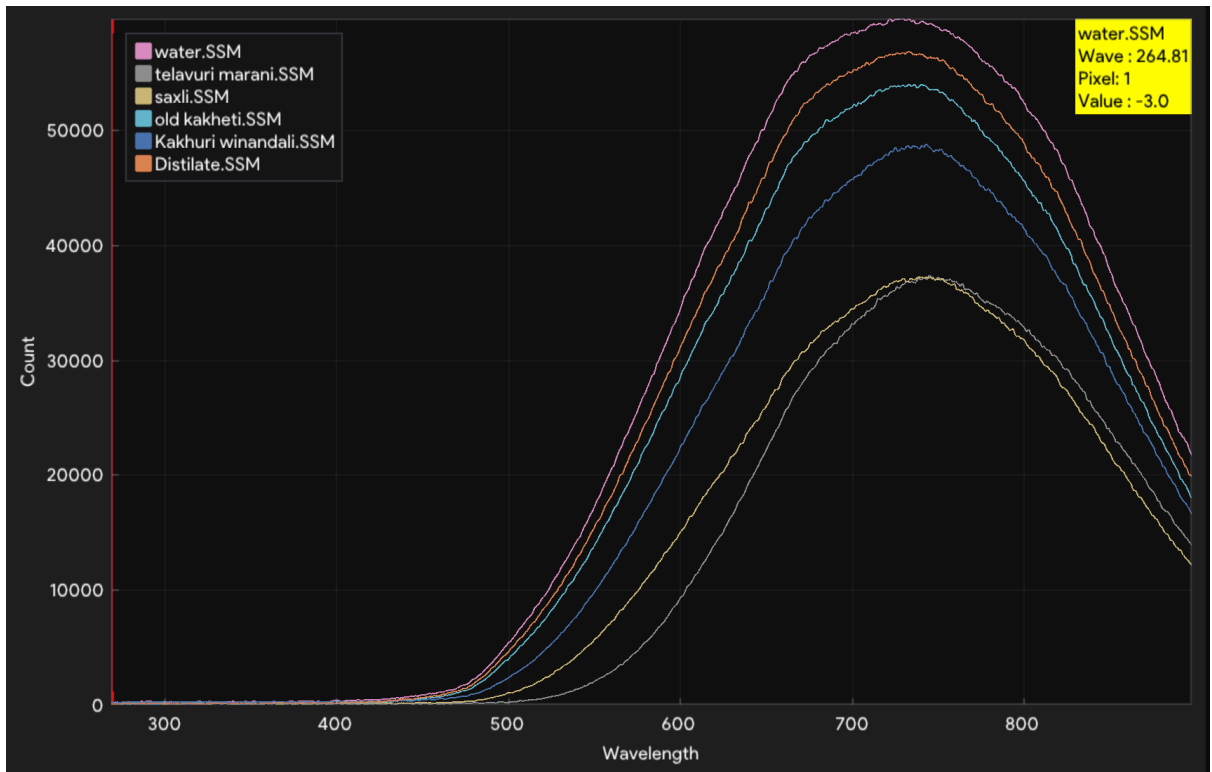
ნახ. A.2. ღვინის ნიმუშების შთანთქმის სპექტრები ულტრაიისფერი (UV) LED ნათურით (აგზნების ტალღის სიგრძე 396 ნმ)



