

УДК 004.6

## **ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ЭПР-СПЕКТРОМЕТРА**

**А.В. Сысоев**

ФГУП «ВНИИФТРИ», Менделеево, Московская обл.  
sysoev@vniiftri.ru

*В статье говорится о разработке программы с целью получения доступа к данным спектрограмм на любом пользовательском ПК. Описывается процесс работы с программой.*

*The article deals with design of the Software with the purpose of gaining access to the spectrometer data on any computer. The process of working with this program is described.*

*Ключевые слова: ЭПР-спектрометр, спектрограмма, основные параметры, при которых регламентировалась спектрограмма*

### **Введение**

Спектры электронного парамагнитного резонанса, полученные с помощью ЭПР-анализатора CMS8400 фирмы ADANI, могут исследоваться и анализироваться только с помощью программ, входящих в пакет ПО указанного спектрометра. Это накладывает ограничение на использование результатов исследований, проведенных на данном ЭПР-спектрометре. С целью получения доступа к данным спектрограмм на любом пользовательском ПК, была разработана рассмотренная ниже программа, позволяющая, во-первых, воспроизвести основные параметры, при которых регистрировалась спектрограмма, и, во-вторых, рассчитать такие существенные параметры спектра как ширина спектральных линий  $\Delta H_{pp}$  и g-фактор.

### **Работа с программой**

Программа работает под управлением системы Windows в версиях, поддерживающих среду выполнения NET Framework 4. Приложение написано на языке программирования VisualC# в интегрированной среде разработки программного обеспечения Microsoft Visual Studio.

При запуске программы создается главное окно, в котором расположено поле для отображения графика, информационное поле с параметрами и показаниями, горизонтальные фреймы с данными. Помимо этого, имеется возможность сохранить или распечатать график с выделенными точками, определить g-фактор в интересующей части графика, точно вывести параметры магнитного поля, найти  $\Delta H_{pp}$ . Вид главного окна программы приведен на рис. 1.

В начале работы пользователь открывает файл с расширением .dat, полученный посредством работы с ПО ЭПР-спектрометра ADANI «CMS8400».

По данным, полученным из файла, строится график зависимости напряжения сигнала ЭПР от магнитного поля в резонаторе. Результат выводится в ячейки данных (Ax,Ay), (Vx,Vy), (Cx,Cy).

Кликавая кнопками мыши «правая», «левая», «средняя» в поле построения графика, выделяется до трех точек. Для удобства точки представлены в виде вертикальных прямых A,B,C, с различными цветами индикации.

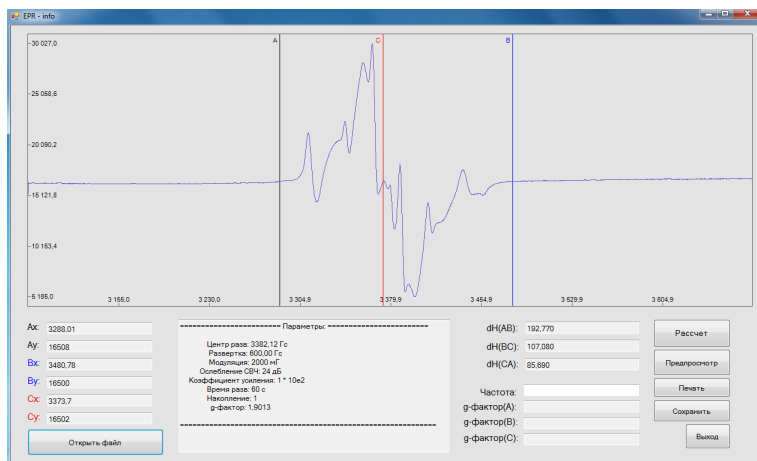


Рис. 1. Вид главного окна программы

Такие величины как: центр развертки, модуляция, ослабление СВЧ, коэффициент усиления, время развертки, число накоплений – выводится в специальное окно «Параметры». В полях  $\Delta H_{pp}$  (AB),  $\Delta H_{pp}$ (BC),  $\Delta H_{pp}$ (CA) происходит автоматический расчёт  $\Delta H_{pp}$  между соответствующими точками. При необходимости есть возможность ручного ввода значения частоты, для расчёта g-фактора на каждом из трех выбранных отрезков графика.

Таблицу данных спектрограммы можно сохранить в форматах: Gif, PNG, JPEG, Bitmapimage. При печати также происходит полное отображение на листе всех полученных величин. Имеется возможность предпросмотра печати.

### Тестирование программы

Опробование программы проводилось с использованием архивных данных по исследованию спектров ЭПР Si (кремний) крупного, среднего, мелкого измельчения. Параметры установки «CMS8400», при которых регистрировалась спектрограмма: центр развертки – 3381,54 Гс, развертка – 100,00 Гс, модуляция – 3000 мГ, ослабление СВЧ – 12 дБ, коэффициент усиления –  $210e^2$ , Время развертки – 50 с.

