

საჯარო სამართლის იურიდიული პირი - ბათუმის შოთა რუსთაველის  
სახელმწიფო უნივერსიტეტი  
ფუსტ მეცნიერებათა და განათლების ფაკულტეტი

ფიზიკის დეპარტამენტი  
ჯაბა შაინიძე

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

ანოტაცია

წარდგენილია ფიზიკის დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად

სამეცნიერო ხელმძღვანელი: პროფესორი ნუგზარ ღომიძე

**თემის აქტუალობა.** ნივთიერებისა და გარემოს ანალიზური კონტროლის მაღალი დონე წარმოადგენს თანამედროვე ტექნოლოგიების წარმოებისა და განვითარების წარმატების საფუძველს. 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. ბოლოდროინდელი კვლევები ეძღვნება სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობის გაზრდასა და ამ გზით, CCD დეტექტორების ოპტიმიზაციას და მჭიდროდ უკავშირდება სადისერტაციო თემას.

**კვლევის მიზანი.** კვლევის მიზანია ფოტოელექტრული გარდამქმნელი სისტემების ეფექტურობის და გარემოს დიაგნოსტიკის პრობლემების 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 ნახავერგამიტარული დეტექტორების შექმნის საფუძველი.

**მეთოდოლოგია: კვლევის მეთოდოლოგია ეყრდნობა ორ მიდგომას: 1.** დაწყვილებული მუხტის მოწყობილობის (CCD) დეტექტორების გამოყენება მაღალი გარჩევადობის სპექტრული მონაცემების მისაღებად, განსაკუთრებით ულტრაიისფერი (UV) და ხილული სინათლის დიაპაზონში. CCD დეტექტორები გამოირჩევა მაღალი კვანტური ეფექტურობისა და სინათლის მიმართ მგრძობილობით, რაც საშუალებას იძლევა დეტალური შევისწავლოთ სპექტრული ხაზები და შევისწავლოთ მოლეკულური ვიბრაციული მდგომარეობა. მეთოდოლოგია მოიცავს ამ დეტექტორების დაკალიბრებას ოპტიკური სიმკვრივის ზუსტად გაზომვისა და სპექტრული მონაცემების მცირე ცვლილებების აღრიცხვის მიზნით.

2. ანალიზი ეფუძნება დაშვებას, რომ მოლეკულური სპექტრების ფორმირებისას ელექტრონული გადასვლები ხდება ისე სწრაფად, რომ ბირთვული პოზიციები არსებითად უცვლელია ამ პროცესის განმავლობაში. სპექტრული ხაზების ინტენსივობა კორელაციაშია საწყისი და საბოლოო მდგომარეობის ვიბრაციული ტალღური ფუნქციების გადაფარვასთან, თანახმად ფრანკ-კონდონის ფაქტორისა.

დისერტაციის ძირითადი დასკვნები შეიძლება ორ ნაწილად გავაერთიანოთ:

1. CCD დეტექტორებმა მოგვაწოდეს დეტალური სპექტრული გამოსახულებები, რომლებიც გამოავლინეს ელექტრონული გადასვლების მკაფიო ნიმუშები, რომლებიც შეესაბამება თეორიულ პროგნოზებს. ამან დაადასტურა CCD ტექნოლოგიის გამოყენება მოლეკულური სპექტროსკოპიის დახვეწილი ნიუანსების აღრიცხვაში, განსაკუთრებით UV და ხილულ სპექტრებში.

2. სპექტრულმა მონაცემებმა მხარი დაუჭირა ფრანკ-კონდონის პრინციპის თეორიულ ჩარჩოს, რაც აჩვენებს, რომ ყველაზე ინტენსიური სპექტრული ხაზები შეესაბამება ვიბრაციულ დონეებს შორის გადასვლას ტალღური ფუნქციების უდიდესი გადაფარვით.

**ნაშრომის პრაქტიკული მნიშვნელობა.** დისერტაციის კვლევის შედეგები მნიშვნელოვანი იქნება ისეთი კვლევების განვითარებისათვის, როგორცაა:

- **სტანდარტიზებული ტესტირების პროცედურები:** ამ პროცედურების გამოყენება სხვადასხვა ლაბორატორიებში და მკვლევარებში შეიძლება დაეხმაროს

ნივთიერების ოპტიკური თვისებების გაზომვის თანმიმდევრულობას, როგორცაა სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობა ან ფლუორესცენციის სპექტრები.

- **ბრმა ტესტირება:** შეიძლება გამოყენებულ იქნას ექსპერიმენტულ შედეგებზე მიკერძოების გავლენის შესამცირებლად.
- **კალიბრაციის სტანდარტები:** კალიბრაციის სტანდარტების გამოყენებამ შეიძლება უზრუნველყოს, რომ სხვადასხვა მკვლევარის და ლაბორატორიის მიერ ჩატარებული გაზომვები შედარებულია.
- **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.

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

### **სადოქტორო ნაშრომის შინაარსი**

**დისერტაციის შესავალში** წარმოდგენილია სპექტროსკოპული მეთოდების კლასიფიკაცია და განხილულია ფოტოდეტექტორის ძირითადი სქემები.

ხაზგასმულია, რომ დღეისათვის სპექტროსკოპული მეთოდების კლასიფიკაცია ხორციელდება: ელექტრომაგნიტური გამოსხივების მიხედვით; გამოსხივების ნივთიერებასთან ურთიერთქმედების მიხედვით: შთანთქმა (აბსორბციული სპექტროსკოპია), გამოსხივება (ემისიური სპექტროსკოპია), გაბნევა (რამანის სპექტროსკოპია) და არეკვლა (არეკვლის სპექტროსკოპია); შესასწავლი ობიექტების მიხედვით: ობიექტის ატომური და მოლეკულური სტრუქტურა; სპექტრის რეგისტრაციის მიხედვით: ვიზუალური, ფოტოგრაფიული და ფოტოელექტრული

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

- მოწყობილობა მუხტის ინექციით (CID Charge Injection Device )
- მუხტთან დაკავშირებული მოწყობილობა (CCD – Charge-Coupled Device)

ორივე დეტექტორს საფუძვლად სილიციუმი უდევს, რომელზედაც განთავსებულია ფოტომგრძნობიარე ელემენტები – “პიქსელები”.

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-ნახევარგამტარული სენსორები, რომელთა წარმოება ბიუჯეტურია. ასე, რომ CCD სენსორები კვლავაც რჩება პრიორიტეტულ სენსორებად მრავალ სამეცნიერო და სამრეწველო აპლიკაციებში.

**დისერტაციის შესავალ ნაწილში** მიმოხილულია ნაშრომთან დაკავშირებული ლიტერატურა. აღნიშნულია, რომ ბოლოდროინდელი ნაშრომების უმრავლესობა ეძღვნება CCD დეტექტორების ოპტიმიზაციას. გაანალიზებულია ის ლიტერატურული წყაროები, რომლებშიც აღწერილია StellarNet -ის სპექტრომეტრი, BlackComet დეტექტორი და Porta LIBS სისტემა, რომლებიც წარმოადგენდა სადისერტაციო ნაშრომის მატერიალურ-ტერნიკური ბაზის შემადგენელ ნაწილს. მიმოხილულია დისერტაციის ფარგლებში შესრულებული შრომების კავშირი დისერტაციის მიზნებთან და შედეგებთან.

**თავი I. ოპტიკურ-ელექტრული სისტემების საფუძვლები და გამოყენება.**

**მთავარი არგუმენტი:** ეს თავი აყალიბებს მოლეკულურ ორბიტალებში ელექტრონული გადასვლების ფიზიკურ საფუძვლებს, ხაზს უსვამს ენერჯის დონეების ცვლილებებს, რომლებსაც ელექტრონები განიცდიან. იგი ამტკიცებს, რომ მიუხედავად მოლეკულების სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების განსხვავებებისა, ასეთი გადასვლები მოიცავს ურთიერთგავლენას ელექტრონების სპინის კუთხურ იმპულსსა და მათ ორბიტალურ მოძრაობას შორის, რაც იწვევს ენერჯის დონის გაყოფას.

**საკვლევი საკითხი:** როგორ უწყობს ხელს მოლეკულური ელექტრონული გადასვლები ნივთიერებების ოპტიკური თვისებების გაგებას?

დისერტაციის პირველი თავი წარმოგიდგენს ნახევრგამტარული ტექნოლოგიის CCD ფოტოდეტექტორების გამოყენების კონცეფციას ოპტიკური სიგნალების დეტექტირებისა და ჩასაწერისას. მასში განხილულია სიგნალის/ხმაურის თანაფარდობის (SNR) შეფასების მნიშვნელობაზე ოპტიკური სიმკვრივის (OD) გარემოში.

**§1. წარმოდგენილია ოპტიკური სიმკვრივე და შთანთქმა.** ოპტიკურ სიმკვრივე (OD – Optical Density) არის ნივთიერების მიერ სინათლის შთანთქმის საზომი. მას ხშირად იყენებენ ხსნარში კონკრეტული ნივთიერების კონცენტრაციის რაოდენობრივად გასაზომად. ნაჩვენებია, შთანთქმის ერთეულებში გამოსახული (AU) OD იზრდება ნიმუშის მიერ სინათლის შთანთქმის ზრდის პროპორციულად. OD მნიშვნელოვანი ფიზიკური მახასიათებელია, რადგან მისი საშუალებით შესაძლებელია ნივთიერების კონცენტრაციის განსაზღვრა ხსნარში ან თხელფენოვანი ნივთიერების სისქის შეფასება. სწორედ ამიტომ, ხაზგაზმულია OD –ს შეფასების მნიშვნელობა სხვადასხვა სფეროში (ქიმია, ბიოლოგია, ფიზიკა და ინჟინერია).