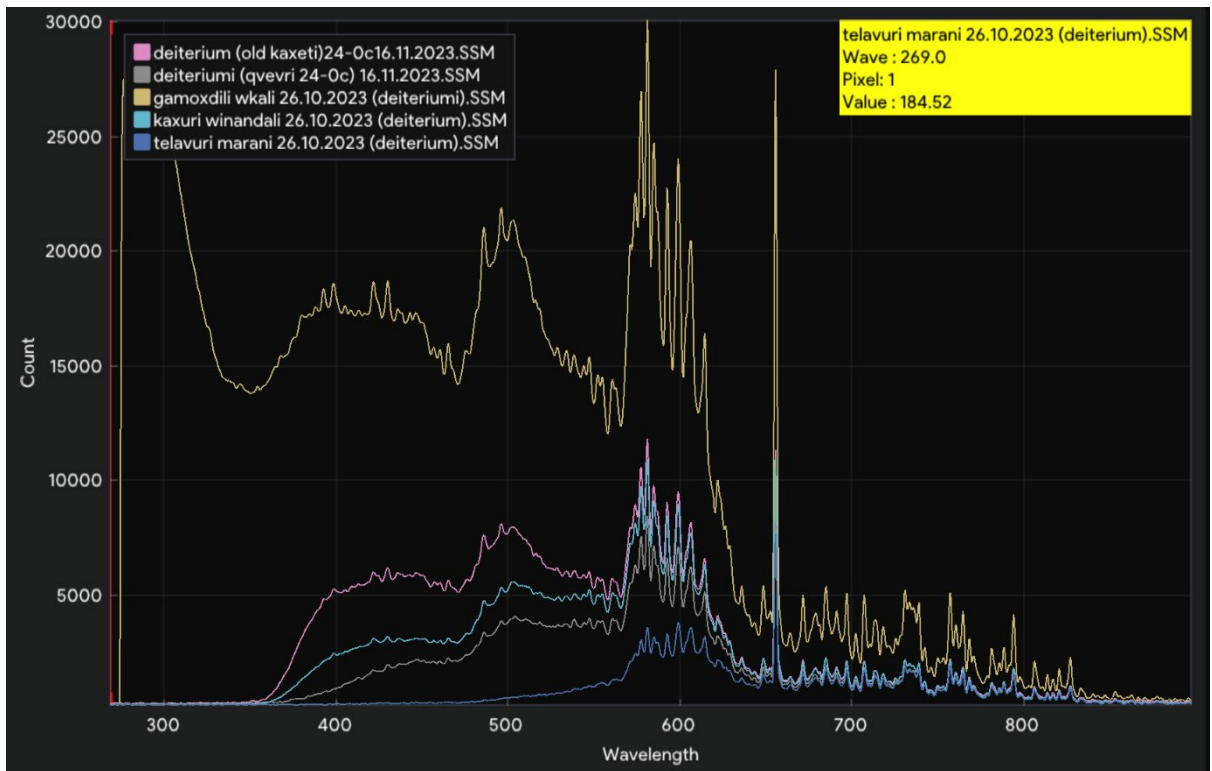
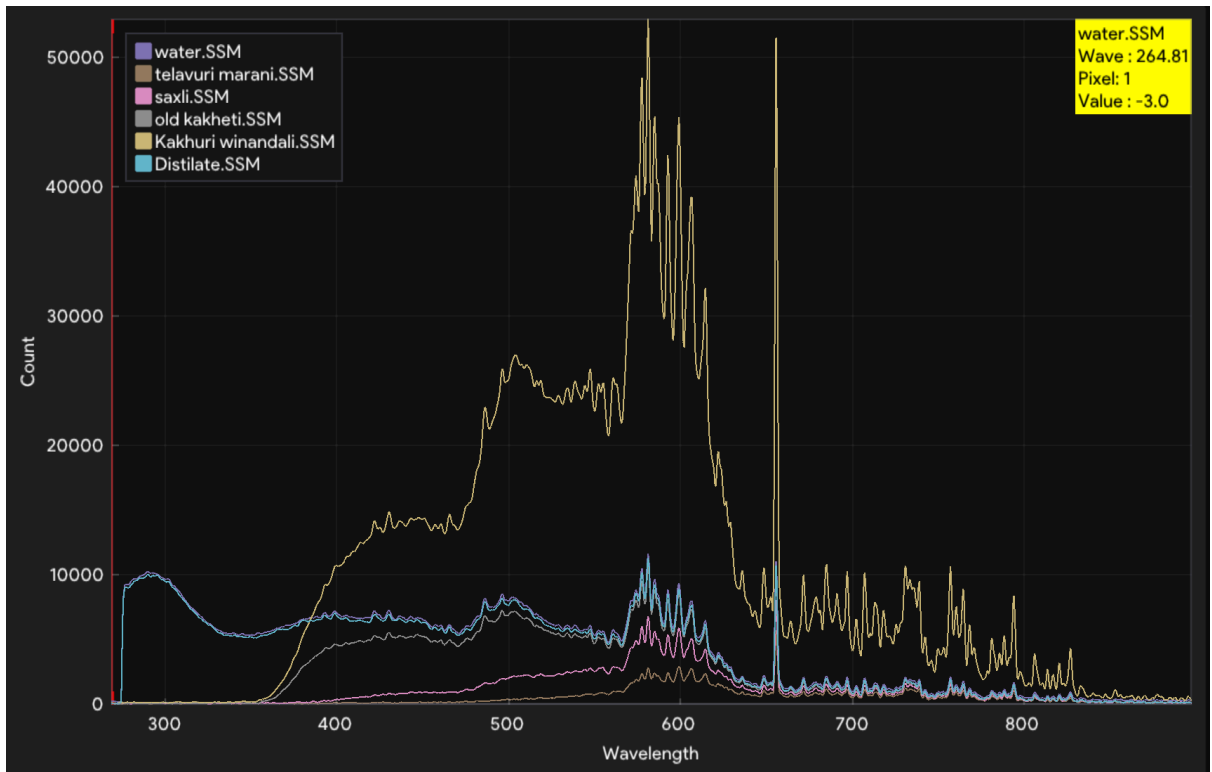
ნახ. A.3. ღვინის ნიმუშების სიგნალის გადაცემის სპექტრები ულტრაიისფერი (UV) LED ნათურით (აგზნების ტალღის სიგრძე 396 ნმ)



