

Распределение интенсивности на детекторе в зависимости от коэффициента поглощения объекта показаны на рисунке 1. Коэффициенты поглощения соответствуют разным материалам: C_3H_6 (polypropylene) – синяя линия, Cu (меди) – зелёная линия, $C_5O_2H_8$ (plexiglass) – красная линия. С увеличением линейного коэффициента поглощения растёт контраст в изображении границ объектов (рисунок 3а). При повороте пластинки наблюдается спад интенсивности, что может характеризоваться некоторым размытием изображения на детекторе.

Результат разностной съёмки ΔI с пиками, определяющими границы объекта, показан на рисунке 3, где зелёная линия – медь, красная линия – плексиглас, синяя линия – полипропилен. Видно, что при повороте объекта результат разностной съёмки проявится на участках 150–300 мкм и 550–700 мкм, и зависимость яркости изображения будет иметь нелинейный характер. При увеличении линейного коэффициента поглощения увеличивается разностный контраст (рисунок 3б). Результат разностной съёмки содержит положительную и отрицательную часть графика. Положительная часть ΔI соответствует светлым элементам изображения, а отрицательная – темным элементам. Наличие темных и светлых элементов увеличивает контраст изображения и характеризует границы объекта.

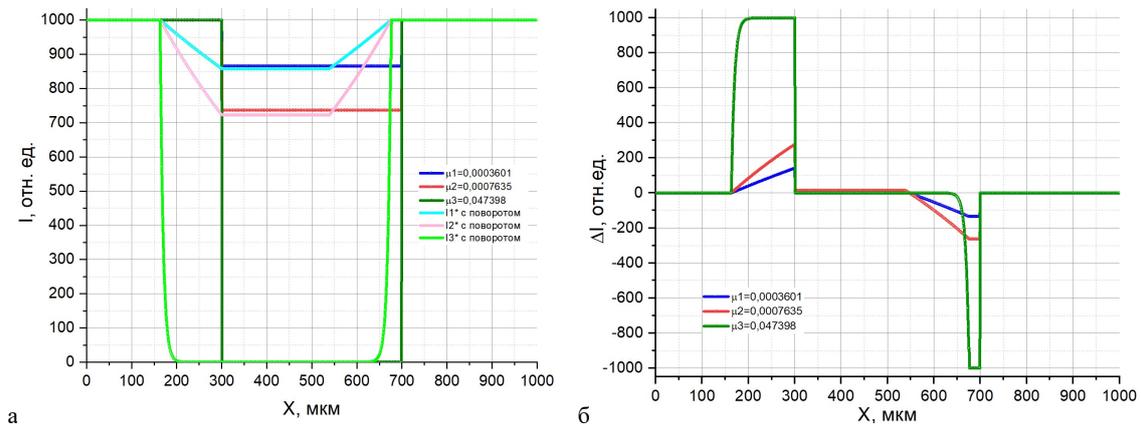


Рисунок 3 – Распределение интенсивности рентгеновского излучения на детекторе (а) и результат разностной съёмки (б)

Список литературы

1. Дудчик, Ю. И. Цифровая рентгенография слабопоглощающих рентгеновское излучение объектов / Ю. И. Дудчик, А. А. Субач // Приборостроение – 2022 : материалы 15-й междунар. науч.-техн. конф., Минск, 16–18 нояб. 2022 г. / редкол.: О. К. Гусев (пред.) [и др.]. – Минск : БНТУ, 2022. – С. 22–23.

Developed the program «X-ray Box», which calculates the intensity distribution of X-ray emission on the detector depending on the rotation angle of the object. Calculated the intensity distribution based on the rotation angle of the object and calculated new coordinates of the projective form of the object on the basis of the rotation operator. Performed numerical experiments for rectangular plates. The result of the difference survey contains positive and negative parts of the graph, which allows to determine the boundaries of the object.

Кольчевская Ирина Николаевна, магистрант 1 курса, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, iren.kolchevsky@gmail.com.

Научные руководители: Дудчик Юрий Иванович, кандидат физико-математических наук, Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, Dudchik@bsu.by.

Кольчевский Николай Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, kolchevsky@bsu.by.