OD-ს შეფასება საკვლევი ნიმუშის გავლით სინათლის ინტენსივობის ( $I$ ) გაზომვას უკავშირდება. თუ ცნობილია ეტალონურ ხსნარში გადაცემული სინათლის ინტენსივობა ( $I_0$ ), მაშინ  $L$  -ბილიკის სიგრძის მქონე კუვეტაში მოთავსებული  $\beta$  - მილევის კოეფიციენტის მქონე ხსნარში მისი გადაცემა ( $T$  – Transmission) განსაზღვრავს OD-ს:

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\beta L}$$

სინათლის გადაცემის მაჩვენებელი კუვეტის სიგრძის მიხედვით ექსპონენციალურად მცირდება:

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

სიგნალის მილევა განპირობებულია სიგნალის გაბნევით ( $\beta_s$ ) და შთანთქმით ( $\beta_a$ ):

$$\beta = \beta_s + \beta_a$$

თუ დეტექტორის ზომა ძალიან მცირეა სინათლის მიერ გავლილ მანძილთან (კუვეტას ბილისკის სიგრძესთან) შედარებით, მაშინ ყველა ფოტონი, რომელიც გაიბნევა ნივთიერების ნაწილაკებზე პირდაპირ თუ ირიბი მიმართულებით, ცხადია არ მოხვდება

დეტექტორს. ასეთ შემთხვევაში  $\ln T$  გვაძლევს შთანთქმისა და გაბნევის სუპერპოზიციის ეფექტს. რადგან შთანთქმული ნაწილი უფრო გამოკვეთილია ვიდრე გაბნეული, ამიტომ შთანთქმულ ნაწილს იყენებენ მშთანთქმელი ნაწილაკების რაოდენობრივი განსაზღვრისათვის.

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

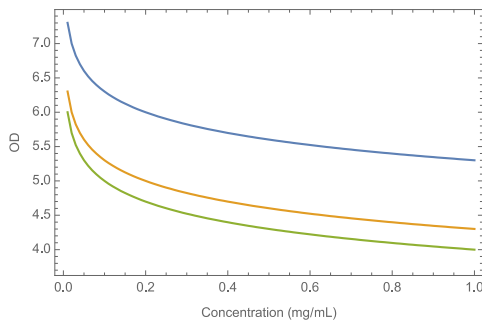
$$OD = A = -\log_{10} T.$$

მნიშვნელოვანია აღინიშნოს, რომ ეტალონური ნიმუშის არჩევამ შეიძლება გავლენა მოახდინოს გამოთვლილ OD მნიშვნელობაზე. ეტალონური ხსნარი უნდა იყოს გამხსნელი ან ბუფერი, რომელსაც აქვს იგივე ოპტიკური თვისებები, როგორც ნიმუშის ხსნარს.

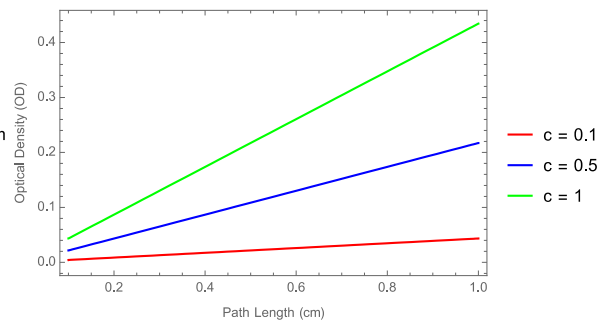
სადისერტაციო თემის ექსპერიმენტულ ნაწილში დაიგეგმა საკვლევი ნიმუშის ოპტიკური სიმკვრივის (OD) გაზომვა StellarNet-ის სპექტრომეტრის გამოყენებით, რომელიც იყენებს BlackComet (190-850 ნმ) დეტექტორს. შესრულდა შემდეგი სამუშაოები:

- **სპექტრომეტრის ინსტალაცია:** BlackComet დეტექტორი ოპტიკურ-ბოჭკოვანი სადენებით დაეუკავშირეთ 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.
- **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:** გამოვთვალეთ ნიმუშის OD.

ხსნარის კონცენტრაცია შეირჩა ისე, რომ შთანთქმა მოხვედრილიყო დეტექტორის ხაზოვან დიაპაზონში, როგორც წესი, 0.2-დან 1.0-მდე. კონცენტრაცია გავლენას ახდენს გაზომვის სიზუსტეზე, რადგან სინათლის შთანთქმაზე ზემოქმედებს ისეთი ფაქტორები, როგორცაა: გამხსნელის მოქმედება, ტემპერატურა და სხვა ნაერთების შემადგენლობა. BlackComet სპექტრომეტრებში ჩვეულებრივ 1 სმ ბილიკის სიგრძის კუვეტა გამოიყენება. თუმცა, დაბალი კონცენტრაციის ან მაღალი შთანთქმის მქონე ნიმუშებისთვის, უფრო მოკლე ბილიკის სიგრძის კუვეტა არის 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.



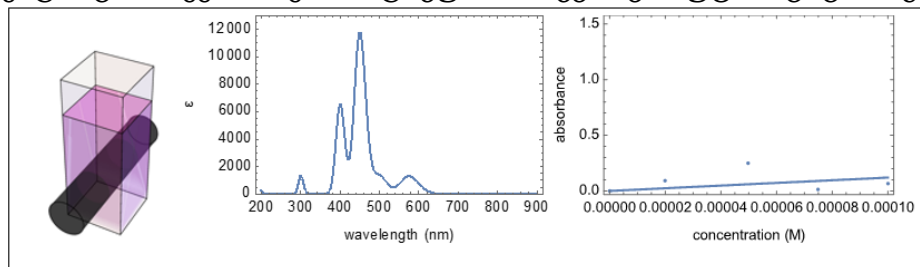
ა)



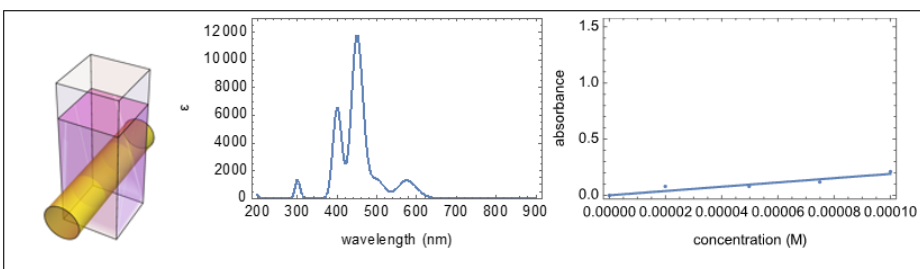
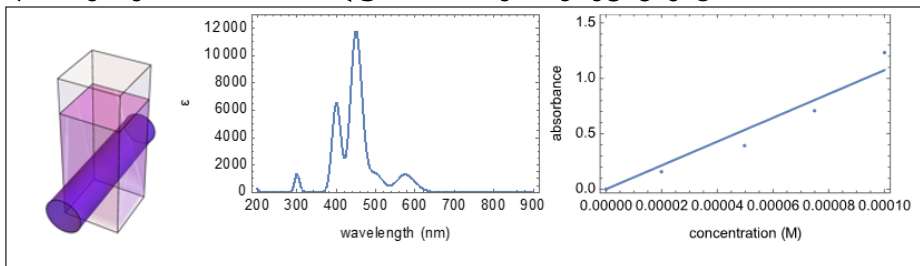
ბ)

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.1.1. 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.



ა) ტალღის სიგრძე:  $\lambda = 300$  ნმ, მოლური შთანთქმის კოეფიციენტი:  $\epsilon = 1242.5$  მოლი<sup>-1</sup>სმ<sup>-1</sup>



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

ნახ.1.2 ა)- ზე წარმოდგენილია სპექტრის ულტრაიისფერ დიაპაზონში (300 ნმ) შთანთქმის დამოკიდებულება კონცენტრაციაზე, ნახ.1.2 ბ) და გ)-ზე წარმოდგენილია შესაბამისი გრაფიკები ლურჯი (448 ნმ) და ყვითელი (574 ნმ) სინათლისათვის.

**§2. ულტრაიისფერი და ხილული სინათლის შთანქმის სპექტრები.** მოცემულ პარაგრაფში განხილულია ულტრაიისფერი და ხილული სინათლის შთანქმის სპექტრები, როცა 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.

სინათლის მშთანთქმელი მოლეკულური ჯგუფების - 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 (მაგალითად იზოპრენის შემთხვევაში).

**§3. შთანთქმის ინტენსივობა.** ნაჩვენებია, რომ მოლეკული შთანთქმა ( $\epsilon$ ) შეიძლება იყოს ძალიან დიდი ძლიერად მშთანთქმელი ქრომოფორებისთვის ( $>10000$ ) და ძალიან მცირე სუსტად მშთანთქმელი ქრომოფორებისათვის (10-დან 100-მდე).  $\epsilon$ -ის სიდიდე ასახავს როგორც ქრომოფორის ზომას, ასევე იმის ალბათობას, რომ მოცემული ტალღის სიგრძის სინათლე შთანთქმება ქრომოფორის მიერ სინათლის მასზე დაცემისას:

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

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

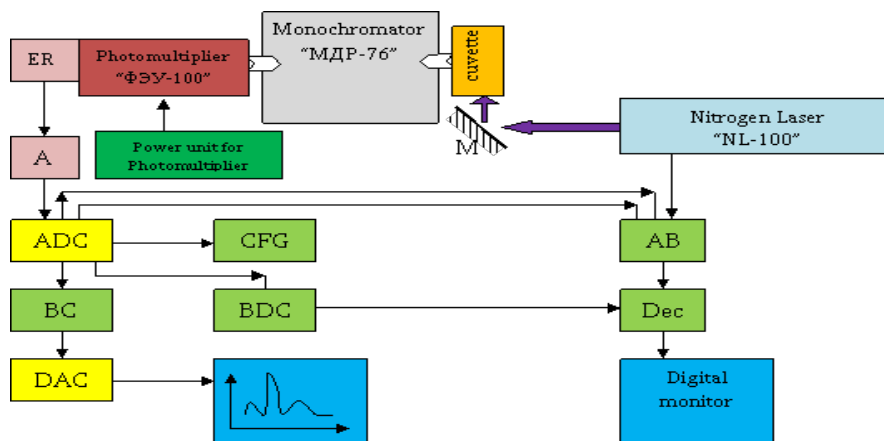
**§4. შეუღლება.** მოცემულ პარაგრაფში განხილულია სხვადასხვა ქრომოფორის სპექტრული მახასიათებლების ანალიზი. ქრომოფორები არის მოლეკულების ნაწილები, რომლებიც პასუხისმგებელნი არიან კონკრეტული ტალღის სიგრძის სინათლის შთანთქმის უნარზე, რაც იწვევს ფერად ნაერთებს. ნახსენებია ცნებები, როგორიცაა მაქსიმალური შთანთქმა ( $\lambda_{\max}$ ), მოლეკული ექსტიქცია ( $\epsilon$ ) და  $\pi \rightarrow \pi^*$  ელექტრონული გადასვლები ორბიტალებს შორის.