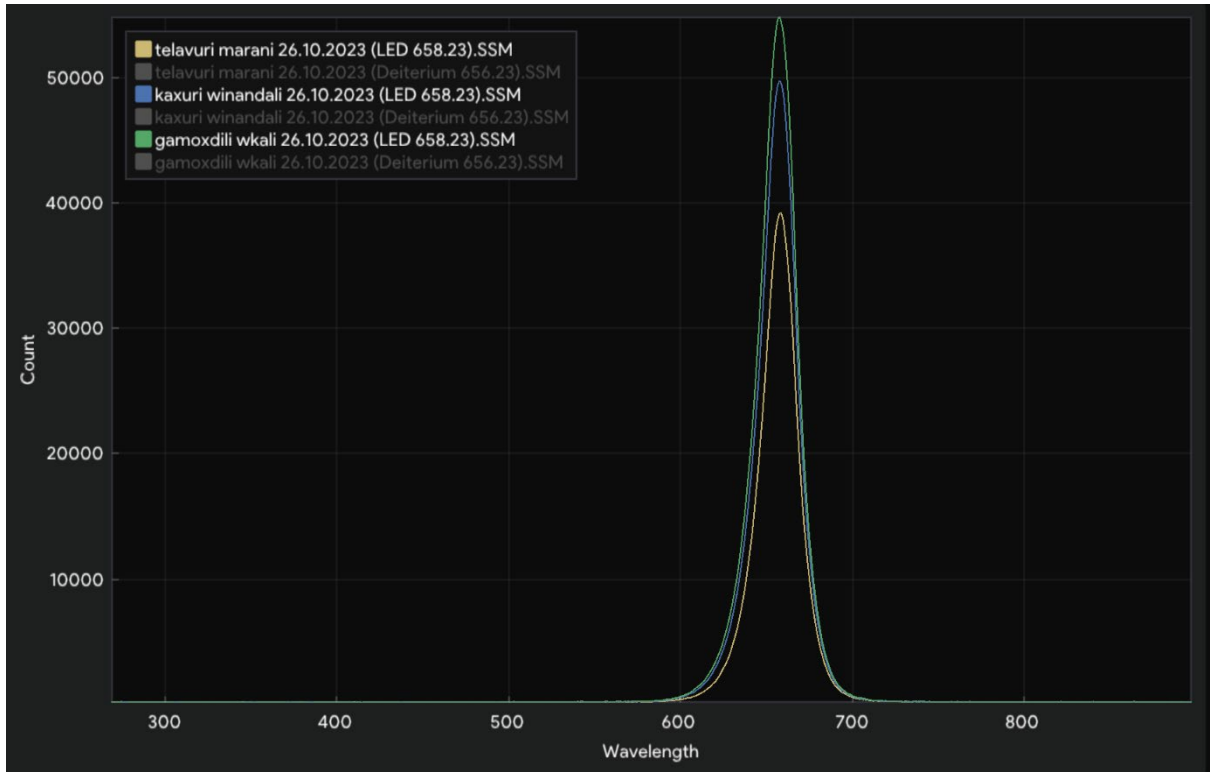
ნახ. A.4. ღვინის ნიმუშების სიგნალის სპექტრები ჰალოგენისა და დეიტერიუმის ნათურით ერთობლივად აგზნების შედეგად



ნახ. A.5. ღვინის ნიმუშების სიგნალის სპექტრები ჰალოგენური ნატურით (აგზნების ტალღის სიგრძე 396 ნმ)



ნახ. A.6. ღვინის ნიმუშების სიგნალის სპექტრები დეიტერიუმის ნატურით



ნახ. A.7. ღვინის ნიმუშების სიგნალის სპექტრები LED ნათებით (658 ნმ) ნათურით აგზნების შედეგად

გამოყენებული ლიტერატურა

- [1] დიმიტრაძე მ. (2020) შემთხვევითად - არაერთგვაროვანი ფაზური ეკრანის ლაზერულ ფლუორესცენციული სპექტროსკოპია. სამაგისტრო ნაშრომი, ბსუ.
- [2] მაჭავარიანი ზ. (2018). *ატომური ფიზიკა*. თსუ, ISBN 978-9941-13-722-8 (pdf)
- [3] ლომიძე ნ., ლომიძე ხ. (2022) *რადიოფიზიკა*. ISBN 978-9941-488-57-3. UDC(უაკ)621.39(075.8)ღ-796.
<https://rustaveli.org.ge/geo/200916031925tsignebi/radiofizika>
- [4] ლომიძე ნ., ჯაბნიძე ი., სურმანძე ზ. (2023) *ფიზიკური პროცესების მოდელირება*, ISBN 978-9941-488-72-6, UDC(უაკ) 53(075.8) ღ-792023
- [5] Alia, J. D., & Flack, J. A. (2020). Unspecified verticality of Franck–Condon transitions, absorption and emission spectra of cyanine dyes, and a classically inspired approximation. *RSC advances*, 10(70), 43153-43167.
- [6] Arnone, R. A., & Parsons, A. R. (2005). Real-time use of ocean color remote sensing for coastal monitoring. In *Remote Sensing of Coastal Aquatic Environments: Technologies, Techniques and Applications* (pp. 317-337). Dordrecht: Springer Netherlands.
- [7] Azcarate S. M. et al. Modeling excitation–emission fluorescence matrices with pattern recognition algorithms for classification of Argentine white wines according grape variety. *Food Chem.* 184, 214–219 (2015).
- [8] Batsaikhan, M., Ohba, H., Karino, T., Akaoka, K., & Wakaida, I. (2024). Simultaneous analysis of gadolinium and surface imaging using a fiber-coupled acoustic wave-assisted microchip LIBS system. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 39(2), 423-432.
- [9] Bautz, M., Foster, R., LaMarr, B., Malonis, A., Prigozhin, G., Miller, E., ... & Suntharalingam, V. (2018, July). Toward fast low-noise low-power digital CCDs for Lynx and other high-energy astrophysics missions. In *Space Telescopes and Instrumentation 2018: Ultraviolet to Gamma Ray* (Vol. 10699, pp. 238-248). SPIE.
- [10] Birks J., Munro I. *The Fluorescence Lifetimes of Aromatic Molecules*, Progress in Reaction Kinetics, vol. 4, Pergamon Press, Oxford, 196
- [11] Blinder S. M. (2004). *Introduction to Quantum Mechanics*, Amsterdam: Elsevier, pp. 229–232
- [12] Born, M. (1927). Born-oppenheimer approximation. *Ann. Phys*, 84, 457-484.
- [13] Bromley, S. J., Noonan, J. W., Cochran, A. L., Stachová, B., Országh, J., Ivanova, O., ... & Bodewits, D. (2024). An updated fluorescence emission model of CO⁺ for cometary science. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, stae456.
- [14] Cappai, A., Melis, C., Stagi, L., Ricci, P. C., Mocci, F., & Carbonaro, C. M. (2021). Insight into the Molecular Model in Carbon Dots through Experimental and Theoretical Analysis of Citrazinic Acid in Aqueous Solution. *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(8), 4836-4845.
- [15] Chang J.L. A new method to calculate Franck–Condon factors of multidimensional harmonic oscillators including the Duschinsky effect, *J. Chem. Phys.* 128 (2008) 174111-1–174111-12. <https://doi.org/10.1063/1.2916717>.

