

# Organinių molekulių Furjė transformacijos spektroskopijos spektrinių požymių nustatymo metodai

Ignas Dapšys, Mindaugas Karaliūnas

*Vilniaus Gedimino technikos universitetas*

Sauletekio al. 11, LT-10223, Vilnius, Lietuva

El-paštas: chemikasdapsys@gmail.com

Furjė transformacijos spektroskopija terahercų (THz) bangų ruože yra patikimas ir jautrus organinių molekulių aptikimo ir atpažinimo metodas [1]. Apšvietus bandinį THz spinduliuote, dalis spinduliuotės atsispindi nuo paviršiaus dėl laisvos erdvės ir bandinio lūžio rodiklių skirtumo, dalis praeina pro bandinį sąveikaudama su tiriamąja medžiaga. Praėjusi (pralaidumo konfigūracijoje) arba atsispindėjusi (atspindžio konfigūracijoje) THz spinduliuotė registruojama detektoriumi, kuris matuoja elektrinio lauko stiprį arba intensyvumą.

Atlikus išmatuotų impulsų Furjė transformaciją, rezultatai yra perkeliama iš laiko srities į dažnio sritį. Turint pralaidumo ir palyginamąjį spektrus, bei žinant bandinio storį, galima apskaičiuoti sugerties spektrą THz dažnių ruože.

Vis dėlto spektroskopijos taikymas yra ribotas grynomis cheminėms medžiagoms ir jų mišiniam. Organinių molekulių aptikimui natūraliose aplinkose, tokiose kaip augalų pluoštai arba ekstraktai, reikia atsižvelgti į spektrus iškraipiančius faktorius:

1. Natūraliose aplinkose esančių organinių molekulių sugerties linijos yra išplitusios ir persikloja su kitų aplinkos sudedamųjų dalių spektriniais požymiais [2, 3].
2. Dėl mišinio komponentų sąveikos atsiranda papildomi spektriniai požymiai, nebūdingi pavieniems komponentams. Be to, ieškomos medžiagos sugerties linijos gali išplisti arba pasislinkti dažnių skalėje.

Del šių priežasčių sunku vienareikšmiškai atpažinti ieškomų medžiagų spektrinius požymius.

Šiam tikslui pasiekti sukūrėme metodą, paremtą mažiausių kvadratų aproksimavimu. Jį išbandėme su sintetiniais ir realiais spektrais. Pastariesiems reikalingas filtravimas, nes juose yra ne vien grynos Gauso funkcijos – yra įvairių iškraipymų. Filtravimas vykdomas trimis žingsniais: (1) triukšmo šalinimas polinominės regresijos metodu; (2) diferencinio spektro gavimas atimant tendencijos liniją; (3) diferencinio spektro filtravimas pritaikius juostinį filtrą. Atlikus šiuos žingsnius, mūsų pasiūlytas metodas tampa tinkamas realiems spektrams.

Šiame pranešime detalčiau aptarsime siūlomą metodą ir bandymų su dirbtiniais ir realiais spektrais rezultatus.

## LITERATŪRA

- [1] Jepsen, P.U. and Cooke, D.G. and Koch, M. “Terahertz spectroscopy and imaging – Modern techniques and applications”. *Laser & Photonics Reviews*, **5** 1 (2011).
- [2] Karaliūnas, M., Venckevičius, R., Kašalynas, I., Puc, U., Abina, A., Jeglic, A., Zidanšek, A., and Valušis, G. “Investigation of pharmaceutical drugs and caffeine-containing foods using fourier and terahertz time-domain spectroscopy”. *Proc. SPIE*, **9585** 95850U (2015).
- [3] Karaliūnas, M., Jakštas, V., Nasser, K. E., Venckevičius, R., Urbanowicz, A., Kašalynas, I., and Valušis, G. “Application of terahertz spectroscopy for characterization of biologically active organic molecules in natural environment”. *Proc. SPIE*, **9934** 99340P (2016).