

Řízení činnosti spektrofluorometru při luminiscenčních experimentech

Bc. Martin Bielak

Bakalářská práce
2018

 Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky
akademický rok: 2017/2018

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Bc. Martin Bielak**
Osobní číslo: **A15086**
Studijní program: **B3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor: **Informační a řídicí technologie**
Forma studia: **kombinovaná**

Téma práce: **Řízení činnosti spektrofluorometru při luminiscenčních experimentech**

Téma anglicky: **The Control of Spectrofluorometric Activity in Luminescent Experiments**

Zásady pro vypracování:

1. Seznamte se s technikou používanou v luminiscenční spektroskopii.
2. Prostudujte návod spektrofluorometru PC 1 firmy ISS, který je používán v laboratoři na FAI UTB ve Zlíně.
3. Navrhněte způsob řízení výše jmenovaného přístroje pro potřeby snímání spekter v čase.
4. Napište program pro řízení experimentu a proveďte jeho vyzkoušení a test funkce celého zařízení.
5. Navrhněte alespoň jednu laboratorní úlohu pro studenty FAI UTB, která by byla vhodná pro výuku v předmětu Forezní vědy.

Rozsah bakalářské práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

1. Pelant I., Valenta J.: Luminescence Spectroscopy of Semiconductors, Oxford University Press , Oxford 2012
2. Lakowicz J.R.: Principles of Fluorescence Spectroscopy 3rd ed., Springer 2011
3. firemní literatura fy ISS, uživatelský manuál PC 1
4. Skvortsov L.A. : Laser methods for detecting explosive residues on surfaces of sistant objects, Quantum Electronics 42 (2012), pp. 1-11
5. Stuart B.: Forensic Analytical Techniques, Wiley 2013

Vedoucí bakalářské práce:

doc. RNDr. Vojtěch Křesálek, CSc.

Ústav elektroniky a měření

Datum zadání bakalářské práce:

15. prosince 2017

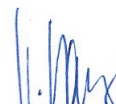
Termín odevzdání bakalářské práce:

25. května 2018

Ve Zlíně dne 15. prosince 2017



doc. Mgr. Milan Adámek, Ph.D.
děkan



prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
ředitel ústavu

Prohlašuji, že

- beru na vědomí, že odevzdáním bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších právních předpisů, bez ohledu na výsledek obhajoby;
- beru na vědomí, že bakalářské práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému dostupná k prezenčnímu nahlédnutí, že jeden výtisk bakalářské práce bude uložen v příruční knihovně Fakulty aplikované informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně a jeden výtisk bude uložen u vedoucího práce;
- byl/a jsem seznámen/a s tím, že na moji bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 1 autorského zákona má UTB ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 2 a 3 autorského zákona mohu užít své dílo – bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen připouští-li tak licenční smlouva uzavřená mezi mnou a Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně s tím, že vyrovnání případného přiměřeného příspěvku na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše) bude rovněž předmětem této licenční smlouvy;
- beru na vědomí, že pokud bylo k vypracování bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tedy pouze k nekomerčnímu využití), nelze výsledky bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- beru na vědomí, že pokud je výstupem bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá. Neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji,

- že jsem na bakalářské práci pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval. V případě publikace výsledků budu uveden jako spoluautor.
- že odevzdaná verze bakalářské práce a verze elektronická nahraná do IS/STAG jsou totožné.

Ve Zlíně 23.5.2018



.....
podpis autora

ABSTRAKT

Automatizace je důležitým oborem v moderní výpočetní technice a lze jí s úspěchem využít v mnoha oblastech, ať už každodenního života, nebo vědecké činnosti. Tato práce se zaměřuje na využití prostředků automatizace pro řízení spektrofluorescenčních experimentů s využitím spektrofluorometru PC1 od firmy ISS.

K automatizaci procesu dlouhodobých měření lze přistoupit několika způsoby. V následujícím textu je prezentováno využití jazyku VBScript v kombinaci s víceúčelovou aplikací pro příkazovou řádku NirCmd k automatizaci procesu měření spekter, které mohou trvat i několik dní.

Práce též obsahuje návrh laboratorní úlohy pro studenty FAI UTB. Úloha je koncipována tak, aby si studenti vyzkoušeli nejen měření spekter epoxidové pryskyřice a jejich vývoje v čase, ale též si vyzkoušeli výhody automatizace procesu měření.

Klíčová slova: VBScript, automatizace, spektrum, spektroskopie, ISS, PC1, NirCmd, laboratorní úloha

ABSTRACT

Automation is important in modern technology and science and can be successfully used in many areas. This thesis is focused on the use of automation for control of spectrofluorescence experiments using ISS spectrofluorometer PC1.