- [16] Chen, L., Zhang, X., Lin, J., & Sha, D. (2009). Signal-to-noise ratio evaluation of a CCD camera. *Optics & Laser Technology*, 41(5), 574-579.
- [17] Dahm, D., Dahm, K. (2007). *Interpreting Diffuse Reflectance and Transmittance: A Theoretical Introduction to Absorption Spectroscopy of Scattering Materials*. doi:10.1255/978-1-901019-05-6. ISBN 9781901019056.
- [18] Daily, J. W. (1997). Laser induced fluorescence spectroscopy in flames. *Progress in energy and combustion science*, 23(2), 133-199.
- [19] Davenport, J. J., Hodgkinson, J., Saffell, J. R., & Tatam, R. P. (2015). Noise analysis for CCD-based ultraviolet and visible spectrophotometry. *Applied Optics*, 54(27), 8135-8144.
- [20] Davitadze Z., Gomidze N., Makharadze K. Control Laser Spectrofluorimeter with Microcontrollers. *Journal of Advanced Materials Research Vol. 590* (2012), pp. 201-205. www.scientific.net/AMR.590.206
- [21] De Filippis, G., Cataudella, V., Mishchenko, A. S., Perroni, C. A., & Devreese, J. T. (2006). Validity of the Franck-Condon principle in the optical spectroscopy: optical conductivity of the Fröhlich polaron. *Physical review letters*, 96(13), 136405.
- [22] De la Viuda-Pérez, I., Navarro-Azor, R., Lalla, E. A., Rodríguez-Losada, J. A., Aquilano, R., Medina, J., & Rull-Pérez, F. (2016). Studies of Basalt Through Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) for the Manufacturing of Lapilli Blocks. *Minería y Geología*, 32(3), 78-95.
- [23] Devanesan, S., AlQahtani, F., AlSalhi, M. S., Jeyaprakash, K., & Masilamani, V. (2019). Diagnosis of thalassemia using fluorescence spectroscopy, auto-analyzer, and hemoglobin electrophoresis—A prospective study. *Journal of Infection and Public Health*, 12(4), 585-590
- [24] di Frischia, S., Chiuri, A., Angelini, F., & Colao, F. (2018, November). Optimization of signal-to-noise ratio in a CCD for spectroscopic applications. In *15th European Workshop on Advanced Control and Diagnosis* (pp. 439-452). Cham: Springer International Publishing.
- [25] Doležal, J., Canola, S., Hapala, P., de Campos Ferreira, R. C., Merino, P., & Švec, M. (2022). Evidence of exciton-libron coupling in chirally adsorbed single molecules. *Nature communications*, 13(1), 6008.
- [26] Duschinsky F. On the interpretation of electronic spectra of polyatomic molecules. I. The Franck-Condon principle, *Acta Physicochim. URSS* 7 (1937) 551–566.
- [27] Eisenthal K.B., *Chem. Phys. Letters*, 6, 155 (1970)
- [28] G. Reinaudi, T. Lahaye, Z. Wang and D. Guéry-Odelin, "Strong Saturation Absorption Imaging of Dense Clouds of Ultracold Atoms," *Optics Letters*, 32(21), 2007 pp. 3143–3145. doi:10.1364/ol.32.003143.
- [29] GE Health Care. *ÄKTA Laboratory-Scale Chromatography Systems - Instrument Management Handbook*. GE Healthcare Bio-Sciences AB, Uppsala, 2015. <https://cdn.gelifesciences.com/dmm3bwsv3/AssetStream.aspx?mediaformatid=10061&destinationid=10016&assetid=16189>.
- [30] Georgieva, I., Kossev, K., Titorenkova, R., Petrova, N., Zahariev, T., & Nikolova, R. (2022). Effect of urea on arrangement of novel Mg (II) perrhenate crystal structures

