

УДК 543.08

Р.А. Быстров (5 курс, каф. ИСЭБ), В.А. Цветков, к.т.н., доц.

## ВИРТУАЛЬНАЯ ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА: ИНФРАКРАСНЫЙ СПЕКТРОФОТОМЕТР

На сегодняшний день спектральный метод анализа является основным при анализе загрязнения атмосферного воздуха. Большое количество фирм занимаются выпуском инфракрасных дисперсионных спектрофотометров. Отсутствие такового в комплексе лабораторных работ по курсу «Методы и приборы контроля окружающей среды» привело к потребности создания виртуальной лабораторной работы, имитирующей работу спектрофотометра Specord-M80. Работа создана в среде разработки LabVIEW компании National Instruments, получила название VirtualSpecord и предназначена для обучения студентов процессу определения состава неизвестной пробы. В работе имитированы некоторые важнейшие параметры работы прибора, понимание которых необходимо для понимания метода в целом. Контроль понимания материала производится преподавателем в предметной беседе со студентом.

Инфракрасную радиацию поглощают многие газы, за исключением таких как  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $H_2$ ,  $Cl_2$  и одноатомных газов. Спектр поглощения одноатомных газов или паров металлов отличается от инфракрасных спектров поглощения молекул своей относительной простотой и состоит не из полос, а из отдельных линий, во многих случаях расположенных только в ультрафиолетовой области спектра.

Как инфракрасные, так и ультрафиолетовые спектры поглощения, в зависимости от природы данного вещества, имеют индивидуальный характер, как отпечатки пальцев у человека, что и позволяет идентифицировать эти вещества. ИК-спектр молекулы представляют собой ряд относительно узких полос поглощения, каждая из которых соответствует определенной частоте колебаний всех или какой-либо выделенной группы атомов, составляющих молекулу. Отнесение отдельных колебаний к определенным полосам поглощения в спектре проводят на основании общих закономерностей вероятностных частот различных типов колебаний.

Вещество можно идентифицировать путем сопоставления спектра исследуемого вещества со спектром эталона. С помощью спектрофотометра Specord-M80 можно получить спектр пропускания вещества; спектр эталона берём из базы данных HITRAN-87, которая содержит линии пропускания всех ранее исследованных веществ. Сличение этих спектров производится в программе TRANS – программе, предназначенной для расчета монохроматического оптического пропускания слоя газа для моделирования спектров конкретных газов или двухкомпонентных газовых смесей с однородным давлением и температурой, а также для расчета пропускания с учетом аппаратной функции спектрофотометра. Суть выполнения работы, как на реальном, так и на виртуальном приборе состоит в сравнении спектров пропускания неизвестной пробы и газа, спектр которого смоделирован в программе TRANS.

Целью лабораторной работы является имитация работы спектрофотометра Specord-M80 в ознакомительном порядке. Передняя панель виртуального прибора изображена на рис.1 и содержит все органы управления прибором. Студент получает неизвестную виртуальную пробу, выбирая вариант задания. Варианты заданий в виде базы данных, содержащей спектры пропускания некоторых газов, заранее подготавливаются преподавателем с помощью программы TRANS и могут быть изменены преподавателем без изменения программы VirtualSpecord. Далее с помощью параметров работы виртуального спектрофотометра, таких как спектральный диапазон, шаг сканирования, щель монохроматора и время интегрирования, студенту предстоит представить спектр пропускания неизвестной пробы в наиболее удобном для дальнейшей обработки виде. В максимально точном режиме реальный спектрофотометр Specord M-80 работает довольно долго. Чтобы приблизить виртуальный про-

цесс вывода спектра к реальному искусственно созданы временные задержки в работе программы, пропорциональные детализации спектра. Таким образом, студент учится быстро работать с реальным прибором. Например, студент может в наименее качественном режиме быстро просмотреть весь спектр пропускания, а потом, выбрав нужный ему спектральный диапазон, увеличивать точность прорисовки спектра.