There are several ways how to automate the long-term measurement process. In this work is used VBScript in combination with a multi-purpose command line application NirCmd to automate the process of long-term measuring spectra.

The thesis also includes a draft of a laboratory task for FAI UTB students. In the laboratory task students measure the epoxy resin spectrum and their development over time. Laboratory task shows advantages of automation the measurement process.

Keywords: VBScript, automation, spectrum, spectroscopy, ISS, PC1, NirCmd, laboratory task

Na tomto místě bych chtěl poděkovat svému vedoucímu doc. RNDr. Vojtěchu Křesálkovi, CSc. za cenné rady, věcné připomínky a vstřícnost při konzultacích. Dále bych chtěl poděkovat všem kolegům za jejich podporu a za příjemné a kreativní pracovní prostředí. Také bych chtěl poděkovat všem, kteří mi pomáhali v tvorbě mé práce a odladění programu v laboratořích FAI UTB ve Zlíně, především Ing. Michaele Mikuličové za její pomoc při tvorbě laboratorní úlohy. V neposlední řadě bych rád poděkovat své rodině za jejich trpělivost a ochotu.

OBSAH

| | |
|--|-----------|
| ÚVOD | 9 |
| I TEORETICKÁ ČÁST | 9 |
| 1 ANALÝZA PROBLÉMU | 11 |
| 2 NAVRHOVANÝ ZPŮSOB ŘEŠENÍ OVLÁDÁNÍ SPEKTROFLOROMETRU | 13 |
| 2.1 VBS SCRIPT | 13 |
| 3 NIRCMD | 14 |
| 4 LUMINISCENČNÍ SPEKTROFLUOROSKOPIE | 15 |
| 4.1 VZNIK LUMINISCENČNÍCH SPEKTER | 15 |
| II PROJEKTOVÁ ČÁST | 16 |
| 5 KÓD PROGRAMU | 19 |
| 5.1 ROZBOR HLAVNÍCH ČÁSTÍ KÓDU | 20 |
| 6 POPIS FUNKCE PROGRAMU | 21 |
| 6.1 MOŽNOSTI UŽIVATELSKÝCH NASTAVENÍ | 21 |
| 6.2 AUTOMATIZACE PROCESU ŘÍZENÍ SPEKTROFLUOROMETRU | 21 |
| 7 INSTALACE PROGRAMU | 24 |
| 7.1 32BIT WINDOWS 7 | 24 |
| 7.2 64BIT WINDOWS 7 | 24 |
| III LABORATORNÍ ÚLOHA | 24 |
| 8 MĚŘENÍ KINETIKY VYTVRZOVÁNÍ EPOXIDOVÉ PRYSKYŘICE | 26 |
| 8.1 ZADÁNÍ LABORATORNÍ ÚLOHY | 26 |
| 8.1.1 Úkoly | 26 |
| 8.1.2 Vzorky | 26 |
| 8.1.3 Použité přístroje a pomůcky | 26 |
| 8.1.4 Postup měření | 26 |
| 8.2 PROTOKOL O MĚŘENÍ | 28 |
| 8.3 ZÁVĚR | 30 |
| ZÁVĚR | 31 |
| SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY | 32 |
| SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK | 33 |
| SEZNAM OBRÁZKŮ | 34 |
| SEZNAM TABULEK | 35 |

| | |
|---------------------|----|
| SEZNAM PŘÍLOH | 36 |
|---------------------|----|

ÚVOD

Spektroskopie hraje významnou roli při studiu struktury látek. Jedná se o vědu zabývající se měřením spekter vyzařování látek. Následnou analýzou těchto spekter lze získat mnoho informací o zkoumané látce. Pro analýzu a specifikaci procesů, které se ve zkoumaném vzorku odehrávají je třeba provádět dlouhodobá měření, která pokryjí celý sledovaný proces a provést nevíce vzorkování tohoto spojitého procesu. Takováto měření mohou trvat i několik dní. Na základě zkušeností z laboratoře je třeba volit vzorkovací interval individuálně dle rychlosti studovaného procesu.

Má práce je zaměřena především na řešení otázky automatizace procesu vzorkování s využitím spektrofotometru PC1 od firmy ISS. Mnou vytvořený program je koncipován tak, aby jej bylo možné využívat k automatizaci procesu vzorkování v laboratořích FAI. Program je navržen tak, aby bylo možné zachovat veškerou funkcionalitu spektrofotometru PC1.