УДК 535.37

Н. Н. КРАСНОПЕРОВ

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ АНАЛИЗА КИНЕТИКИ ЗАТУХАНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ДЛЯ ЛАЗЕРНОГО СПЕКТРОФЛУОРИМЕТРА

Представлен программный модуль «ФлуоТау» для анализа кривых затухания флуоресценции, который разрабатывается в рамках проекта по созданию лазерного спектрофлуориметра. Данный программный комплекс позволяет аппроксимировать кинетику затухания флуоресценции моделью до 5-ти экспонент с помощью нелинейного метода

наименьших квадратов, имеет большую гибкость в настройке начальных и граничных условий аппроксимации. В программном модуле «ФлуоТау» реализован также расширенный режим аппроксимации, в котором имеется возможность регулировать область поиска времени затухания флуоресценции для одного или нескольких флуоресцирующих центров. С использованием макета на базе спектрофлуориметра Fluorolog проведена апробация отдельных узлов лазерного спектрофлуориметра. Зарегистрированы кинетики затухания различных образцов с известными временами затухания флуоресценции (растворы красителей родамин 6Ж и НГТС в этаноле). В результате аппроксимации полученных кинетик с помощью стандартного режима программного модуля «ФлуоТау» получены времена затухания флуоресценции, которые в пределах погрешности совпадают со значениями в литературе.

Люминесцентный анализ один из наиболее информативных спектральных методов при исследовании объектов в различных областях науки. В последние два десятилетия с развитием аппаратуры для измерения временных характеристик свечения люминесценции его применение значительно расширилось. Эталонным методом для получения кинетики затухания сегодня стал метод время-коррелированного счета фотонов. Прежде всего, это обусловлено появлением мегагерцовых импульсных лазерных источников с субнано-секундной и пикосекундной длительностью, а также развитием микроэлектронной базы. В лаборатории спектроскопии НИИПФП им. А. Н. Севченко выполняется разработка лазерного спектрофлуориметра для спектрально-кинетического люминесцентного анализа в экспериментальной физике и биологии. Одной из задач данного этапа проекта является разработка программного модуля «ФлуоТау» для анализа кинетики затухания флуоресценции. На базе спектрофлуориметра Fluorolog (SPEX, США) создан макет для апробации отдельных узлов и тестирования ПО.

Известно, что для однокомпонентных систем характерным является одноэкспоненциальный закон затухания флуоресценции для молекулярной системы. В случае нескольких не взаимодействующих флуоресцирующих центров закон затухания будет представлен суммой экспонент:

$$I(t) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \cdot e^{-t/\tau_i}, \quad (1)$$

где N – число различных флуоресцирующих центров.

Поскольку длительности возбуждающего импульса и отклика регистрирующей фотосистемы нередко сопоставимы с временем затухания флуоресценции исследуемых объектов, то регистрируемый сигнал флуоресценции в момент времени t представляет собой свертку вида:

$$F(t) = \int_0^t G(t') I(t-t') dt', \quad (2)$$

где $G(t)$ – аппаратная функция, которая определяется как отклик системы регистрации на возбуждающий световой импульс.

Закон затухания флуоресценции исследуемых молекул можно установить путем решения задачи деконволюции, т. е. нахождения из интегрального уравнения (2), функцию $I(t)$. Для расчёта параметров α_i и τ_i на основании экспериментальных кривых предложено достаточно много различных методов [1; 2]. В этом отношении наиболее надёжно себя показал метод наименьших квадратов [3]. В его основе минимизация функционала χ^2 , который представляет собой взвешенное среднеквадратичное отклонение рассчитанного закона затухания флуоресценции $F_{расч}(t_i)$ от зарегистрированного $F_{эксн}(t_i)$:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n w_i [F_{эксн}(t_i) - F_{расч}(t_i)]^2, \quad (3)$$

где w_i весовые коэффициенты:

$$w_i = \frac{1/F_{эксн}(t_i)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1/F_{эксн}(t_i)}. \quad (4)$$

Данный подход используется в разработанном программном модуле «ФлуоТау». Поиск параметров экспонент функции $I(t)$ реализован в виде итерационного алгоритма. Принимая во внимания нелинейную зависимость функционала χ^2 от τ_i , для ускорения вычислений использован метод Левенберга – Марквардта для нелинейного метода наименьших квадратов. В качестве варьируемых параметров в модель оптимизации также включен временной сдвиг между аппаратной функцией и кинетикой затухания флуоресценции образца. Программный модуль выполнен в виде оконного приложения для системы Windows (рисунок 1). На главной

форме располагаются основные элементы управления (предварительный анализ кинетики, параметры модели аппроксимации, сглаживание) и отображения результата расчета включая статистические параметры для оценки качества аппроксимации.