განხილულია პენტენის და იზოპრენის შთანთქმის სპექტრები, ბათოქრომული ძვრები (წანაცვლება გრძელ ტალღის სიგრძეზე), ჰიპერქრომული ცვლილებები (შთანთქმის ინტენსივობის გაზრდა) და მათი კავშირი ორმაგი ბმის კონიუგაციასთან. ეს მიუთითებს იმაზე, რომ კონიუგაციის ზრდასთან ერთად იზრდება შთანთქმის სინათლის ტალღის სიგრძე და შთანთქმის ინტენსივობა.

მოყვანილია ქრომოფორების სხვადასხვა ტიპების, როგორიცაა კეტონები, ალდეჰიდები და არომატული ნივთიერებების შთანთქმის სპექტრები ულტრაიისფერ და ხილულ დიაპაზონში. შესწავლილია თუ როგორ მოქმედებს ორბიტალებს შორის ურთიერთქმედება (HOMO - უმაღლესი ენერგეტიკული შემაკავშირებელი  $\pi$  - ორბიტალიდან და LUMO - უმცირეს ენერგიით შემაკავშირებელ  $\pi$  - ორბიტალამდე) შთანთქმის სპექტრებზე.

მთლიანობაში, მოცემული პარაგრაფი ასახავს მოლეკულებში ელექტრონული გადასვლების დეტალურ ანალიზს და მათ სპექტრულ მახასიათებლებს, რაც შეიძლება მნიშვნელოვანი იყოს ქრომოფორების მოლეკულური სტრუქტურისა და თვისებების გასაგებად.

**§5. სიგნალის მიღების სიჩქარის გაზომვის მეთოდები.** ეს პარაგრაფი აღწერს სხვადასხვა ტიპის სპექტრომეტრებში სიგნალის გადაცემის სიჩქარის გაზომვის მეთოდებს. განხილულია ფაზური და იმპულსური სპექტრომეტრების მუშაობის პრინციპები, აგრეთვე ფლუორესცენციისა და ფოსფორესცენციის სპექტრების ჩაწერის მეთოდები. სტრობოსკოპულ სპექტროფლუორიმეტრებში წყაროდან სხივი იყოფა ორ ნაწილად. ერთი გადის საკვლევ ნიმუშში, ხოლო მეორე ეტალონის გავლით, რომელიც შეიცავს მხოლოდ გამხსნელს. სხივების ინტენსივობა იზომება ელექტრონული დეტექტორებით და შემდეგ ხდება მათი შედარება იმის დასადგენად, თუ რამდენ შუქს შთანთქავს ნიმუში (ნახ.5.1).



ნახ.5.1. სტრობოსკოპული სპექტროფლუორიმეტრი მოდერნიზაციის შემდეგ

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

აღსანიშნავია, რომ იმპულსური სპექტრომეტრები - წარმოადგენს მარტივ ხელსაწყოებს მაგალითად ფლუორესცენციის სივრცის ხანგრძლივობის განსაზღვრისათვის. ნიმუში ნათდება იმპულსური სინათლის წყაროთი. იმპულსის ხანგრძლივობა მცირეა ფლუორესცენციის სივრცის ხანგრძლივობაზე. ფლუორესცენციის მიღება რეგისტრირდება ოსცილოგრაფზე ან ანალოგურ-ციფრული გარდამქმნელებისაგან შემდგარი ელექტრონიკის გავლით პერსონალურ კომპიუტერზე.

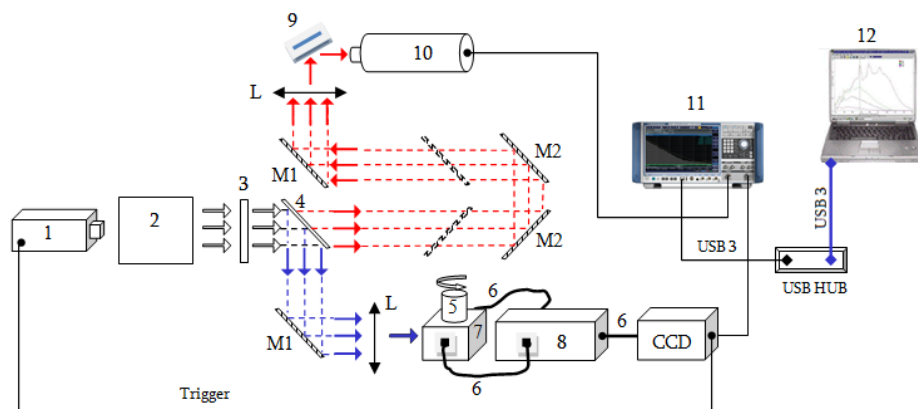
იმპულსური წყარო და ფოტომამრავლი ირთვება წამში რამდენიმე ათასი განმეორების სიხშირით, მაგრამ გარკვეული დაყოვნებით. ფლუორესცენციის მრუდების გადაღება ხორციელდება აგზნებასა და რეგისტრაციას შორის დაყოვნების დროის გაზომვით. ფოტომამრავლიდან მიიღება გამძლიერებული სიგნალი დეტექტორის გავლით ჩაიწერება როგორც დაყოვნების დროის ფუნქცია. ამ მეთოდის დროს გამოყენებულ სინათლის იმპულსურ წყაროს უნდა ჰქონოდა ფლუორესცენციის 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.

ფაზურ ფლუორიმეტრებში ფლუორესცენციის აგზნება ხდება სინათლის კონით, რომელიც მოდულირებულია მაღალი სიხშირით. ფლუორესცენციის ფაზა, ანუ მოდულაციის ხარისხი შედარდება ამგზნები სინათლის ფაზასთან. დროის მიხედვით ექსპონენციალურად მიღევადი ფლუორესცენციის შემთხვევაში, ფლუორესცენციულ გამოსხივებასა და ამგზნები სინათლის ფაზებს შორის ძვრა  $\psi$ , განისაზღვრება გამოსახულებით:  $\omega\tau = tg\psi$ , სადაც  $\tau$  - ფლუორესცენციის სიცოცხლის ხანგრძლივობაა. წყაროდან სიგნალი და ნიმუშზე აგზნებული ფლუორესცენციული სიგნალი ხვდება CCD-დეტექტორს, რომელიც არეგისტრირებს ამ სიგნალებს შორის ფაზათა ძვრას. ამგზნები სინათლის კონაში მოდულაციის ხარისხი ( $m_s$ ) და ფლუორესცენციული სიგნალის მოდულაციის ხარისხი ( $m_f$ ) დაკავშირებულია  $\psi$  ფაზათა ძვრასთან თანაფარდობით:  $\frac{m_f}{m_s} = \cos\psi$ .

პრინციპში ფაზური ფლუორიმეტრის ერთ-ერთი ძირითადი ნაკლი მდგომარეობს შედეგების ინტეგრაციის სირთულეში. რომელიც ფლუორესცენციის არაექსპონენციალური მიღევისას წარმოიქმნება, თუმცა ბირკსმა, დაისონმა და მანრომ გამოიყენეს ეს მეთოდი არაექსპონენციალურად მიღევადი 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.



ნახ. 5.2. ფაზური ფლუორიმეტრის პრინციპული სქემა. 1- სინათლის წყარო, 2 - ოპტიკური მოდულატორი; 3- ოპტიკური ფილტრი, 4- ნახევრად გამჭვირვალე ფირფიტა (შუქმყოფი); 5 - კიუვეტა 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

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 კანონზომიერებების (სიბლანტე, ტემპერატურა, სტრუქტურა) განსაზღვრის კუთხით.

ჩვენს მიერ შემოთავაზებული მეთოდით ფლუორესცენციის სივრცის ხანგრძლივობა შეიძლება განსაზღვრული იქნას ირიბად. პირველად ეს მეთოდიკა შემოთავაზებული იქნა **ეიზენტალის** მიერ, რომელმაც აღწერა ფლუორესცენციული გამოსხივების ( $10^{-11}$  წმ) გაზომვის ირიბი მეთოდიკა.

ხაზგასმულია, თუ როგორ მოქმედებს სხვადასხვა გამხსნელები (წყალი, ეთანოლი, ჰექსანი და ციკლოჰექსანი) გაზომვებზე. განმარტებულია, რომ გამხსნელები ორმაგი ან სამმაგი ბმებით ან მძიმე ატომებით (როგორცაა S, Br და I) არ გამოიყენება სინათლის მაღალი შთანთქმის გამო, რამაც შეიძლება დაამახინჯოს სპექტრული გამოსახულება.

**§6. BlackCommet დეტექტორის CCD სენსორის მახასიათებლები.** პარაგრაფი აღწერს CCD დეტექტორის სენსორის მახასიათებლებს, რომლებიც გამოიყენება BlackCommet Spectrometer-ში. CCD (დაწყვილებული მუხტის მოწყობილობა) შედგება სინათლისადმი მგრძობიარე პიქსელებისაგან, რომლებიც ფოტონებით დასხივებისას წარმოქმნიან ელექტრულ მუხტს, რომელიც ინახება ამ პიქსელებში და შემდეგ იკითხება და გარდაიქმნება ციფრულ სიგნალად. CCD დეტექტორები სინათლის მგრძობიარეა და შეუძლიათ მაღალი სიზუსტით გამოავლინონ სინათლის ინტენსივობის ძალიან დაბალი დონე და აქვთ ფართო დინამიური დიაპაზონი.

განხილულია CCD სენსორების შემდეგი ძირითადი მახასიათებლები:

- **კვანტური ეფექტურობა (QE):** ეს არის სენსორის 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 დენი 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.

განხილულია, თუ როგორ შეუძლია ამ პარამეტრებს გავლენა მოახდინოს CCD დეტექტორის მუშაობაზე სპექტრომეტრებში და როგორ შეიძლება გავლენა იქონიონ ნიმუშის ოპტიკურ სიმკვრივეზე (OD).

