

УДК 542.07+543.422.3

ПРОГРАМНА МОДЕРНІЗАЦІЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРА ULAB-108UV

Л. Лозинська, І. Пацай

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: patsay@mail.ru*

Вивчено інтерфейс програмного керування спектрофотометром ULAB-108UV через порт USB. Доведено можливість перетворення приладу в сканувальний спектрофотометр. Розроблено комп'ютерну програму для автоматизованого вимірювання спектра.

Ключові слова: спектрофотометрія, спектр, модернізація, ULAB-108UV.

Сучасні спектрофотометри (СФ) здебільшого комплектують пристроями зв'язку з персональними комп'ютерами (ПК) через порт USB [1]. Приєднання приладу до обчислювальної машини дає змогу вирішити два важливі завдання – оперативно передавати в комп'ютер результати вимірювань для їхнього подальшого математичного опрацювання та можливість дистанційного програмного контролю над процесом вимірювання. Функціональні можливості СФ, які реалізують у “ручному” режимі через пульт керування та програмному через комп'ютер (рис. 1), здебільшого є однаковими. Однак існує низка завдань, які можна реалізувати лише з комп'ютерним керуванням. До таких завдань належить автоматичне сканування електронного спектра поглинання, тобто вимірювання серії значень оптичної густини в заданому діапазоні довжин хвиль електромагнітного випромінювання.



Рис. 1. Спектрофотометр ULAB-108UV

У СФ загального призначення, наприклад ULAB-108UV, нема функції автоматичного сканування спектра. У такий спосіб виробники обладнання “стимулюють” споживачів купувати значно дорожчі прилади – “сканувальні спектрофотометри” [2], у яких закладено можливість вимірювання спектра. У конструкціях цих двох типів спектрофотометрів немає суттєвої різниці, а “додаткова” функція сканування спектра реалізується програмно.

Наша мета – вивчити інтерфейс керування спектрофотометром ULAB-108UV через порт USB та розробити програмне забезпечення для автоматичного сканування електронного спектра поглинання.

Спектрофотометр ULAB-108UV комплектують програмним забезпеченням “M.WaveBasic” виробництва компанії “Mapada Instruments” [3]. Під час інсталювання цього програмного забезпечення на комп’ютер встановлюється також драйвер віртуального COM порту на основі конвертера PL-2303 [4]. Отже, програмний контроль спектрофотометром відбувається через послідовний інтерфейс згідно зі стандартом RS-232. Це значно спрощує завдання декодування та інтерпретації команд програмного керування спектрофотометром.

За допомогою програми “COM Port Toolkit 3.7” [5] визначено конфігурацію віртуального COM порту – “19200/n/8/1”, та декодовано більшість команд керування спектрофотометром (див. таблицю).

Команди керування спектрофотометром

Команда до СФ	Байти команди ¹	Відповідь СФ	Байти відповіді ¹	ІМОВІРНЕ ПОХОДЖЕННЯ та тлумачення команди
CO	43 4F 0D	Ідентифікатор приладу та поточні налаштування (понад 40 байт)		???, “стартова” команда, початок сесії "ПК-СФ"
SW XXX ³	53 57 20 YY ⁴ YY YY 0D	SW XXX.>	53 57 20 YY YY YY 0A 0D 3E	SELECT WAVE, задати певну довжину хвилі (нм)
RD	52 44 0D	RD..X1..X 2..X3..X4.. X5..X6..X 7..X8..>	52 44 0D 0A YY.. 0A 0D 3E	READ DARK, виміряти темновий сигнал з 8 каналів підсилення
SA X	53 41 20 YY 0D	SA X.>	53 41 20 YY 0D 0A	SELECT AMPLIFIER, вибір каналу підсилення (1–8)
GE n	47 45 20 YY 0D	GE X.X1. X2...Xn.>	47 45 20 YY 0A 0D 3E	???, виміряти n значень АЦП з вибраного каналу
WI	57 49 0D	WI.>	57 49 0A 0D 3E	WOLFRAM ON, увімкнути лампу видимого діапазону
WO	57 4F 0D	WO.>	57 4F 0A 0D 3E	WOLFRAM OFF, вимкнути лампу видимого діапазону
DI	64 49 0D	DI.>	64 49 0A 0D 3E	DEUTERIUM INPUT, увімкнути лампу УФ діапазону
DO	64 4F 0D	DO.>	64 4F 0A 0D 3E	DEUTERIUM OUTPUT, вимкнути лампу УФ діапазону
QU	51 55 0D	QU.>	51 55 0A 0D 3E	QUIT, “кінцева” команда, завершення сесії "ПК-СФ"

Примітки:

1 – у шістнадцятковому форматі; 2 – запис “???” означає, що походження команди не з’ясовано; 3 – запис “X” означає певну цифру в десятковому форматі (0–9); 4 – запис “YY” означає байт, що відповідає числу в десятковому форматі.