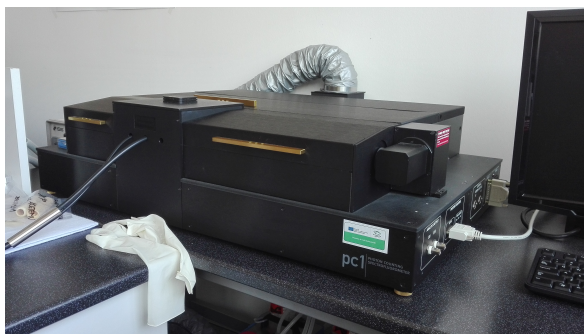
Cílem bakalářské práce je obeznámit čtenáře se základní problematikou procesu měření spekter v čase a zabývá se automatizací procesu měření v fluorescenční spektroskopii. V práci je též čtenář seznámen se základním využitím spektroskopie a možnostmi využití výpočetní techniky k řízení a automatizaci.

Spektrální analýza nalézá uplatnění i ve forenzních vědách [1] nebo laserové detekci výbušných zbytků na površích [2]. Spektroskopii je též možné využít ke studiu předimpregnovaných skelných vláken [3] nebo při studiu vytvrzování [4]. Práce také obsahuje ukázkou aplikace automatizace procesu měření na konkrétním problému, který je zpracován ve formě laboratorní úlohy pro studenty FAI v předmětu Forenzní vědy.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 Analýza problému

Zadáním práce bylo vytvořit způsob řízení spektrofluorometru tak, aby bylo možné zadané měření opakovat automatizovaně. Spektrofluorometr PC1 od firmy ISS je připojen k počítači s operačním systémem Windows 7 v 32 bit verzi. Spektrofluorometr je umístěn v laboratoři UTB, kde je používán pro výzkumné účely.



Obr. 1.1 Fotografie spektrofluorometru ISS PC1 v laboratoři UTB.



Obr. 1.2 Vyústění optického vlákna z spektrofluorometru.



Obr. 1.3 Aparatura spektrofluorometru ISS PC1.

Měření je ovládáno softwarem Vinci 2, jehož autorem je společnost ISS [5]. Tento software umožňuje ovládat spektrofluorometr a jeho kompletní nastavení. Tento SW

umožňuje provést počáteční nastavení a poté provést měření, které je již plně automatizované. Prostudováním manuálů k PC1 jsem zjistil, že bohužel není možné nastavit opakování měření po předem nastaveném čase. Vzhledem k tomu, že k softwaru nejsou dostupné zdrojové kódy, které by bylo možné volně upravovat, bylo třeba vyvinout způsob ovládání spektrofotometru kompatibilní se zadanými požadavky, které zněly:

- Navrhnout způsob řízení spektrofotometru pro potřeby snímání spekter v čase.
- V případě použití vlastního programu, jej uzpůsobit tak, aby bylo jeho uživatelské prostředí co nejjednodušší.
- Pokud to situace umožní, přizpůsobit kód programu tak, aby bylo možné jej později snadno upravit dle aktuálních potřeb.
- Zachovat všechny možnosti měření, které poskytuje spektrofotometr ISS PC1 ve spojení se softwarem Vinci 2.

2 Navrhovaný způsob řešení ovládání spektrofotometru

Vzhledem k výše popsanému jsem hledal způsob jak spektrometr ovládat a splnit co nejlépe všechny požadavky. K tomuto jsem použil skriptovací jazyk VBScript (Visual Basic Scripting Edition).

2.1 VBScript

Již od počátku se vývojáři snažili nalézt způsob, jak zefektivnit a automatizovat činnosti, které je třeba provádět přesně a opakovaně. Pro efektivní automatizaci často prováděných operací byly již v dobách sálových počítačů vyvinuty jazyky jako je například REXX (Restructured Extended Executor)[6] vyvinutý v IBM Mikem Cowlishawem.

Unixové systémy podporovaly skriptovací jazyky již od svého uvedení v plném rozsahu. V Unixových systémech není problém práce s proměnnými, cykly, matematickými výrazy nebo iteracemi již od raných verzí.

Kdežto v případě operačních systémů od společnosti Microsoft trvala integrace plnohodnotného skriptovacího jazyku o poznání déle. Když byl na počátku osmdesátých let 20. století uveden operační systém MS DOS, bylo v něm možné automatizovat operace pomocí jednoduchých dávkových souborů. Tyto soubory obsahovaly požadované příkazy, které byly po spuštění dávkového souboru postupně vykonávány tak, jakoby je uživatel zadával do příkazového řádku. Dávkové soubory poskytovaly široké možnosti automatizace, ale některé funkce postrádaly. Například měly omezené možnosti práce s proměnnými, nepodporovaly iterace a cykly a další.