ფოტონების ის ფრაქცია, რომელიც ხვდება დეტექტორზე, რომელიც წარმოქმნის ელექტრონ-ხვრელის წყვილს. დროის ერთეულზე წარმოქმნილი ელექტრონების რაოდენობა შეფასებულია დეტექტორის მიერ წარმოებული დენის ძალით ( $I$ ), დეტექტორზე დაცემული სინათლის ოპტიკური სიმძლავრით ( $P$ ) და დეტექტორის აქტიური არის ფართობით ( $S$ ):

$$I = QE \cdot P \cdot S.$$

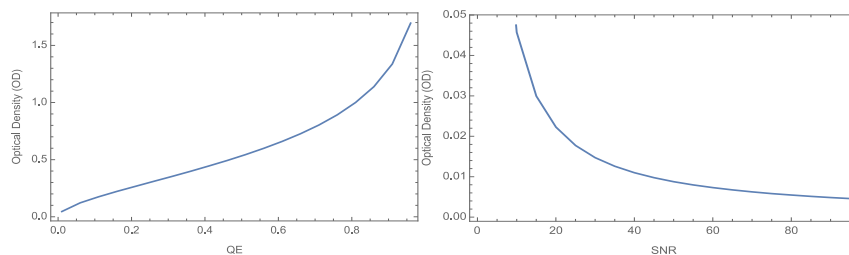
განხილულია გამომავალი სიგნალის გაძლიერების კოეფიციენტის შეფასების მეთოდი ( $G = \frac{N_e}{N_{ph}}$ ,  $N_e$  არის შეგროვებული ელექტრონების რაოდენობა და  $N_{ph}$  პიქსელებზე დაცემული (დაჯახებული) ფოტონების რაოდენობა) და მისი დამოკიდებულება სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობაზე (SNR).

$$SNR = \frac{N_e \cdot G}{\sqrt{ND + NR + NF + N_e \cdot G}}$$

სადაც:  $ND$  - სიბნელის ხმაურია,  $NR$  - წაკითხვის ხმაურია და  $NF$  - ფლუქტუაციური (სტატისტიკური) ხმაურია.

წარმოდგენილია SNR გამოთვლის ფორმულები და განხილულია ფაქტორები, რომლებსაც შეუძლიათ გავლენა მოახდინონ OD გაზომვების სიზუსტეზე (ნახ.6.1), მათ შორის ინტეგრაციის დრო და სინათლის წყაროს ინტენსივობა, რომელიც გამოიყენება ნიმუშის გასანათებლად:

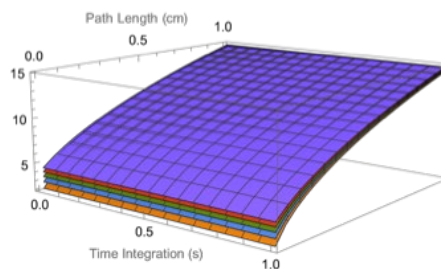
$$OD = -\log_{10} \left( \frac{\text{სიგნალი} + \text{ხმაური}}{QE \cdot \text{ინტენსივობა} \cdot \text{ბილიკის სიგრძე}} \right).$$



ა)

ბ)

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)

ჩვენი კვლევის ექსპერიმენტული ნაწილი შესრულდა StellarNet-ის დეტექტორზე BlackComet. BlackComet სპექტროეტრები აღჭურვილია მაღალი წარმადობის CCD სენსორებით, რომლებიც შესანიშნავი მგრძობელობით ხასიათდებიან, მათ აქვთ დაბალი ხმაურის დონე ტალღის სიგრძის ფართო დიაპაზონში (ნახ.6.2). ამ დეტექტორებს გააჩნია თერმოელექტრული გაგრილების სისტემა, რათა შეამცირონ ხმაურის დონე და გაზარდონ სტაბილურობა. სწორედ ამიტომ ამ დეტექტორებს აქვს იდეალური გამოყენება ისეთ აპლიკაციებში, როგორცაა შთანთქმის/გატარების სპექტროსკოპია, ფლოორესცენციული სპექტროსკოპია და რამანის სპექტროსკოპია.

**§7. CCD - სენსორის კვანტური ეფექტურობის (QE) გაუმჯობესების მეთოდები.** მოცემული პარაგრაფი აღწერს სხვადასხვა მეთოდებსა და სტრატეგიებს სპექტროსკოპიაში გამოყენებული CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის (QE) გასაუმჯობესებლად. განხილულია QE-ზე მოქმედი ფაქტორები, როგორცაა სენსორის მასალა, დიზაინი, შიგა შრეები, ზედაპირის რეკომბინაციის შემცირების შესაძლებლობა და ა.შ.

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 ავლნიშნოთ CCD სენსორების კვანტური ეფექტურობის (QE) გაუმჯობესებისათვის წარმოებული კვლევები. ეს გარემოება მოგვცემს უფრო მაღალ QE და შეიძლება გამოიწვიოს უკეთესი მგრძობელობა და სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობა.

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

- გამოსახულების დამუშავების ალგორითმები: გამოსახულების დამუშავების ეფექტური ალგორითმების დანერგვა შეიძლება დაგვეხმაროს ხმაურის შემცირებაში და გავაუმჯობესოთ დეტექტორის სიგნალი/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.

ასევე აღწერილია პრაქტიკული ნაბიჯები Mathematica პროგრამირების ენაზე წარმოდგენილია კოდი, რომელიც ასახავს CCD დეტექტორიდან გამოსახულების დამუშავების პროცესს. აღწერილია ისეთი საფეხურები, როგორცაა ფონის გამოკლება, ველის სიბრტყის კორექტირება და სხვა.

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

**ჰიპოთეზა:** ძირითადი ჰიპოთეზა, რომელსაც ვყვრდნობით არის ფრანკ-კონდონის პრინციპი, რომელიც იძლევა თეორიულ ჩარჩოს მოლეკულების შიგნით სხვადასხვა ვიბრაციულ დონეებს შორის ვერტიკალური ელექტრონული გადასვლების გასაგებად. ეს პრინციპი გადამწყვეტია სპექტრალური ხაზების ინტენსივობისა და პოზიციის გასაანალიზებლად, რითაც შესაძლებელია ელექტრონული გადასვლების ვიბრაციულ მდგომარეობების შეფასება.

**მეთოდოლოგია:** კვლევის მეთოდოლოგია ეყრდნობა CCD ტექნოლოგიას ამ გადასვლების ვიზუალიზაციისთვის სპექტრის ულტრაიისფერ და ხილულ რეგიონებში. ამ თავში განვითარებული დისკუსია მოიცავს CCD დეტექტორების კვანტურ ეფექტურობის შეფასებას და ოპტიკური სიმკვრივის მაღალი სიზუსტით გაზომვას.

**§ 2.1. CCD დეტექტორით ნივთიერების ოპტიკური თვისებების შესწავლა მოლეკულურ დონეზე. ფრანკ-კონდონის პრინციპი.** დისერტაციის მეორე თავის პირველი პარაგრაფი ეძღვნება ნივთიერებების ოპტიკური თვისებების შესწავლას მოლეკულურ დონეზე CCD დეტექტორების გამოყენებით. მასში განიხილილია ფრანკ-კონდონის პრინციპი და მის როლი სპექტრული ინფორმაციის ვიზუალიზაციაში. ეს პრინციპი დაკავშირებულია მოლეკულებში ელექტრონულ გადასვლებთან, განსაკუთრებით ულტრაიისფერ და ხილულ სპექტრულ რეგიონებში. აღნიშნულია, რომ მოლეკულებში ვიბრაციული ცვლილებები თან ახლავს ელექტრონულ გადასვლებს.

აღწერილია თუ როგორ გარდაქმნის CCD მოწყობილობები დაცემულ ფოტონებს ელექტრულ სიგნალად, რომელიც შეიძლება გამოყენებულ იქნას მოლეკულების ელექტრონული და ვიბრაციული მდგომარეობის დეტალების გასარკვევად.

სპექტრალური ხაზების ინტენსივობისა და პოზიციის ანალიზი გვაწვდის ინფორმაციას ვიბრაციული მდგომარეობის შესახებ და მათი შესაბამისობა ფრანკ-კონდონის პრინციპთან.

განხილილია დიპოლური გადასვლის მატრიცული ელემენტი:

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

რომელიც მიცავს ბირთვების რხევითი მოძრაობის აღმწერ ტალღურ ფუნქციებს:  $\Psi_{e\nu} = \psi_e(\vec{r}, R) \psi_\nu(\vec{R})$ , ელექტრონული მდგომარეობისა ( $e$ ) და - რხევითი მდგომარეობის ( $\nu$ ) კვანტურ რიცხვებს. ნაჩვენებია, რომ როცა  $\psi_\nu(\vec{R})$  სწრაფად ოსცილირებადი ფუნქციაა, ხოლო  $\psi_e$  ნელა იცვლება  $\psi_\nu(\vec{R})$ -თან შედარებით  $R$ -ის ცვლილებისას, როგორც კერძო შემთხვევა, შეიძლება მივიღოთ გამოსახულება დიპოლური გადასვლის მატრიცული ელემენტისათვის, რომელიც დაკავშირებული იქნება მოლეკულის მხოლოდ ელექტრონულ მდგომარეობასთან:

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

იმ შემთხვევებში, როდესაც ვიბრაციული კვანტური რიცხვები საკმარისად დიდია ( $\nu, \nu' \gg 1$ ), მოლეკულური ბირთვების მოძრაობა შეიძლება ჩაითვალოს ნახევრად კლასიკურად. ბირთვები უმეტესწილად დროს ატარებენ წონასწორობის წერტილის მახლობლად და აქვთ ნულოვანი იმპულსი.

ერთი სიტყვით, განხილულია, რომ როცა ფრანკ-კონდონის ფაქტორი დიდია შესაბამისად, მაღალია ელექტრონული გადასვლის ალბათობა ისეთი საწყისი და საბოლოო მდგომარეობებისთვის, რომელთა შორის გადასვლა შესაძლებელია ბირთვების კოორდინატებისა და იმპულსის მომენტების შეცვლის გარეშე.