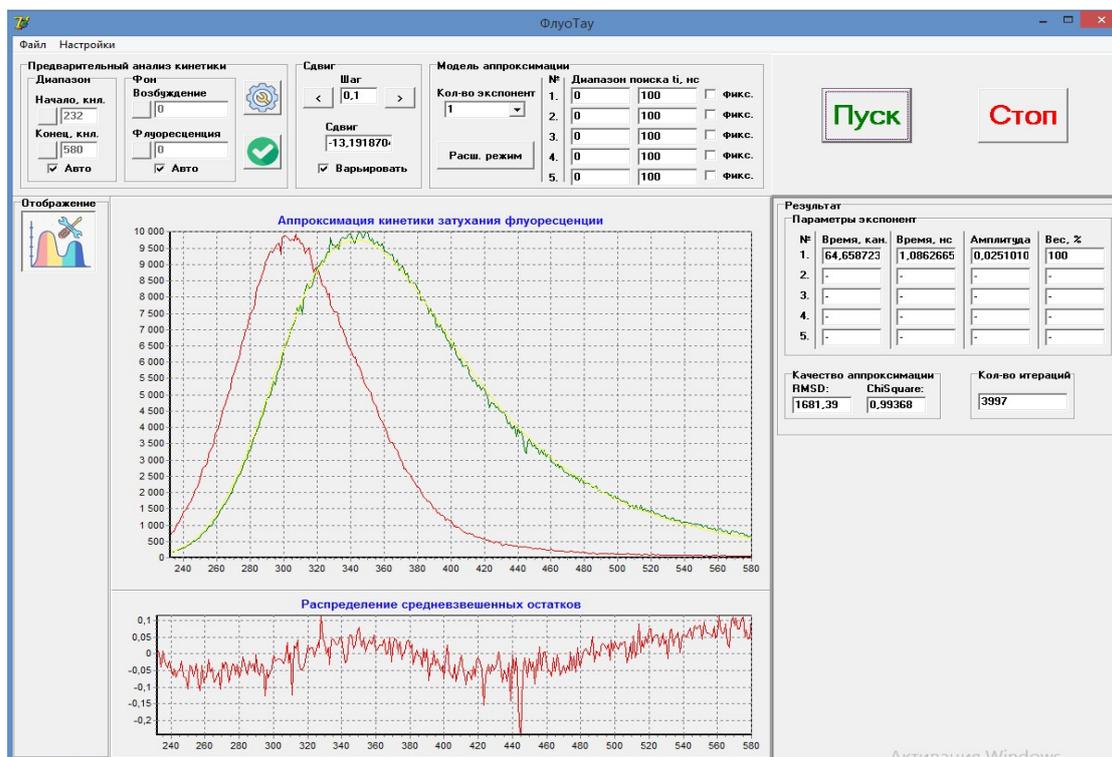


Рисунок 1 – Вид главного окна программного модуля «ФлуоТау»

Следует отметить, что в открытых источниках описывается только общий принцип алгоритма. Детали реализации алгоритма (например, выбор начальных и граничных условий, выделение области анализа, определение критерия останова циклов и т. д.) в литературе зачастую отображены недостаточно. При этом данный алгоритм обладает высокой чувствительностью от начальных параметров [4]. В результате программная реализация алгоритма стала отдельной исследовательской задачей.

В программном модуле «ФлуоТау» реализован также расширенный режим аппроксимации. В данном режиме имеется возможность регулировать область поиска времени затухания флуоресценции для одного или нескольких центров (в том числе его фиксации). С одной стороны, это позволяет учесть сигнал флуоресценции от примесей с известным временем затухания флуоресценции. С другой стороны, такой подход более гибкий при исследовании сложных многокомпонентных флуоресцирующих систем, в которых имеется некоторая исходная информация о фотофизических свойствах отдельных центров. Примером такой системы является комплексообразование флуоресцентных зондов с биомакромолекулами в биообъектах.

В процессе разработки программного модуля «ФлуоТау» корректность работы алгоритма расчета проверена на сгенерированных модельных данных в виде свертки известной аппаратной функции и теоретического закона затухания, представленного суммой нескольких экспонент с известными временами затухания и весами (амплитудами). В полученные кинетики дополнительно добавлялась шумовая компонента с разным уровнем шума. В результате анализа с помощью программного модуля «ФлуоТау» с использованием моделей аппроксимации от 1 до 5 экспонент наилучший результат аппроксимации достигался при совпадении количества экспонент в моделях генерации исходных данных и их аппроксимации. При этом расходимость времен затухания в моделях не превышала 3 %, что подтверждает корректность работы алгоритма.

С использованием макета на базе спектрофлуориметра Fluorolog проведена апробация отдельных узлов лазерного спектрофлуориметра. Зарегистрированы кинетики затухания различных образцов с известными временами затухания флуоресценции (растворы красителей родамин 6Ж и НТС в этаноле). В результате аппроксимации полученных кинетик с помощью стандартного режима программного модуля «ФлуоТау» получены времена затухания флуоресценции, которые в пределах погрешности совпадают со значениями в литературе: родамин 6Ж в этаноле – 4,0 нс [5], НТС в этаноле – 1,2 нс [6].

Таким образом, разработан программный модуль «ФлуоТау» для анализа кинетики затухания флуоресценции. Программный модуль «ФлуоТау» позволяет аппроксимировать кинетику затухания флуоресценции моделью до 5 экспонент, имеет большую гибкость в настройке начальных и граничных условий аппроксимации.