- and their optical properties: Experimental and theoretical insight. *Journal of Solid State Chemistry*, 312, 123263.
- [31] Gevin, O., Limousin, O., & Meuris, A. (2016, July). Front-end ASICs for high-energy astrophysics in space. In *Space Telescopes and Instrumentation 2016: Ultraviolet to Gamma Ray* (Vol. 9905, pp. 177-191). SPIE.
- [32] Gewali, U. B., Monteiro, S. T., & Saber, E. (2018). Machine learning based hyperspectral image analysis: a survey. arXiv preprint arXiv:1802.08701.
- [33] Gomidze N. Kh, Khajisvili M. R., Jabnidze I. N., Makharadze K. A., Surmanidze Z. J. To the Problems of Detecting Signals Passing Through a Random Phase Screen. *Journal "Recent Advances in Technology Research and Education"* Springer International Publishing. Print ISBN: 978-3-319-99833-6, Electronic ISBN: 978-3-319-99834-3, pp. 177-184, 2018.
- [34] Gomidze N., Shainidze J., Shengelia G., Turmanidze R. To the problems of fluorescence excitation spectrums. *International scientific journal "machines. Technologies. Materials."* web ISSN 1314-507X; print ISSN: 1313-0226, pp.279-282, 2018.
- [35] Gomidze N., Jabnidze I., Makharadze K., Khajishvili M., Shashikadze Z., Surmanidze Z., Surmanidze I. Numerical Analyses of Fluorescence Characteristics of Watery Media via Laser Spectroscopy Method. *Journal of Advanced Materials Research* Vol. 590 (2012), pp. 206-211. www.scientific.net/AMR.590.201
- [36] Gomidze N.Kh, Shashikadze Z.Kh., Makharadze K.A., Khajishvili M.R. About fluorescence excitation spectrums. 6th International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers. Conference Proceedings. 9-13 September (2013), Sudak, Ukraine, pp. 317-319.
- [37] Gomidze N.Kh., Jabnidze I.N., Surmanidze Z.J. Stroboscopic Method of Fluorescence Analyses of Optically Solid Media. 2016 IEEE 7th International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL). September 12-15, Odessa, Ukraine, pp. 34-36, 2016.
- [38] Gomidze N.Kh., Makharadze K.A., Khajishvili M.R., Jabnidze I.N., Shashikadze Z.Kh. Some Issues of Fluorescence Characteristics Aqueous Media via Diagnosis of Laser Spectroscopy Method. *International Journal of Engineering, Science and Innovative Technology*. ISSN No: 2319-5967 (ISO 9001:2008 Certified, Impact Factor of IJESIT is 1.753), №3, issue 3, pp.142-152, 2014.
- [39] Gomidze N.Kh., Shainidze J.J., Jabnidze I.N., Makharadze, K.A., Khajishvili M.R., Kalandadze L.G., Nakashidze O, Mshkhaladze E.N. Estimation of scintillation index for a Gaussian laser beam propagating through a random phase screen. *Journal of Biological Physics and Chemistry*, Vol. 20 (2020), doi: 10.4024/27GO19A.jbpc.20.03.
- [40] Gomidze N.Kh., Shainidze J.J., Khajishvili M.R., Jabnidze I.N., Makharadze K.A., Kalandadze L.G., Nakashidze O.M., Surmanidze Z.J., Mshkhaladze E.N., Gomidze L.N. 3D fluorescence spectroscopy to study the distribution of bioparticles. *International Scientific Conference Modern Research Methods of Bio-Nano-Agents*, 24-26 November, pp.21-27, BSU, Batumi. ISBN: 978-9941-488-46-7

- [41] Gritchenko, A. S., Eremchev, I. Y., Naumov, A. V., Melentiev, P. N., & Balykin, V. I. (2021). Single quantum emitters detection with amateur CCD: Comparison to a scientific-grade camera. *Optics & Laser Technology*, 143, 107301.
- [42] Guyon F., Magdas A. Application of fluorescence spectroscopy using classical right angle technique in white wines classification. (2019).
- [43] Han, S. (2019). Utility analysis for optimizing compact adaptive spectral imaging systems for subpixel target detection applications. Rochester Institute of Technology.
- [44] He, Y., Ott, C., Pfeifer, T., & Gaarde, M. B. (2024). Local enhancement in transient absorption spectroscopy by gating the resonance in the time domain. *Physical Review Research*, 6(1), 013103.
- [45] Henrichs, C., Hebestreit, M. L., Krügler, D., & Schmitt, M. (2020). Structural changes upon electronic excitation in 1, 2-dimethoxybenzene from Franck-Condon fits of the fluorescence emission spectra. *Journal of Molecular Structure*, 1211, 127855.
- [46] Hoppe, W., Lohmann, W., Markl, H., Ziegler, H. *Biophysics*, New York: Springer-Verlag, 1983.
- [47] Hossain, A. (2023). Spectral simulation and method design of camouflage textiles for concealment of hyperspectral imaging in UV-Vis-IR against multidimensional combat background. *The Journal of the Textile Institute*, 114(2), 331-342.
- [48] Hossain, M. A. (2021). Adaptive camouflage textiles with thermochromic colorant and liquid crystal for multidimensional combat background, a technical approach for advancement in defence protection. *American Journal of Materials Engineering and Technology*, 9(1), 31-47.
- [49] Ikeda, Y., Soriano, J. K., & Wakaida, I. (2022). Signal-to-noise ratio improvements in microwave-assisted laser-induced breakdown spectroscopy. *Talanta Open*, 6, 100138.
- [50] Inochkin, F., Kruglov, S., & Bronshtein, I. (2016, February). Increasing CCD frame rate and signal-to-noise ratio with high resolution capability using on-chip preprocessing and multisignal image representation. In *2016 IEEE NW Russia Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering Conference (EIconRusNW)* (pp. 209-213). IEEE.
- [51] Ishizawa, S., Kurosawa, S., Kurashima, Y., Kodama, S., Morishita, Y., Yamaji, A., ... & Tanaka, H. (2023). Optical and scintillation properties of Yb-doped La₂Hf₂O₇ crystal grown by core heating method for fiber reading remote-dosimetry system. *Optical Materials*, 142, 113941.
- [52] Ishizawa, S., Kurosawa, S., Kurashima, Y., Kodama, S., Morishita, Y., Yamaji, A., ... & Tanaka, H. (2023). Optical and scintillation properties of Yb-doped La₂Hf₂O₇ crystal grown by core heating method for fiber reading remote-dosimetry system. *Optical Materials*, 142, 113941.
- [53] IUPAC, *Compendium of Chemical Terminology*, 2nd ed. (the "Gold Book") (1997). Online corrected version: (2006–) "decadic absorbance". doi:10.1351/goldbook.D01536
- [54] Ji, C., Xu, H., Yu, H., Cui, Z., Fan, J., & Zhai, Z. (2024). An online monitoring device for measuring the concentration of four types of in-situ microorganisms by using the