**§ 2.2. n განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის გადაფარვის ინტეგრალის გამოთვლა.** აღნიშნულ პარაგრაფში წარმოდგენილია ფრანკ-კონდონის ეფექტის კვანტურ-მექანიკური საფუძვლები. განხილვას და მის გამოყენებას გადაფარვის ინტეგრალების გამოთვლაში, რომლებიც მთავარ როლს თამაშობენ მოლეკულურ სპექტროსკოპიაში და აღწერს ენერგეტიკული ზონების გადაფარვის ალბათობას.

ჯერ ახსნილია ფრანკ-კონდონის მნიშვნელობა ნივთიერებების ოპტიკური თვისებების შესასწავლად, შემდეგ ციტირებულია 2008 წლის კვლევა (J.L. Chang, 2008), რომელშიდაც შემოთავაზებულია მრავალგანზომილებიანი ფრანკ-კონდონის ინტეგრალების გამოთვლის გამარტივებული მეთოდი, რომელიც ეფუძნება ჰარმონიულ ოსცილატორის ტალღურ ფუნქციას და ითვალისწინებს დუშინსკის ეფექტს. შემდეგ გამოთვლილია n-განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის ინტეგრალი:

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

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

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

ნორმირების კოეფიციენტი. n განზომილებიანი ფრანკ-კონდონის გადაფარვის ინტეგრალი შემოწმდა  $SeO_2$ -ის რხევითი პიკების სპექტრის სიმულაციის საფუძველზე.

პოლიატომური მოლეკულის ვიბრაციული მდგომარეობების ტალღური ფუნქციებისთვის ჰარმონიულ მიახლოებაში, თითოეული ვიბრაციული მდგომარეობა წარმოდგენილია ნორმალიზების კოეფიციენტისა და ჰერმიციული პოლინომის ნამრავლით, გამრავლებული ექსპონენციალურ ფაქტორზე. იგი აღწერს მატრიცის ელემენტს ორ ვიბრაციულ მდგომარეობას შორის. ეს ელემენტი აკავშირებს მოლეკულის საწყის და საბოლოო ვიბრაციულ მდგომარეობას და გამოიყენება ამ მდგომარეობებს შორის გადასვლის ალბათობის გამოსათვლელად ემისიის და შთანთქმის პროცესებში.

**§ 2.3. დიატომურ მოლეკულაში ელექტრონული გადასვლების მოდელირება.** მეორე თავის მესამე პარაგრაფში განხილულია დიატომურ მოლეკულაში ელექტრონული გადასვლების მოდელირება, როცა ნაწილაკებს შორის ურთიერთქმედების აღწერა ხდება მორზეს პოტენციური ენერჯის ფუნქციით. მორზეს განტოლება გამოიყენება პოტენციური ენერჯის აღსაწერად მოლეკულაში ატომებს შორის მანძილის ფუნქციის სახით:

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

სადაც:  $\omega = \omega_0/\omega_1$  - აგზნებული და ძირითადი მდგომარეობების სიხშირეების შეფარდება,  $D = D_1/D_0$  - წარმოდგენს 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  $\rho$  - წარმოდგენს წონასწორული კავშირის სიგრძეს, ანუ ნაწილაკებს შორის მანძილს, როდესაც პოტენციური ენერგია მინიმუმია,  $r$  - ნაწილაკებს შორის რეალური მანძილია.

ფილიპ მ. მორზემ შემოგვთავაზა ეს პოტენციური ფუნქცია თავის 1929 წლის ნაშრომში, რათა აღეწერა დიატომის მოლეკულების პოტენციური ენერგია და ის ფართოდ გამოიყენება კვანტურ მექანიკასა და მოლეკულურ ფიზიკაში მოლეკულების ვიბრაციული სტრუქტურის მოდელირებისთვის.

გამოთვლილია ვიბრაციული ენერგიის ქვედა და ზედა ზღვარი, ე.წ. ატომთაშორის წონასწორული დისტანციები ძირითად და აღგზნებულ მდგომარეობებში:

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

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

აგრეთვე ვიბრაციული ენერგიის დონეები, როგორც ვიბრაციული კვანტური რიცხვის ( $v$ ) ფუნქცია:

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

და ტალღური ფუნქცია:

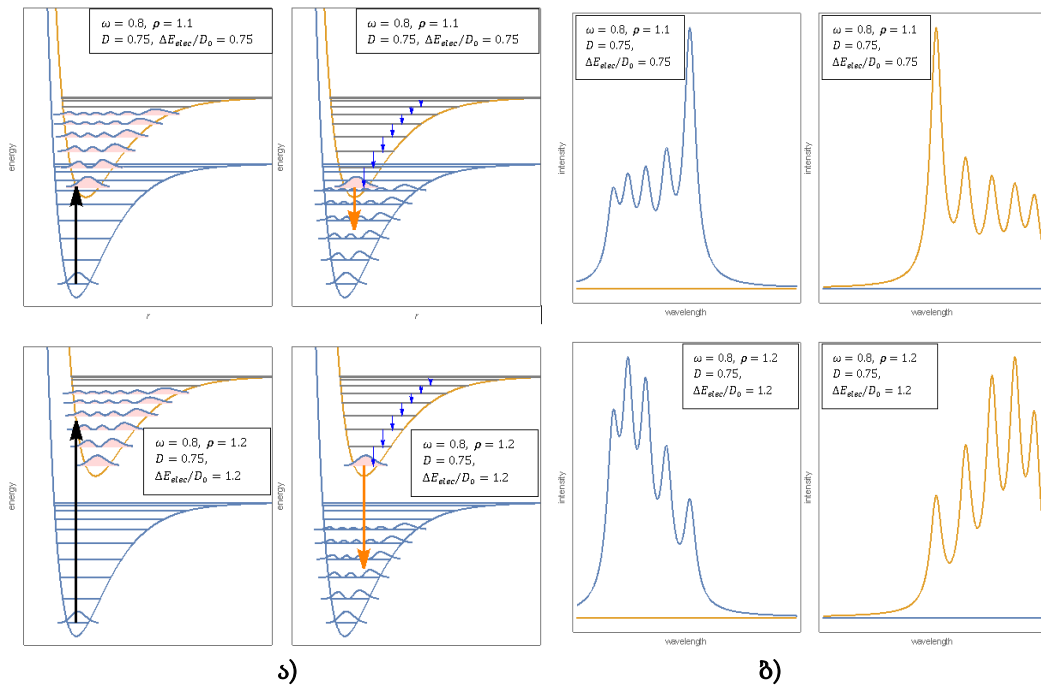
$$\Psi(\omega, D, \rho, v, r) = \left( \frac{v! \cdot 3\omega \left( \frac{20d}{\omega} - 2v - 1 \right)}{\sqrt{d} \cdot \Gamma \left( \frac{20d}{\omega} - v \right)} \right)^2 e^{-x/2} x^{10(d/\omega) - v - 1/2} L_v^n(x),$$

რომელიც გამოსახულია  $\Gamma \left( \frac{20d}{\omega} - v \right)$  - გამა ფუნქციისა და  $L_v^n(x)$  ლაგერის პოლინომის საშუალებით.  $x = \frac{20D}{\omega} e^{-\frac{3\omega}{\sqrt{D}}(r-\rho)}$ ,  $n = \frac{20D}{\omega} - 2v - 1$ .

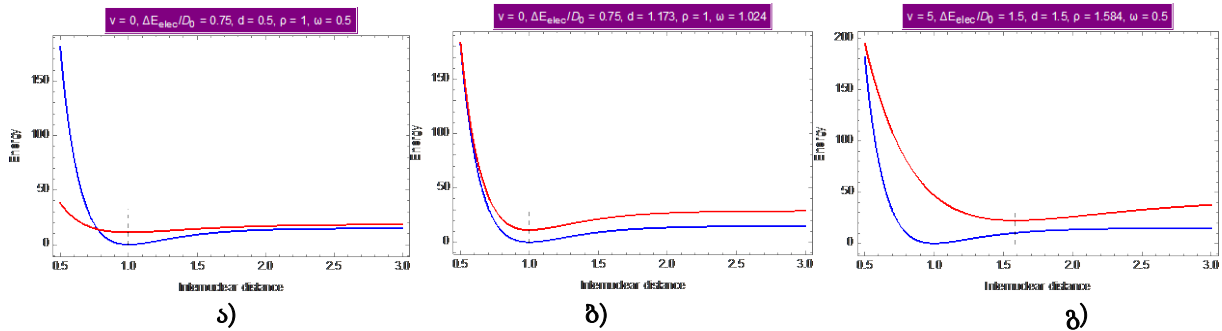
ელექტრონული გადასვლები აღწერილია ვიბრაციული პროცესებით, რაც გულისხმობს ერთდროულ ცვლილებებს როგორც ვიბრაციულ, ასევე ელექტრონულ კვანტურ რიცხვებში.

წარმოდგენილია აღგზნებული ელექტრონული მდგომარეობების პოტენციურ მრუდები, ვიბრაციული ენერგიის დონეების ვიზუალიზაციას და შთანთქმის და ფლორესცენციის სპექტრები, რომლებიც ასახავს ვიბრაციული გადასვლების ცალკეული კომპონენტების ინტენსივობას.

ნახ.2.3.1 ა)-ზე წარმოდგენილია ძირითადი და აღგზნებული ელექტრონული მდგომარეობები პოტენციური ენერგიის მრუდებით, ხოლო ნახ.2.3.1 ბ) -ზე კი წარმოდგენილია შესაბამისი გადასვლების შთანთქმისა და აგზნების სპექტრები. ეს მრუდები ასახავს, თუ როგორ იცვლება მოლეკულის პოტენციური ენერგია ატომთაშორისი მანძილის ფუნქციის მიხედვით. ძირითადი მდგომარეობის პოტენციური ენერგიის მრუდი, როგორც წესი, ნჩვენებია ლურჯი ფერის მრუდით, ხოლო აღგზნებული მდგომარეობის პოტენციური ენერგიის მრუდი გამოსახულია წითლად.



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



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

დასკვნის სახით, შეიძლება ავლნიშნოთ, რომ ფრანკ-კონდონის პრინციპის გამოყენებით, ახსნილია, რომ ყველაზე სავარაუდო ელექტრონული გადასვლები არის ვერტიკალური გადასვლები პოტენციურ ორმოებს შორის (ძირითადი მდგომარეობის მინიმალურიდან აგზნებული მდგომარეობის მინიმუმამდე), რაც დაკავშირებულია ვიბრაციის გადაფარვასთან. ეს იწვევს მოლეკულის ვიბრაციული ენერგიის დონის ცვლილებას და გავლენას ახდენს ვიბრაციული პიკების ინტენსივობაზე სპექტრში.