Анализируя архивные спектрограммы с расширением .dat, получаем три значения  $\Delta H_{pp}$ . Для кремния крупного измельчения  $\Delta H_{pp}$ -5890 (рис.2), для кремния среднего измельчения  $\Delta H_{pp}$ -5950 (рис.3), для кремния мелкого измельчения  $\Delta H_{pp}$ -6010 (рис.4). Средний g-фактор равен: 1,9026.

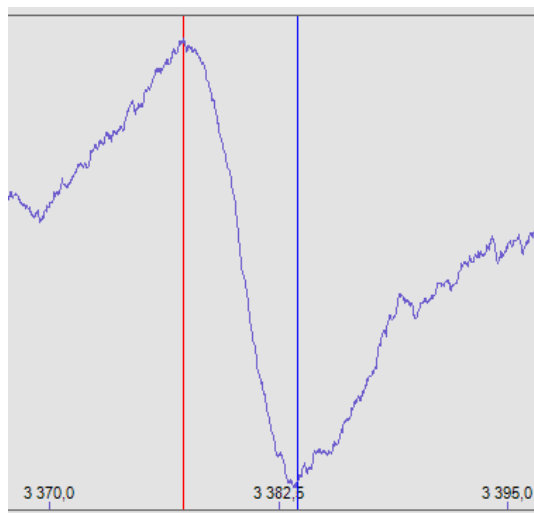


Рис. 2. ЭПР-сигнал Si крупного измельчения

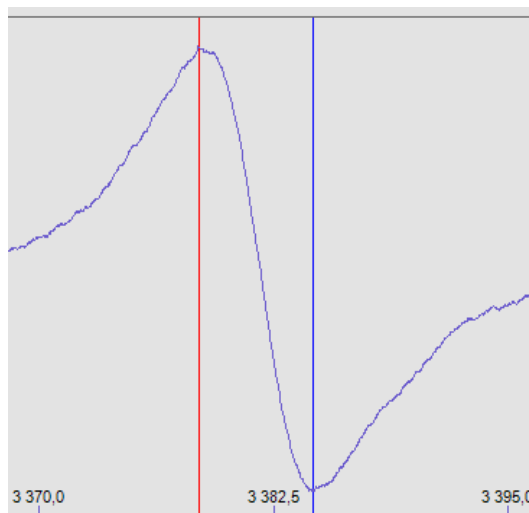


Рис. 3. ЭПР-сигнал Si среднего измельчения

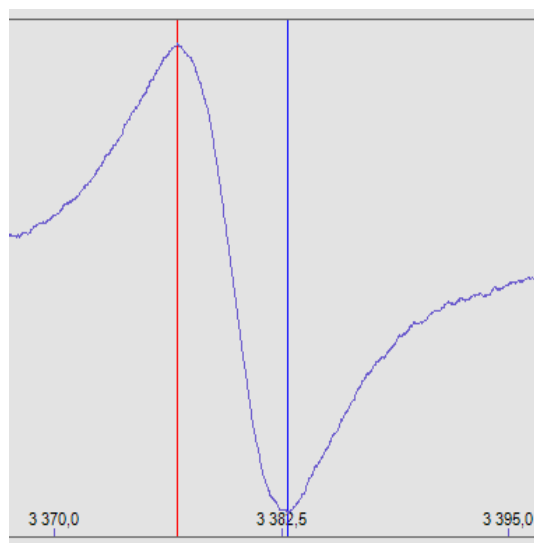


Рис. 4. ЭПР-сигнал Si мелкого измельчения

### **Заключение**

С помощью разработанной программы получены значения ширины спектральных линий порошков Si, средний g-фактор, основные параметры ЭПР-спектрометра. Также произведено построение ЭПР линий кремния различной степени помола. Программа позволила удобно и наглядно анализировать спектрограммы образцов с иллюстрацией  $\Delta H_{pp}$ , без использования ПО ЭПР-спектрометра.

Выражаю благодарность моему научному руководителю А.С. Лескову за постановку данной работы.

### **Литература**

1. Лесков А.С. Методы измерения спектров ЭПР.- Сборник трудов.- Серия «Радиотехнические измерения». – М.: ВНИИФТРИ, 1973.
2. Альтшулер С. А., Козырев Б.М. Электронный парамагнитный резонанс. – М. – Государственное издательство физ.-мат. литературы, 1961.
3. Пул Чарлз П. Техника ЭПР-спектроскопии. – М.: Изд-во «Мир», 1970.
4. Рихтер Д. CLR via C#. Программирование на платформе Microsoft .NET Framework 4.5 на языке C#. 4-е изд., Санкт-Петербург, 2016.