- near-infrared band. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 310, 123895.
- [55] Kanou, M., Kameoka, T., Suehara, K. I., & Hashimoto, A. (2017). Mid-infrared spectroscopic analysis of saccharides in aqueous solutions with sodium chloride. *Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry*, 81(4), 735-742.
- [56] Kastrati, A., Oswald, F., Scalabre, A., & Fromm, K. M. (2023). Photophysical Properties of Anthracene Derivatives. *Photochem*, 3(2), 227-273.
- [57] Khajishvili M., Gomidze N., Shainidze J. Estimation SNR of CCD camera for OD medium. *The Eurasia Proceedings of Science, Technology, Engineering & Mathematics (EPSTEM)*. ISBN:978-605-73797-9-5 ISSN: 2602-3199, Publication date: 2022, Pages: 130-138.
- [58] Khajishvili M., Shainidze J., Makharadze K. & Gomidze N. (2023). On the development of the fluorescence excitation-emission etalon matrix algorithm of wine. *The Eurasia Proceedings of Science, Technology, Engineering & Mathematics (EPSTEM)*, 23, 93-99.
- [59] Khajishvili, M., Gomidze, N., Jabnidze, I., Makharadze, K., Kalandadze, L., & Nakashidze, O. (2023). CREATION 3D FLUORESCENCE SPECTRA OF WINE. *Book of Abstracts JAPMED*, 12, 100-102.
- [60] Khajisvili M.R., Gomidze N.Kh, ShainidzeJ.J. 3D Fluorescence Spectroscopyof Liquid mediavia internal reference method. *INTER-ACADEMIA 2021: Research and Education: Traditions andInnovations, Partof the Lecture Notes in Networks and Systems book series (LNNS,volume 422,pp.59-71)*. DOI: 10.1007/978-981-19-0379-3_7.
- [61] Khajisvili, M. R., Gomidze, N. K., & Shainidze, J. J. (2021, October). 3D fluorescence spectroscopy of liquid media via internal reference method. In *International Conference on Global Research and Education* (pp. 59-71). Singapore: Springer Singapore
- [62] Khaoua, I., Graciani, G., Kim, A., & Amblard, F. (2021). Detectivity optimization to measure ultraweak light fluxes using an EM-CCD as binary photon counter array. *Scientific Reports*, 11(1), 3530.
- [63] Kodama, S., Kurosawa, S., Ohno, M., Morishita, Y., Usami, H., Hayashi, M., ... & Torii, T. (2020). Fiber-read radiation monitoring system using an optical fiber and red-emitting scintillator for ultra-high-dose conditions. *Applied Physics Express*, 13(4), 047002.
- [64] Konnik, M., & Welsh, J. (2014). High-level numerical simulations of noise in CCD and CMOS photosensors: review and tutorial. *arXiv preprint arXiv:1412.4031*.
- [65] Kundu, S., Roy, P. P., Fleming, G. R., & Makri, N. (2022). Franck–Condon and Herzberg–Teller signatures in molecular absorption and emission spectra. *The Journal of Physical Chemistry B*, 126(15), 2899-2911.
- [66] Lapi, A. J., Blanco, C. R. C., Chierchie, F., Moroni, G. F., Paolini, E. E., Estrada, J., & Tiffenberg, J. (2023). A digital CCD noise reduction technique experimentally tested on a large batch of scientific sensors. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*.

- [67] Lapi, A. J., Chierchie, F., Moroni, G. F., Stefanazzi, L., Paolini, E., Estrada, J., ... & Tiffenberg, J. (2022, August). Fast readout of the Skipper CCD for astronomy and quantum imaging. In *X-Ray, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy X* (Vol. 12191, pp. 280-293). SPIE.
- [68] Lenhardt Acković, L., Zeković, I., Dramićanin, T., Bro, R., & Dramićanin, M. D. (2018). Modeling food fluorescence with PARAFAC. *Reviews in Fluorescence* 2017, 161-197.
- [69] Li, L., Dai, C., Wu, Z., & Wang, Y. (2017, October). Stray light and bandwidth corrections for commercial CCD array spectrometers. In *AOPC 2017: Space Optics and Earth Imaging and Space Navigation* (Vol. 10463, pp. 362-368). SPIE.
- [70] Luo, Y., Fu, L., & Nan, J. (2023, April). Design of CCD system for deep space spectral imaging detection. In *Ninth Symposium on Novel Photoelectronic Detection Technology and Applications* (Vol. 12617, pp. 426-434). SPIE.
- [71] Maciulevičius, M., Jurkonis, R., Jakovels, D., Raišutis, R., & Tamošiūnas, M. (2024). The evaluation of microbubble concentration using the techniques of optical spectroscopy. *Measurement*, 114372.
- [72] Magdas D. A., Cintă Pinzaru, S., Guyon, F., Feher, I. & Cozar, B. I. Application of SERS technique in white wine discrimination. *Food Control*. 92, 30–36 (2018).
- [73] Maione, B., Brickson, L., Kudenov, M., & Escuti, M. (2016, May). Narrowband emission line imaging spectrometry using Savart plates. In *Polarization: Measurement, Analysis, and Remote Sensing XII* (Vol. 9853, pp. 68-78). SPIE.
- [74] Maniya, N. H., & Srivastava, D. N. (2020). Fabrication of porous silicon based label-free optical biosensor for heat shock protein 70 detection. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 115, 105126.
- [75] Mein, P., Malherbe, J. M., Sayède, F., Rudawy, P., Phillips, K. J. H., & Keenan, F. P. (2021). Four decades of advances from MSDP to S4I and SLED imaging spectrometers. *Solar Physics*, 296, 1-23.
- [76] Miller, E. D., Bautz, M. W., Grant, C. E., Foster, R., LaMarr, B., Malonis, A., ... & Reynolds, C. (2023, September). The high-speed X-ray camera on AXIS. In *UV, X-Ray, and Gamma-Ray Space Instrumentation for Astronomy XXIII* (Vol. 12678, pp. 317-333). SPIE.
- [77] Minkova, S., Vladev, V., Hristova-Aqakumova, N., Gabrova, R., Nikolova, K., Evtimov, T., & Hadjimitova, V. (2019, January). Comparative study of the characteristics of red Bulgarian and French wines using applied photonics methods. In *20th International Conference and School on Quantum Electronics: Laser Physics and Applications* (Vol. 11047, pp. 142-147). SPIE.
- [78] Morse, P. M. (1929). Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. *Physical Review*, 34(1), 57-64. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.57>
- [79] Obana, A., Gohto, Y., Tanito, M., Okazaki, S., Gellermann, W., Bernstein, P. S., & Ohira, A. (2014). Effect of age and other factors on macular pigment optical density measured with resonance Raman spectroscopy. *Graefes Archive for Clinical and Experimental Ophthalmology*, 252, 1221-1228.