На підставі аналізу команд програми “M.WaveBasic” та відгуків спектрофотометра ми відтворили структурну схему приладу (рис. 2).

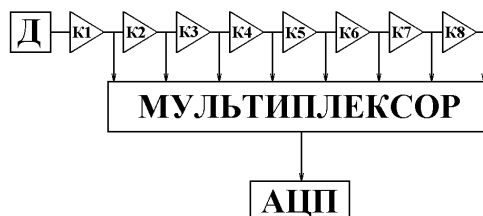


Рис. 2. Структурна схема спектрофотометра ULAB-108UV

Д – детектор (фотодіод); К1-К8 – канали підсилення сигналу; АЦП – 16-бітний аналогово-цифровий перетворювач

Оптична схема спектрофотометра ULAB-108UV є однопроменевою [1]. Визначення оптичної густини розчину реалізовано за таким алгоритмом:

- 1) вимірювання “темного” сигналу з усіх 8 каналів підсилення (детектор закритий шторкою і не зазнає опромінення);
- 2) вибір довжини хвилі випромінювання;
- 3) встановлення кювети з розчином порівняння;
- 4.1) вибір восьмого (найчутливішого) каналу підсилення та вимірювання значення сигналу з АЦП. Якщо сигнал не “зашкалює”, тобто потрапляє в робочий діапазон 16-розрядного АЦП (до $2^{16}-1$), то перехід до п. 5;
- 4.2) вибір сьомого каналу підсилення та вимірювання значення сигналу з АЦП. Якщо сигнал не “зашкалює”, то перехід до п. 5;
- 4.3–4.8) аналогічно до п. 4.2 з послідовним зменшенням каналу підсилення;
- 5) встановлення кювети з досліджуванним розчином;
- 6) вимірювання значення сигналу з АЦП;
- 7) розрахунок оптичної густини за формулою

$$A = \lg \frac{I_0 - I_d}{I - I_d}, \quad (1)$$

де I_0 – сигнал для розчину порівняння; I – сигнал для досліджуваного розчину; I_d – значення “темного” сигналу;

- 8) виведення розрахованого значення оптичної густини на екран приладу чи в ПК.

Пункти 3 і 5 виконують у “ручному” режимі – механічним зміщенням кюветотримача приладу. Отже, для автоматичного сканування спектра необхідно спершу виміряти масив значень I_0 , а потім – I для вибраного діапазону довжин хвиль випромінювання (λ). Оскільки чутливість детектора суттєво залежить від довжини хвилі, то на кожному етапі вимірювання I_0 необхідно вибирати оптимальний канал підсилення сигналу, на якому потім вимірюють значення I . З урахуванням цього розроблено алгоритм програмного керування спектрофотометром для автоматичного сканування спектра:

- 1) встановлення кювети з розчином порівняння;
 - 2) вимірювання “темнового” сигналу з усіх восьми каналів підсилення;
 - 3) вибір довжини хвилі випромінювання;
 - 4) вибір оптимального каналу підсилення та вимірювання значення сигналу з АЦП (I_0);
- пункти 3 і 4 виконують для всіх значень λ згідно з вибраним діапазоном та кроком сканування;
- 5) встановлення кювети з досліджуваним розчином;
 - 6) вибір довжини хвилі випромінювання;
 - 7) встановлення оптимального каналу підсилення, визначеного в п. 4, та вимірювання значення сигналу з АЦП (I);
- пункти 6 і 7 виконують для всіх значень λ згідно з вибраним діапазоном та кроком сканування;
- 8) розрахунок масиву значень оптичної густини за формулою (1);
 - 9) виведення спектра (графік залежності A від λ).

Алгоритм реалізовано в комп’ютерній програмі “ULAB-108UV Scan” мовою Visual Basic 5 (рис. 3).