Список литературы

1. O'Connor, D. V. O. Deconvolution of fluorescence decay curves. A critical comparison of techniques / D. V. O. O'Connor, W. R. Ware, J. C. Andre // J. Phys. Chem. – 1979. – Vol. 83. – P. 1333.
2. Apanasovich, V. V. Methods of the decay curves analysis in fluorescent spectroscopy / V. V. Apanasovich, E. G. Novikov // J. Appl. Spectr. – 1992. – Vol. 56, № 4. – P. 538–549.
3. Grinvald, A. On analysis of fluorescence decay kinetics by the method of least-squares / A. Grinvald, I. Z. Steinberg // Anal. Biochem. – 1974. – Vol. 59. – P. 583.
4. Enderlein, J. Fast fitting of multi-exponential decay curves / J. Enderlein, R. Erdmann // Optics Communications. – 1997. – T. 134, № 1–6. – P. 371–378.
5. Berezin, M. Y. Fluorescence lifetime measurements and biological imaging / M. Y. Berezin, S. Achilefu // Chemical reviews. – 2010. – T. 110, № 5. – С. 2641–2684.
6. Концентрационное увеличение квантового выхода образования синглетного кислорода индотрикарбоданиновым красителем / М. П. Самцов [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. – 2014. – Т. 81, № 2. – С. 219–227.

The paper presents the «FluoTau» software module for the analysis of fluorescence decay curves, which is being developed as part of a project to create a laser spectrofluorimeter. This software package allows approximating the fluorescence decay kinetics with a model of up to 5 exponents using the non-linear method of least squares, that has great flexibility in setting the initial and boundary conditions of the approximation. The «FluoTau» software module also provides an extended approximation mode, in which it is possible to adjust the search area for the fluorescence decay time for one or more fluorescent centers. Using a layout based on the Fluorolog spectrofluorimeter, individual units of the laser spectrofluorimeter were tested. The decay kinetics of various samples with known fluorescence decay times were recorded (solutions of the dyes Rhodamine 6G and H1TC in ethanol). As a result of the approximation of the obtained kinetics using the standard mode of the FluoTau software module, the fluorescence decay times were determined, which, within the error, coincide with the values in the literature.

Красноперов Никита Николаевич, студент 4-го курса физического факультета, Белорусский государственный университет, Минск, Республика Беларусь, nikitakrasnoporov2710@gmail.com.

Научный руководитель – *Тарасов Дмитрий Сергеевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, лаборатория спектроскопии Института прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко Белорусского государственного университета, Минск, Республика Беларусь, dmitrij-tarasov@list.ru.

УДК 666

М. В. КУШИНА

СРАВНЕНИЕ ЭЛЕМЕНТАРНОГО СОСТАВА ФЕРМЕРСКОГО МОЛОКА И МОЛОКА ИЗ ТОРГОВОЙ СЕТИ «ЕВРООПТ»

Методом рентгено-флуоресцентной спектроскопии изучался элементарный состав молока, представленного в торговых сетях г. Гродно, и из фермерского хозяйства экологически чистой зоны. Проведено сравнение элементарного состава молока, представленного в торговой сети «Евроопт», и фермерского коровьего молока с экологически чистой зоны Национального парка «Беловежская пуща». По результатам исследования был проведён сравнительный анализ элементарного состава образцов. Молоко и получаемые из него продукты содержат большинство необходимых организму нутриентов.

В торговой сети «Евроопт» представлено молоко следующих производителей: «Молочный мир» г. Гродно («Молоко», «Твоя кружка»), «Брест-Литовск» г. Брест, «Бабушкина крынка» г. Могилёв.

Методом исследования является рентгено-флуоресцентная спектроскопия. Для исследования был использован спектрометр ElvaX компании «Элватех».

Устройство спектрометра схематично можно представить в следующем виде: источник возбуждения – образец – детектор излучения – амплитудный анализатор – обработка полученных результатов на ЭВМ.

Спектрометр состоит из следующих основных элементов: совместных рентгеновской трубки с блоком питания, кюветодержатель, детектор рентгеновского излучения, выполненный в полупроводниковом виде, а также устройство обработки спектральных сигналов.

Метод РФА заключается в измерении интенсивности спектральных линий, полученных при вторичной рентгеновской эмиссии от исследуемого образца. Другой вариант исследования – определение длин волн с измерением энергии в пределах этой волны (т. н. спектрометры с волновой дисперсией). Поток квантов короткой длины волны (большой энергии), полученных в рентгеновской трубке направляется на исследуемый образец и поглощается им. При этом элементы, составляющие основу данного образца, возбуждаются и