- [80] Obana, A., Ote, K., Gohto, Y., Yamada, H., Hashimoto, F., Okazaki, S., & Asaoka, R. (2024). Deep learning-based correction of cataract-induced influence on macular pigment optical density measurement by autofluorescence spectroscopy. *Plos one*, 19(2), e0298132.
- [81] Paesani, F., & Voth, G. A. (2009). The properties of water: Insights from quantum simulations. *The Journal of Physical Chemistry B*, 113(17), 5702-5719.
- [82] Parigger, C. G., & Hornkohl, J. O. (2019). *Quantum Mechanics of the Diatomic Molecule with Applications*. IOP Publishing
- [83] Prigozhin, G., Cooper, M., Donlon, K., Leitz, C., LaMarr, B., Malonis, A., ... & Bautz, M. (2022, August). Latest results for a fast low noise CCD readout based on pJFET. In *X-Ray, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy X* (Vol. 12191, pp. 471-478). SPIE.
- [84] Quatela, A., Gilmore, A. M., Gall, K. E. S., Sandros, M., Csatorday, K., Siemiarczuk, A., ... & Camenen, L. (2018). A-TEEMTM, a new molecular fingerprinting technique: Simultaneous absorbance-transmission and fluorescence excitation-emission matrix method. *Methods and Applications in Fluorescence*, 6(2), 027002.
- [85] Rafik, A., Lakhdar, F., Zouihri, H., Guedira, T., Acharjee, N., Islam, M. S., ... & Zeroual, A. (2024). Experimental and Theoretical Study of Hybrid Dihydrogen Phosphate System: Insights into Bulk Growth, Chemical Etching, Non-Linear Optical Properties, and Antimicrobial Activity.
- [86] Reichert, M., Defienne, H., & Fleischer, J. W. (2018). Optimizing the signal-to-noise ratio of biphoton distribution measurements. *Physical Review A*, 98(1), 013841. 30
- [87] Reusch, W. "Visible and Ultraviolet Spectroscopy". Retrieved 2014-10-29
- [88] Russ, R. (2004-09-01). "How Many? A Dictionary of Units of Measurement". *Unc.edu*. Archived from the original on 1998-12-03. Retrieved 2010-09-20
- [89] Rybkin, V. V. (2017). Franck–Condon theory of quantum mechanochemistry. *The Journal of Physical Chemistry A*, 121(30), 5758-5762.
- [90] Saikia, D., Jadhav, P., Hole, A. R., Krishna, C. M., & Singh, S. P. (2022). Growth kinetics monitoring of gram-negative pathogenic microbes using raman spectroscopy. *Applied Spectroscopy*, 76(10), 1263-1271.
- [91] Sampaio, F. G., Del Lama, L. S., Sato, R., de Oliveira, D. M., Czelusniak, C., de Oliveira, L. N., & de Almeida, A. (2013). Quality assurance of a two-dimensional CCD detector system applied in dosimetry. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 60(2), 810-816.
- [92] Sasinska, A., Bialuschewski, D., Islam, M. M., Singh, T., Deo, M., & Mathur, S. (2017). Experimental and theoretical insights into influence of hydrogen and nitrogen plasma on the water splitting performance of ALD grown TiO₂ thin films. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(29), 15538-15548.
- [93] Saunders, J. E., Sanders, C., Chen, H., & Loock, H. P. (2016). Refractive indices of common solvents and solutions at 1550 nm. *Applied optics*, 55(4), 947-953.
- [94] Senesi, G. S., Harmon, R. S., & Hark, R. R. (2021). Field-portable and handheld laser-induced breakdown spectroscopy: Historical review, current status and future prospects. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 175, 106013.