**§ 2.4. დეტექტირებული სიგნალის 3D ანალიზი.**

კვანტური ეფექტურობის ან მგრძობელობის 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 მქონე სინათლის წყაროსთან შედარებით. BlackComet სპექტრომეტრის CCD-ის კვანტური ეფექტურობის მრუდები დაახლოებით გაუსიანი ფორმისაა, პიკს აღწევს იქ, სადაც CCD ყველაზე მგრძობიარეა და იკლებს მისი დიაპაზონის კიდეებისკენ.

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

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

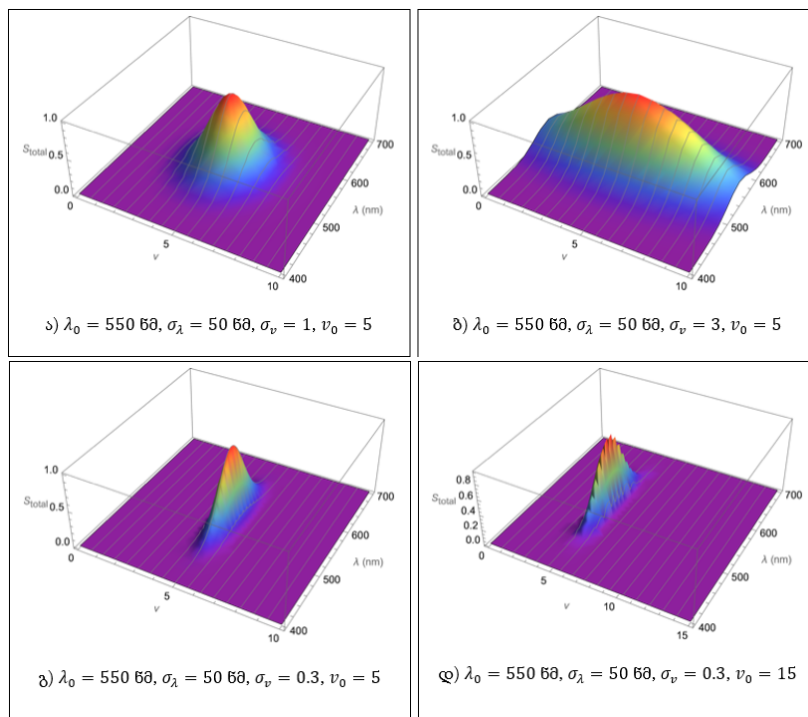
სადაც,  $\lambda_0$  - ტალღის სიგრძეა (ნმ-ში), სადაც CCD მგრძობელობა პიკს აღწევს,  $\lambda$  ტალღის სიგრძეა (ნმ),  $\sigma_\lambda$  - CCD მგრძობელობის მრუდის სტანდარტული გადახრა.

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 ვიბრაციის გავრცელების საწყის წერტილს, ის ფაქტიურად შეესაბამება სინათლის ფოტონის დაცემის წერტილს,  $\sigma_v$  - ასახავს ვიბრაციული ტალღის სიგანეს. CCD დეტექტორის სიგნალის დეტექტირების მგრძობელობა შეიძლება გამოვთვალოთ გამარტივებული ფორმულით:

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



**ნახ.2.4.1. CCD დეტექტორის მიერ დეტექტირებული სიგნალის 3D განაწილება ვიბრაციული ტალღური რიცხვის  $v = 1 \dots 15$  და ტალღის სიგრძის  $\lambda = 400 - 700$  ნმ მიხედვით**

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.

### თავი III. CCD მახასიათებლების მოდელირება ზოგიერთ პრაქტიკულ აპლიკაციაში

**ძირითადი მიგნებები:** დიატომურ მოლეკულებზე ფოკუსირებით, ეს განყოფილება გთავაზობთ ელექტრონული გადასვლების მოდელს, რომელიც მოიცავს აღზნებულ ელექტრონულ მდგომარეობას უფრო მაღალი ენერგიით ( $\Delta E_{elec}$ ). ამ თავში განხილულია, თუ როგორ არის დასაშვები ასეთი გადასვლები მხოლოდ გარკვეულ ვიბრაციულ დონეებს შორის. დეტალურადა განხილული ელექტრონული გადასვლების სპეციფიკა და ვიბრაციული ცვლილებები ამ გადასვლების დროს.

**შედეგები:** დისერტაციის მესამე თავი გვთავაზობს მოლეკულური სპექტროსკოპიის ნიუანსურ გაგებას, რომელიც სასიცოცხლოდ მნიშვნელოვანია ქიმიური, ფიზიკური და მატერიალური მეცნიერებისთვის, განსაკუთრებით იმ კონტექსტებში, სადაც მასალების ოპტიკური თვისებები გადამწყვეტია.

**§3.1. კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორის მოდელი სტიმულირებული და სპონტანური გამოსხივების შეფასებისას.** დისერტაციის მესამე თავის პირველი პარაგრაფი მოიცავს ბიბლიოგრაფიულ მიმოხილვას ფლორესცენციულ სპექტროსკოპიაში უახლესი მიღწევების შესახებ. ლიტერატურული მიმოხილვა ეძღვნება სტატიებს, რომლებიც აღწერენ ფლორესცენციული სპექტროსკოპიის პრაქტიკულ ღირებულებას გარემოს ეკოლოგიური მდგომარეობის ხარისხის შეფასებისას, აგრეთვე ლაზერით ინდუცირებული პლაზმის ფლორესცენციულ სპექტროსკოპიას, და სპექტრალური ხაზების პროგნოზირების შესაძლებლობას ფრანკ-კონდონის პრინციპის საფუძველზე.

განხილულია კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორის მოდელი სტიმულირებული და სპონტანური გამოსხივების შეფასებისას.

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:  $\hbar\omega = E_1 - E_0$

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.

კვანტური ჰარმონიული ოსცილატორის მოდელი კარგად აღწერს ველში ფოტონების ქცევას. ფოტონის ანჰილაციის (ფოტონის რიცხვის ერთით შემცირება) ალბათობა:  $|(n_\omega - 1|a_\omega|n_\omega)|^2 = n_\omega$ , ან ფოტონის წარმოქმნის (გენერაციის) ალბათობა (ფოტონის რიცხვის ერთით გაზრდა):  $|(n_\omega + 1|a_\omega^+|n_\omega)|^2 = n_\omega + 1$  განსაზღვრავს ფოტონის კვანტურ-მექანიკურ საფუძველს.  $a_\omega$  და  $a_\omega^+$  - არის ფოტონის ანჰილაციისა და წარმოქმნის ოპერატორები, ხოლო  $n_\omega$  - ფოტონების რიცხვია.

**§3.2. ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის სიმძლავრის გადაცემის კოეფიციენტის შეფასება.** მოცემული პარაგრაფი ეძღვნება ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის გაბნევის თეორიული ანალიზს. იგი კონკრეტულად ეხება სინათლის სიმძლავრის გადაცემის კოეფიციენტის შეფასებას ბიოლოგიურ ქსოვილებში, როგორცაა ერთროციტები სისხლში ან კანის მემბრანის პოლარიზებული მოლეკულები.

განხილულია შემთხვევა, როცა სინათლე ზემოქმედებს ბიოლოგიურ სტრუქტურაზე, მაგალითად სისხლის ერთროციტების ან სხეულის კანის მემბრანის პოლარიზებული მოლეკულებზე. აღნიშნულია, რომ ამ შემთხვევაში დომინანტური ეფექტი აქვს სინათლის გაბნევას და შთანთქმას. გაბნეული გამოსხივების გავრცელება აღიწერება ფოტონების გადატანის განტოლებით:

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

$P$  (ვტ)- დაცემული სხივის სიმძლავრეა,  $R$  (მმ) – სხივის დაცემის წერტილში, სხივის მიერ წარმოქმნილი ლაქის რადიუსია,  $\vec{L}(r, \vec{S})$  (მგტ/მმ<sup>2</sup> სტრად) - სიკაშკაშის ცვლილების სიჩქარეა  $r(x, y, z)$  - წერტილში, რომელიც  $\vec{S}$  მიმართულებაზე მდებარეობს. სინათლის დაცემის მიმართულებაა  $\vec{S}'$ .

შეგვიძლია გავშალოთ ბრტყელი ტალღები ლეჟანდრეს პოლინომის მიხედვით და ვიპოვოთ გაბნევის ამპლიტუდისა და დიფერენციალური გაბნევის განიკვეთის გამოსახულება:

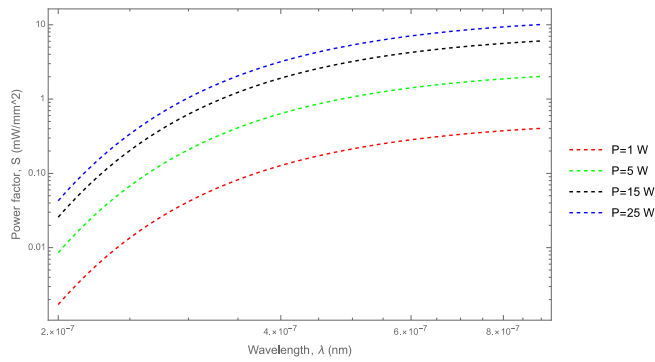
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)e^{i\delta} \cdot \sin(\delta) \cdot L_l(\cos(\theta)) \right|^2$$

ეს განტოლებები საჭიროა ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის შეღწევის სიღრმის გამოსათვლელად:

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

სადაც,  $P$  - სინათლის წყაროს გამოსხივების სიმძლავრეა  $\lambda$  - ტალღის სიგრძეზე,  $\delta$  - არის ბიოლოგიური ქსოვილის ოპტიკური სისქეა,  $d$  - 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 გრძელ ტალღის სიგრძისაკენ.

გამოთვლების გამარტივების მიზნით გაკეთებულია რამდენიმე დაშვება: გათვალისწინებულია, რომ გაბნევა არის დრეკადი, უგულებელყოფილია მრავალჯერადი გაბნევის ეფექტი და სინათლის ნაკადის სისქე ისეთია, რომ ბიონაწილაკებს აქვთ განსაზღვრული იმპულსი.