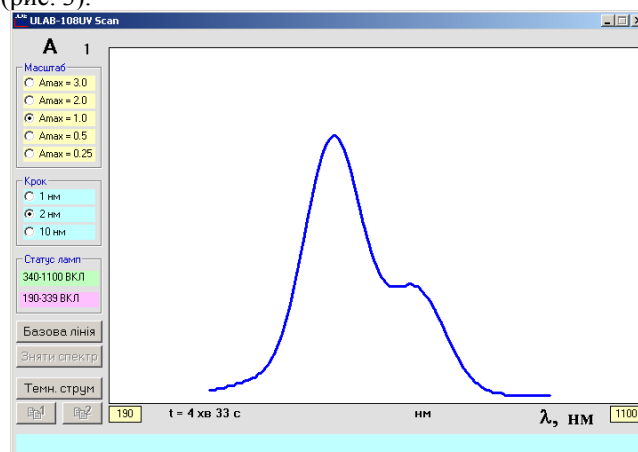


Рис. 3. Головне вікно програми “ULAB-108UV Scan”

У програмі закладено можливість сканування спектра з кроком за довжиною хвилі 1, 2 чи 10 нм. Робочий діапазон випромінювання (190–1100 нм) спектрофотометра ULAB-108UV охоплює ближню УФ, видиму та ІЧ ділянки. Вимірювання оптичної густини в діапазоні 190–339 нм реалізується у випромінюванні дейтерієвої УФ лампи, а в діапазоні 340–1100 нм – галогенової лампи. В програмі закладено можливість вмикання/вимикання цих ламп для економії їхнього ресурсу. Наприклад, якщо досліднику необхідно виміряти спектр у діапазоні довжин хвиль 500–800 нм, то доцільно вимкнути дейтерієву лампу, адже її випромінювання не буде задіяно в роботі приладу.

Залежно від вибраного діапазону довжин хвиль та кроку сканування програма “ULAB-108UV Scan” дає змогу виміряти спектр за 1–8 хв, що приблизно в 100 разів швидше порівняно з “ручним” вимірюванням за допомогою пульта керування чи штатного програмного забезпечення “M.WaveBasic”. Використання нашої

програми суттєво підвищує ефективність спектрофотометричних досліджень та зменшує час їхнього виконання. Є висока ймовірність, що розроблена нами програма "ULAB-108UV Scan" виявиться придатною не лише для приладів компанії ULAB, а й для низки спектрофотометрів інших виробників:

– SV1100, SV1200, SV1600, SV1800, SM1100, SM1200, SM1600, SM1800 виробництва AZZOTA Corporation [6];

– SPECTRO-V/UV-12, SPECTRO-UV11, SPECTRO-V11D, SPECTRO-UV3, SPECTRO-V/UV-16/18, SPECTRO-UV61/63 виробництва MRC company [7];

– UV-1100, V-1100, UV-1200, V-1200, UV-1600, V-1600, UV-1800, V-1800 виробництва Mapada Instruments [3].

Наше припущення ґрунтується на тому, що всі зазначені спектрофотометри мають подібну конструкцію, комплектовані однаковим програмним забезпеченням "M.WaveBasic" та, ймовірно, виготовлені на виробничих потужностях Mapada Instruments у Тайвані під різними торговими марками.

1. <http://www.ulab.com.ua/catalog/ibindex.php?ID=28>.
2. http://www.ulab.com.ua/catalog/list.php?SECTION_ID=16&IBLOCK_ID=28.
3. <http://www.mapada.com.cn/en/>.
4. <http://www.alldatasheet.com/datasheet-pdf/pdf/93058/ETC/PL-2303.html>
5. <http://www.compt.ru/>.
6. <http://www.azzota.com/>.
7. <http://www.mrclab.com/>.

SOFTWARE UPGRADE OF SPECTROPHOTOMETER ULAB-108UV

L. Lozynska, I. Patsay

*Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla & Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: patsay@mail.ru*

Interface of software control of spectrophotometer ULAB-108UV via USB port has been studied. Possibility of upgrade this device into scanning spectrophotometer was shown. Computer program for automatic measurement of spectrum was developed.

Key words: spectrophotometry, spectrum, upgrade, ULAB-108UV.

ПРОГРАММНАЯ МОДЕРНИЗАЦИЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРА ULAB-108UV**Л. Лозинская, И. Пацай**

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко,
ул. Кирилла и Мефодия, 6, 79005 Львов, Украина
e-mail: patsay@mail.ru*

Изучено интерфейс программного управления спектрофотометром ULAB-108UV через порт USB. Показано возможность преобразования прибора в сканирующий спектрофотометр. Разработано компьютерную программу для автоматизированного измерения спектра.

Ключевые слова: спектрофотометрия, спектр, модернизация, ULAB-108UV.

Стаття надійшла до редколегії 31.10.2012
Прийнята до друку 26.12.2012