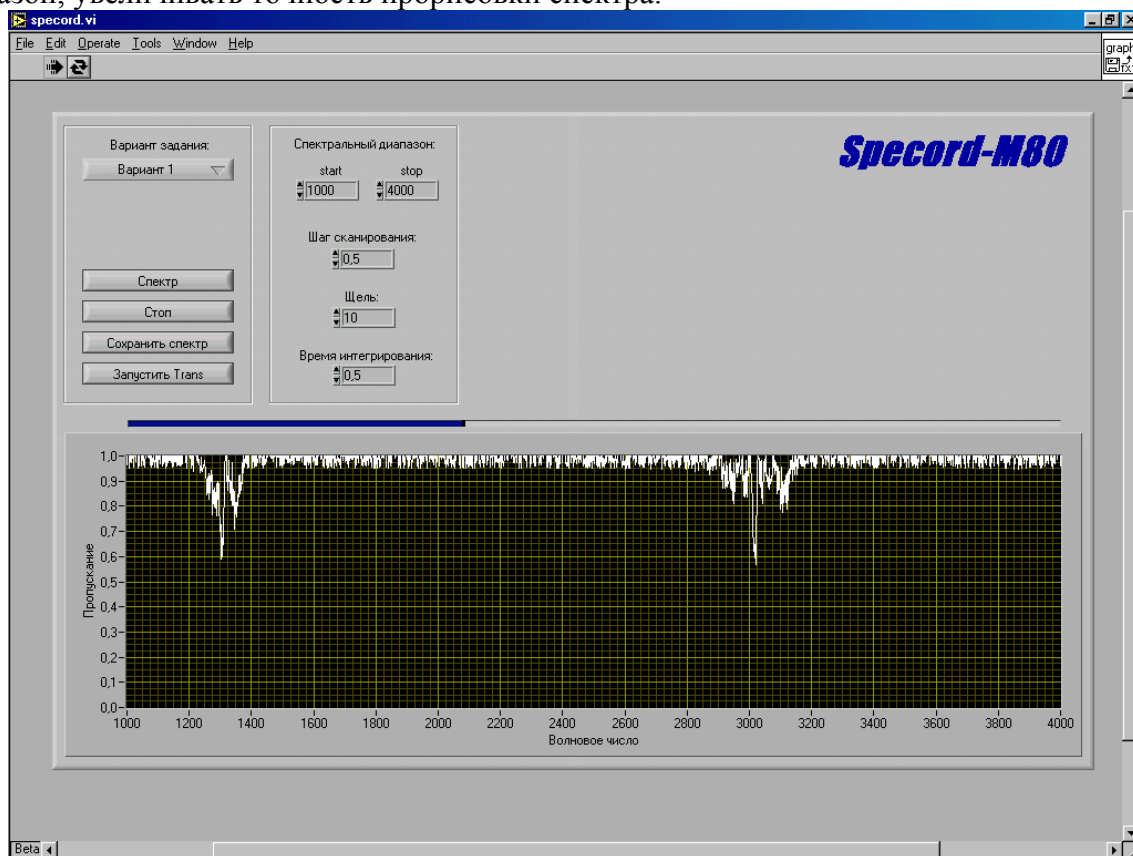


Рис.1. Передняя панель VirtualSpecord

С помощью параметра «шаг сканирования» в наихудшем режиме студент сможет оценить наличие линий пропускания в некоторой области спектрального диапазона, при последующем уменьшении шага сканирования линии поглощения будут прорисовываться детальнее. Изменяя параметр «щель монохроматора» студент будет управлять плавностью прорисовки линий спектра. Программным способом имитируются шумы в спектре пропускания, с помощью параметра «время интегрирования» студент сможет уменьшить эти шумы, чем существенно облегчит себе дальнейшее сличение полученного спектра с эталонным. В общем, для успешного сличения спектра пробы с эталоном студенту придётся оценить влияние всех параметров на получаемый спектр и научиться выбирать между качеством спектра и скоростью его получения.

Далее в задачу студента входит идентификация веществ в пробе. В программе TRANS ему предстоит смоделировать эталонный спектр пропускания предполагаемого газа или смеси газов, действуя либо методом проб и ошибок, либо опираясь на теоретические сведения, почерпнутые из курса лекций или справочных материалов. Моделирование эталона будет происходить до тех пор, пока спектр исследуемого вещества не совпадёт со спектром эталона. Лишь после этого можно будет определить качественный и количественный состав пробы.