**ნახ.3.2.1. ბიოლოგიურ სტრუქტურებში შედგენილი სინათლის სიმძლავრის კოეფიციენტი და მოკიდებული ტალღის სიგრძეზე log-log მასშტაბში, სხვადასხვა სიმძლავრის წყაროსათვის**

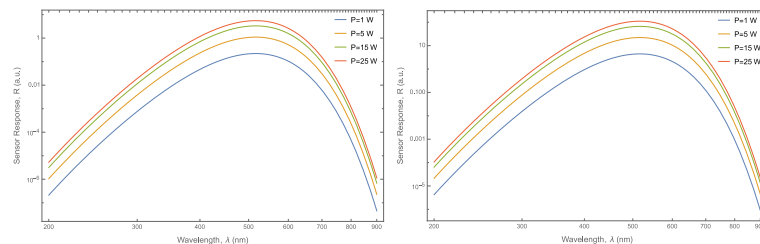
მრუდები ზოგადად აჩვენებს, რომ ტალღის სიგრძის ზრდასთან ერთად, სიმძლავრის კოეფიციენტი მცირდება. ბიოლოგიურ სტრუქტურას ნაკლები ენერგია მიეწოდება უფრო მაღალ ტალღის სიგრძეზე გაბნევის ზრდის გამო, ან შესაძლოა წყაროს მახასიათებლების გამო. ასევე შესაძლებელია, რომ სიმძლავრის კოეფიციენტი იზრდება წყაროს სიმძლავრის პარამეტრებთან ერთად. ეს ნიშნავს, რომ მეტი ენერგია მიეწოდება უფრო მაღალი სიმძლავრისას, რაც მოსალოდნელია.

ორატომიანი მოლეკულებისათვის ელექტრონული გადასვლები ხშირად ხდება ვიბრაციული, ხოლო იშვიათად ბრუნვითი ენერგიებით. ამიტომ ამ გადასვლებს აქვს შერჩევითი ხასიითი. 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 დაგავშირებული ვიბრაციული ტალღური ფუნქციები გვამღევს მახასიათებელ ვიბრაციულ სპექტრებს.

**§3.3. CCD სენსორის მგრძობელობის შეფასება ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას.** დისერტაციის მესამე თავის მესამე პარაგრაფი ეძღვნება CCD სენსორის მგრძობელობის შეფასებას ბიოლოგიურ აპლიკაციებისთვის. იგი ხაზს უსვამს ტექნიკურ დეტალებს იმის შესახებ, თუ როგორ ამოიცნობს CCD სენსორი სინათლეს და გარდაქმნის მას ელექტრულ სიგნალად. ის ეხება სინათლის ურთიერთქმედებას ბიოლოგიურ ქსოვილებთან, მათ შორის, თუ როგორ მოქმედებს სხვადასხვა ფაქტორები, როგორცაა სინათლის წყაროს სიმძლავრე, ტალღის სიგრძე და ქსოვილის ოპტიკური სიღრმე სენსორის რეაქციაზე. CCD სენსორების სპექტრული გამოძახილი არის მისი მგრძობელობა, როგორც ტალღის სიგრძის ფუნქცია:

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

შეფასებულია CCD სენსორის მგრძობელობა ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას.



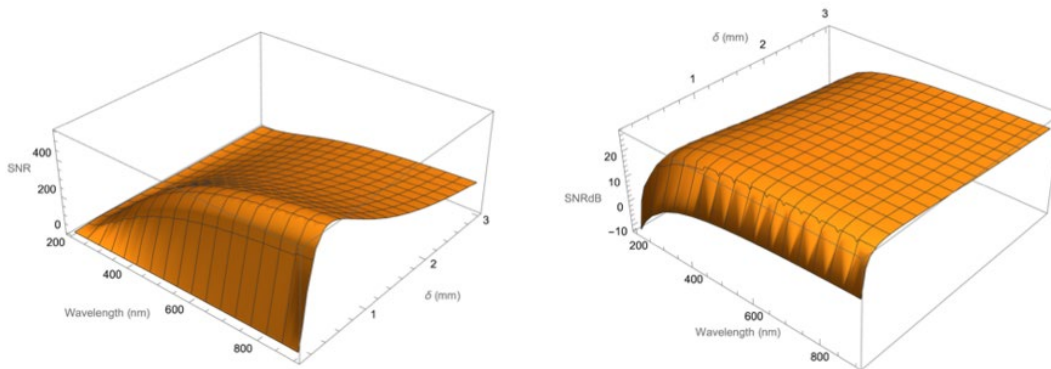
**ნახ.3.2.2. CCD-სენსორის მგრძობელობის  $R(\lambda)$  დამოკიდებულება ტალღის სიგრძეზე სინათლის ბიოლოგიურ სტრუქტურაში გავლის შემდეგ, როცა  $\delta = 1$  მმ, ა)  $d = 1$  მმ, ბ)  $d = 2$  მმ, სინათლის წყაროს სხვადასხვა  $P$  სიმძლავრის შემთხვევაში,  $\lambda_0 = 500$  ნმ**

ნახ.3.2.2-ზე წარმოდგენილია CCD სენსორის მგრძობელობის  $R(\lambda)$  (იგივე გამოძახილის) ტალღის სიგრძეზე დამოკიდებულება სინათლის ბიოლოგიურ სტრუქტურაში გავლის შემდეგ, როცა როცა ბიოლოგიური ქსოვილის ოპტიკური სისქე  $\delta = 1$  მმ, ბიოლოგიურ ქსოვილში სინათლის შეღწევის სიღრმე კი იცვლება  $d = 1$  მმ (ნახ.3.2.2 ა),  $d = 2$  მმ (ნახ.3.2.2 ბ), სინათლის წყაროს სხვადასხვა  $P$  სიმძლავრის შემთხვევაში. მოდელირება შესრულებულია CCD-სენსორის კვანტური ეფექტურობის QE ტალღის სიგრძეზე გაუსური დამოკიდებულების შემთხვევაში, როცა სინათლის წყარო ცენტრირებულია  $\lambda_0 = 500$  ნმ ტალღის სიგრძეზე, ხოლო ნახ.3.2.3 ა) და ბ)-ზე კი წარმოდგენილია ანალოგიური გრაფიკები კვანტური ეფექტურობის QE ტალღის სიგრძის მიხედვით გაუსური განაწილებისას, როცა სინათლის წყარო ცენტრირებულია  $\lambda_0 = 500$  ნმ ტალღის სიგრძეზე.

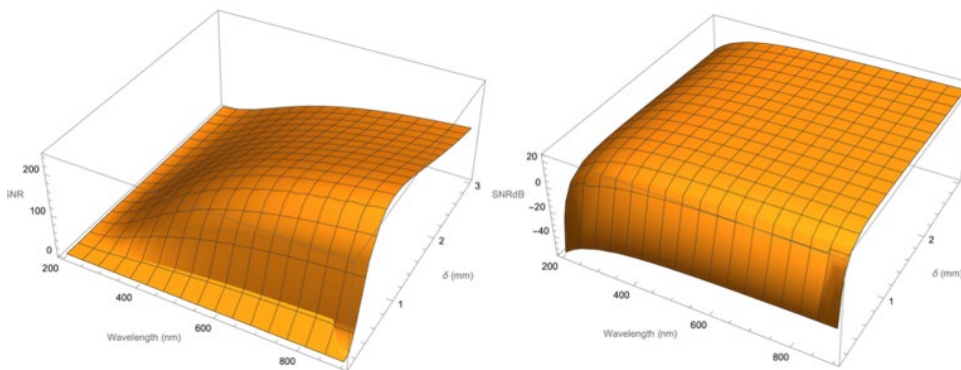
დისკუსია ვარაუდობს, რომ CCD სენსორის ეფექტურობის ოპტიმიზაცია შესაძლებელია კონკრეტული აპლიკაციებისთვის სენსორის QE პიკის არჩევით, რომელიც ემთხვევა კვლევისთვის საინტერესო ტალღის სიგრძეს. ეს საშუალებას მოგვცემს მივიღოთ შესაძლო საუკეთესო სიგნალ- ხმაურის თანაფარდობა და ამ გზით გავზარდოთ სენსორის ეფექტურობა კონკრეტული ბიოლოგიური გამოსახულების ან ანალიტიკური მიზნებიდან გამომდინარე.

**§3.4. CCD სენსორის სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის შეფასება ბიოლოგიურ აპლიკაციებში მისი გამოყენებისას.** ამ პარაგრაფში გამოკვლეულია CCD სენსორების სიგნალი/ხმაურის თანაფარდობ (SNR) ბიოლოგიურ აპლიკაციებისათვის. იგი განიხილავს CCD სენსორების დინამიურ დიაპაზონს, რომელიც განისაზღვრება მაქსიმალური სიგნალით, რომელიც შეიძლება ჩაიწეროს (სრული ტევადობა) მინიმალურ შესამჩნევ სიგნალამდე (ჩვეულებრივ, წაკითხვის ხმაური).

სიმულაციური ანალიზით გამოკვლეულია სენსორის მოქმედება. SNR, მნიშვნელოვნად არის დამოკიდებული სისტემის პარამეტრებს შორის ურთიერთკავშირზე: სენსორის პიკური მგრძობელობის ტალღის სიგრძეზე, ინტეგრაციის დროზე, სინათლის შეღწევის სიღრმეზე და ოპტიკური სიღრმეზე ბიოლოგიურ ქსოვილში. ეს შედეგები ხაზს უსვამს სენსორის QE პიკის განსაზღვრისა და გათვალისწინების მნიშვნელობას. სენსორის სიგნალ-ხმაურის დონის ზრდას შეიძლება დასჭირდეს ინტეგრაციის უფრო ხანგრძლივი დრო ან უფრო მგრძობიარე აღჭურვილობა (სპეციფიკური დიზაინის და კონსტრუქციული შემადგენლობის გათვალისწინებით).