- [95] Šesták, J., Planeta, J., & Kahle, V. (2020). Compact optical detector utilizing light emitting diodes, 50 nL L-shaped silica capillary cell and CCD spectrometer for simultaneous multi-wavelength monitoring of absorbance and fluorescence in microcolumn liquid chromatography. *Analytica chimica acta*, 1112, 80-91.
- [96] Shainidze J., Gomidze N. Creating Fluorescence Spectra Based On The Franck-Condon Factor, *Open Readings 2023*, p.271
- [97] Shainidze, J. J., & Gomidze, N. K. (2023). OPTIMIZING QE OF CCD BY MODIFYING BLACKCOMET DETECTOR. *Book of Abstracts JAPMED, 12*, 44-46
- [98] Shankar, U., Sethi, S. K., Singh, B. P., Kumar, A., Manik, G., & Bandyopadhyay, A. (2021). Optically transparent and lightweight nanocomposite substrate of poly (methyl methacrylate-co-acrylonitrile)/MWCNT for optoelectronic applications: an experimental and theoretical insight. *Journal of Materials Science*, 56(30), 17040-17061.
- [99] Sikorska, E., Włodarska, K., & Khmelinskii, I. (2020). Application of multidimensional and conventional fluorescence techniques for classification of beverages originating from various berry fruit. *Methods and Applications in Fluorescence*, 8(1), 015006.
- [100] Singh, V. R., Choi, H., Yew, E. Y., Bhattacharya, D., Yuan, L., Sheppard, C. J., ... & So, P. T. (2012). Improving signal-to-noise ratio of structured light microscopy based on photon reassignment. *Biomedical optics express*, 3(1), 206-214.
- [101] Small, T. V., Butler, S. D., & Marciniak, M. A. (2021). Uncertainty analysis for CCD-augmented CASI® BRDF measurement system. *Optical Engineering*, 60(11), 114101-114101.
- [102] Smith, C. S., Slotman, J. A., Schermelleh, L., Chakrova, N., Hari, S., Vos, Y., ... & Stallinga, S. (2021). Structured illumination microscopy with noise-controlled image reconstructions. *Nature methods*, 18(7), 821-828.
- [103] Smith, D. R., & Hobson, P. R. (2017). Spectrometer Testing: Dark frame evaluation of StellarNet Black Comet spectrometer.
- [104] Spivak, G. (2010). The Comet-FISH assay for the analysis of DNA damage and repair. *Fluorescence in situ Hybridization (FISH) Protocols and Applications*, 129-145.
- [105] Štádlerová, B., Dědina, J., & Musil, S. (2023). Comparison of bismuth atomic lamps for a non-dispersive atomic fluorescence spectrometry. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 205, 106692.
- [106] Štádlerová, B., Kolrosová, M., Dědina, J., & Musil, S. (2020). Atomic fluorescence spectrometry for ultrasensitive determination of bismuth based on hydride generation—the role of excitation source, interference filter and flame atomizers. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 35(5), 993-1002.
- [107] Stroyuk, O., Raievska, O., Osvet, A., Hauch, J., & Brabec, C. J. (2023). An insight into the temperature dependence of photoluminescence of a highly-emissive Cs-Ag (Na) Bi (In) Cl 6 perovskite. *Journal of Materials Chemistry C*, 11(13), 4328-4332.
- [108] Suciú, R. C., Zarbo, L., Guyon, F., & Magdas, D. A. (2019). Application of fluorescence spectroscopy using classical right angle technique in white wines classification. *Scientific reports*, 9(1), 18250.

- [109] Sugiura, Y., & Takayanagi, T. (2020). Franck–Condon simulations of transition-state spectra for the OH+ H₂O and OD+ D₂O reactions. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(36), 20685–20692.
- [110] Sun, X., Wang, X., Wang, F., Cao, Y., Ding, X., Dou, Y., ... & Huang, C. (2024). Reconstruction Filters Improving the Spatial Resolution and Signal-to-Noise Ratio of Surface Plasmon Resonance Microscopy. *Analytical Chemistry*, 96(2), 636–641.
- [111] Tadgell, B., Ponomareva, E., Karg, M., & Mulvaney, P. (2022). Temperature-Jump Spectroscopy of Gold–Poly (N-isopropylacrylamide) Core–Shell Microgels. *The Journal of Physical Chemistry C*, 126(8), 4118–4131.
- [112] Videen G., Ngo D. "Light Scattering from a Cell," in *Optics of Biological Particles*, NATO Science Series, Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, Vol. 238, (A. Hoekstra, V. Maltsev, and G. Videen, eds.), New York: Springer, 2007.
- [113] Villalpando, E. M., Drlica-Wagner, A., Malagón, A. A. P., Bakshi, A., Bonati, M., Campa, J., ... & Tiffenberg, J. (2023). Characterization and Optimization of Skipper CCDs for the SOAR Integral Field Spectrograph. arXiv preprint arXiv:2311.00813.
- [114] Wang, A., Xing, S., Zhao, Y., Wu, H., & Iwahori, Y. (2022). A hyperspectral image classification method based on adaptive spectral spatial kernel combined with improved vision transformer. *Remote Sensing*, 14(15), 3705.
- [115] Wang, L. V., & Wu, H. I. (2007). *Biomedical optics: principles and imaging*. John Wiley & Sons
- [116] Wilhelm, P., Vogelsang, J., Schönfelder, N., Höger, S., & Lupton, J. M. (2019). Anomalous linear dichroism in bent chromophores of π -conjugated polymers: departure from the franck-condon principle. *Physical Review Letters*, 122(5), 057402.
- [117] Zacharioudaki, D. E., Ftilis, I., & Kotti, M. (2022). Review of fluorescence spectroscopy in environmental quality applications. *Molecules*, 27(15), 4801.
- [118] Zhang, D., Wang, R., Wang, X., & Gogotsi, Y. (2023). In situ monitoring redox processes in energy storage using UV–Vis spectroscopy. *Nature Energy*, 8(6), 567–576.
- [119] Zhang, L., Li, B., Li, H., Gu, G., & Wang, X. (2023). Signal-to-noise ratio analysis based on different space remote sensing instruments. *IEEE Photonics Journal*.
- [120] Zhang, Y., Wang, H., Li, H., Sun, J., Liu, H., & Yin, Y. (2022). Optimization model of signal-to-noise ratio for a typical polarization multispectral imaging remote sensor. *Sensors*, 22(17), 6624.
- [121] Zixuan Fu , Xianfeng Zheng , Jun Liang, A general analytical expression for evaluation of an arbitrary n-dimensional Franck-Condon overlap integral including the Duschinsky effect, *Computational and Theoretical Chemistry* 1207 (2022) 113501