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

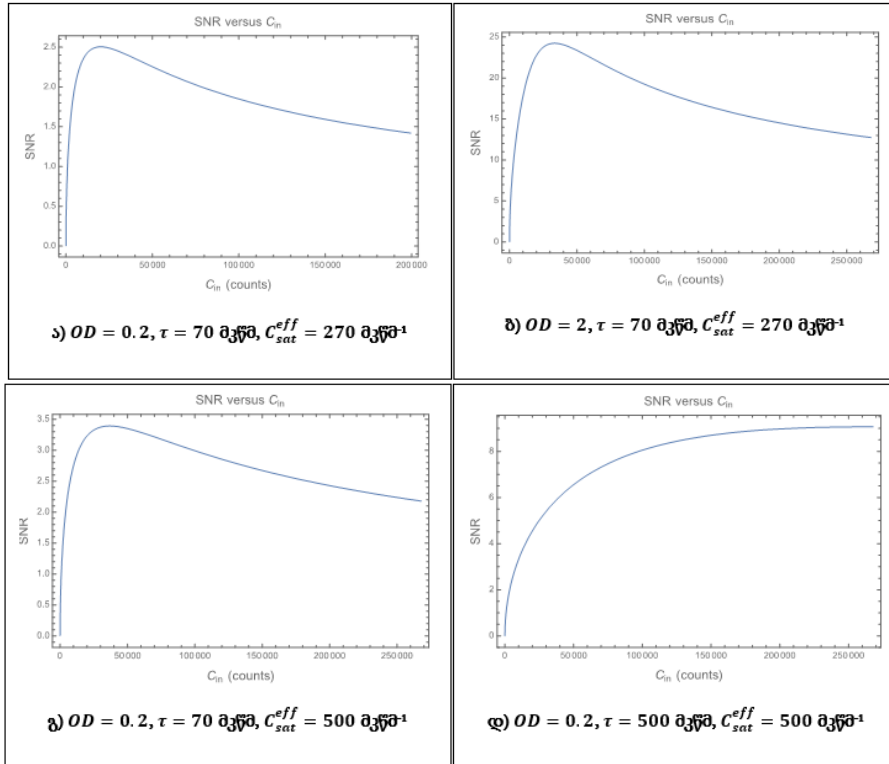


ნახ.3.4.2. სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობის დამოკიდებულება ტალღის სიგრძესა ( $\lambda$ ) და ოპტიკურ სიღრმეზე ( $\delta$ ), როცა  $\lambda_0 = 200$  ნმ, საინტეგრაციო დრო  $t = 100$  წმ, ხოლო ბიოლოგიურ ქსოვილებში სინათლის შეღწევის სიღრმე  $d = 2$  მმ

შედეგად შეიძლება გამოვიტანოთ რამდენიმე მნიშვნელოვანი დასკვნა:

- როცა  $\lambda_0=500$  ნმ,  $t=100$  წმ და  $d=1$  მმ: SNR მცირდება ტალღის სიგრძის მატებასთან ერთად. ეს მოსალოდნელი შედეგია, რადგან სენსორის მგრძობელობა ზოგადად მცირდება ტალღის სიგრძეზე, რომელიც შორს არის პიკური მგრძობელობისგან ( $\lambda_0$ ). SNR ასევე მცირდება გაზრდილი ოპტიკური სიღრმე,  $\delta$ , რაც ასახავს სიგნალის სიმძლავრის შემცირებას შეღწევადობის სიღრმის მატებასთან ერთად.
- 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 გვამღევეს 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.
- 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 მგრძობელობა გადადის უფრო მოკლე ტალღის სიგრძეზე (200 ნმ), SNR მრუდის ყოფაქცევა მნიშვნელოვნად იცვლება. SNR უფრო მაღალია მოკლე ტალღის სიგრძეზე, რაც შეესაბამება კვანტური ეფექტურობის მნიშვნელობას (QE) პიკს 200 ნმ-თან ახლოს. თუმცა, SNR კვლავ მცირდება ოპტიკური სიღრმის ( $\delta$ ) ზრდით.

**§3.5. სიგნალ/ხმაური თანაფარდობის შეფასება ცივი ატომების შთანთქმის სპექტრში.**  
 დისერტაციის მესამე თავის მეხუთე პარაგრაფში შეფასებულია სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა (SNR) ცივი ატომების შთანთქმის სპექტროსკოპიის კონტექსტში. შეფასებულია სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა ცივი ატომების შთანთქმის სპექტრში. 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 ( $\tau$ ).



**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 ( $\tau$ ) და დეტექტორის ეფექტური გაჯერების მაჩვენებლისათვის ( $C_{sat}^{eff}$ )**

ნახაზების ანალიზიდან ვადგენთ, რომ:

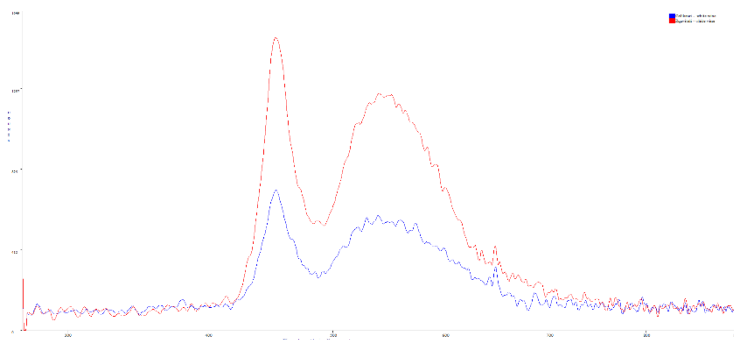
- როცა ოპტიკური სიმკვრივე (OD) და CCD-დეტექტორის ეფექტური გაჯერება ( $C_{sat}^{eff}$ ) მცირეა, სიგნალ/ხმაურის თანაფარდობა SNR პრაქტიკულად პიკურ მნიშვნელობას აჩვენებს, მაგრამ სწრაფად სტაბილიზირდება, რაც იმის მაჩვენებელია, რომ დეტექტორი ფოტონთა რაოდენობის ზრდასთან ერთად სწრაფად აღწევს შესაძლებლობის მაქსიმუმს.
- 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.

**§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, რომლის მოდერნიზაცია ეტაპობრივად ხორციელდებოდა ჩვენი ჯგუფის მიერ, მეორეს მხრივ ახალი ანალიტიკური მიდგომების შემუშავებაზე, რომლებიც სავსებით დასაშვებია გამოყენებული იქნას საკვები პროდუქტებისა და სასმელების ტიპიური 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).

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:

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



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



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.

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.

## დასკვნა

ელექტრონული გადასვლების მოდელირებიდან და დეტექტირებული სიგნალის 3D ანალიზიდან ჩანს, რომ 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) და ასევე CCD-ის ტექნიკური მახასიათებლებით (როგორცაა მისი QE სხვადასხვა ტალღის სიგრძეზე).

CCD სენსორის მგრძობელობის შეფასების შედეგებიდან შეგვიძლია გავაკეთოთ რიგი დასკვნები სენსორის მგრძობელობის გაზრდის შესაძლებლობის შესახებ:

- 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.
- 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 დაშესაბამისად, გარდაიქმნება ელექტრონებად.
- როცა ოპრიკური 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.
- 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. „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.
- 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.

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.

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.

სადოქტორო ნაშრომში მიღებული შედეგები ასახულია შემდეგ სამეცნიერო სტატიებში:

1. **Shainidze J.J.**, Gomidze N.Kh., Optimizing QE of CCD by Modifying BlackComet Detector Program. XII Japanese-Mediterranean Workshop on Applied Electromagnetic Engineering for Magnetic Superconducting, Multifunctional and Nanomaterials, 2023
2. **Shainidze J.J.**, Gomidze N.Kh., Creating Fluorescence Spectra Based on The Franck-Condon Factor. 66<sup>th</sup> International Conference for Students of Physics and Natural Sciences – Open Readings, 2023
3. Khajishvili M., **Shainidze J.**, Makharadze K. & Gomidze N. On the development of the fluorescence excitation-emission etalon matrix algorithm of wine. The Eurasia Proceedings of Science, Technology, Engineering & Mathematics (EPSTEM), 2023
4. Khajishvili M.R., Gomidze N.Kh., **Shainidze J.J.**, Estimation SNR of CCD camera for OD medium. International Conference on Basic Sciences, Engineering and Technology (ICBASET), 2022
5. Khajishvili M.R., Gomidze N.Kh., **Shainidze J.J.**, 3D Fluorescence Spectroscopy of Liquid Media via Internal Reference Method, Research and Education: Traditions and Innovations, 2022
6. Gomidze N.Kh., **Shainidze J.J.**, Jabnidze I., Makharadze K., Khajishvili M., Kalandadze L., Nakashidze O., Mskhaladze E., Estimation of Scintillation Index on a superconductor receiver for Gaussian Laser Beam propagated through Random Phase Screen. Journal of Biological Physics and Chemistry, 2020
7. **Shainidze J.**, Kalandadze L., Nakashidze O., Gomidze N., Estimation of parameters for a model of polycrystalline solar cells. Nanotechnology and Perceptions vol. 16, 2020
8. **Shainidze J.**, Gomidze N., Shengelia G., Turmanidze R., To the problems of fluorescence excitation spectrums. International scientific journal "Machines. Technologies. Materials.", 2018

## 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)დ-796.  
<https://rustaveli.org.ge/geo/200916031925tsignebi/radiofizika>
- [4] ლომიძე ნ., ჯაბნიძე ი., სურმაძე ზ. (2023) *ფიზიკური პროცესების მოდელირება*, ISBN 978-9941-488-72-6, UDC(უაკ) 53(075.8) დ-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<sup>+</sup> 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](http://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](http://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., 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
- [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 La<sub>2</sub>Hf<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 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 La<sub>2</sub>Hf<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 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 Spectroscopy of Liquid media via internal reference method. INTER-ACADEMIA 2021: Research and Education: Traditions and Innovations, Part of 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. *Graefe's 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.
- [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 TiO<sub>2</sub> thin films. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(29), 15538-15548.
- [93] Saunders, J. E., Sanders, C., Chen, H., & Looock, 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+ H<sub>2</sub>O and OD+ D<sub>2</sub>O 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  $\pi$ -conjugated polymers: departure from the franck-condon principle. *Physical Review Letters*, 122(5), 057402.
- [117] Zacharioudaki, D. E., Fitis, 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