Dávkové soubory byly zachovány i v prvních edicích operačního systému Windows. Až s příchodem Windows 95 byly Windows doplněny o skriptovací jazyk Windows Scripting Host (WSH), který však nebyl zpočátku součástí instalace a bylo jej třeba doinstalovat. Od Windows 98 je již WSH součástí instalace systému Windows.

Od operačního systému Windows 98 je skriptovací jazyk VBScript součástí jeho instalace. Je založen na jazyce Visual Basic a je považován za odpověď firmy Microsoft na tehdejší vznik jazyka JavaScript. VBScript je určen pro psaní skriptů pro WSH, také je možné jej použít na webových stránkách, avšak ke korektní funkci je třeba použít prohlížeč Internet Explorer.

3 NirCmd

NirCmd je rozšíření pro příkazový řádek s bohatou nabídkou funkcí, který umožňuje provádět některé užitečné úlohy bez zobrazení uživatelského rozhraní. NirCmd umožňuje tvorbu zástupců na ploše, změnu nastavení monitoru, upravovat registry a mnoho dalšího. Umožňuje také ovládat některé periferie jako je otevření dvířek CD-ROM, vypnutí monitoru a další.

Ovládání probíhá pomocí vkládání příkazů do příkazové řádky. V případě potřeby více příkazů lze použít dávkové soubory a pod.

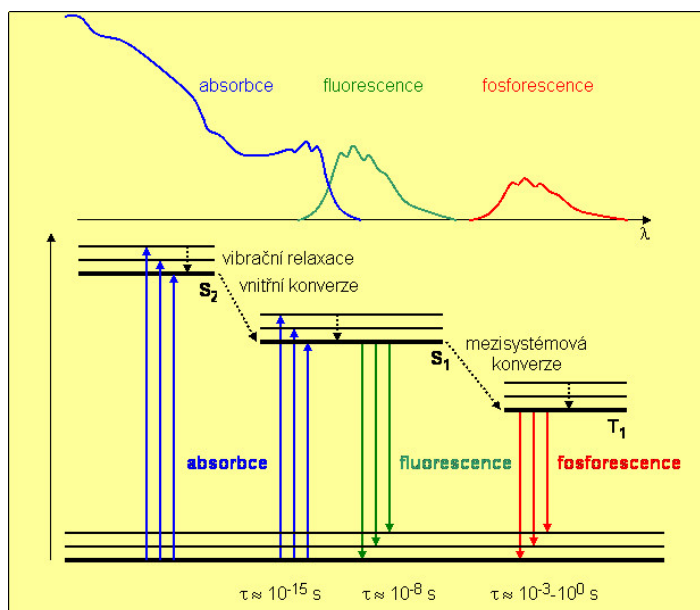
Tento nástroj je vydán jako freeware. Je povoleno jej bezplatně volně distribuovat prostřednictvím diskety, CD-ROMu, Internetu nebo jiným způsobem. Při šíření musí být vždy zahrnuty všechny soubory v distribučním balíčku bez jakýchkoliv změn. [7]

4 Luminiscenční spektrofluoroskopie

Na úvod je třeba uvést rozdíl mezi pojmy fluorescence, fosforescence a luminiscence. Fluorescence trvá velmi krátkou dobu po skončení působení excitačního záření, doba svitu fluorescence je srovnatelná s dobou jednoho zákmitu optického záření (řádově 10^{-14} s). Naopak fosforescence přetrvává mnohonásobně déle i po odstranění excitačního záření, intenzita fosforescence klesá exponenciálně s časem. Příkladem fosforescence z běžného života je například svit ručiček hodin (v tomto případě je k excitaci použito záření dopadající ze Slunce). Luminiscence pak v sobě zahrnuje jak fluorescenci tak i fosforescenci a jedná se o záření, které těleso vyzařuje navíc oproti Plankovu zákonu [8].

4.1 Vznik luminiscenčních spekter

Elektrony v obalu atomu se podle pravidel kvantové fyziky mohou nacházet jen na diskretních hladinách energie. V základním stavu atomu se tyto elektrony nacházejí na hladinách tak, aby byla celková energie atomu minimální. Podle Pauliho vylučovacího principu se dva nerozlišitelné fermiony, mezi něž patří mono jiné částice i elektrony, nesmějí nacházet na stejné hladině.



Obr. 4.1 Schéma zářivých a nezářivých přechodů mezi elektronově vibračními stavy složité molekuly [9].

Při přechodu některého z elektronů z nižšího do vyššího energetického stavu je třeba aby absorboval energii. Tato energie může být elektronu dodána například interakcí s fotonem, nebo pomocí tepla. Při tomto procesu zvaném excitace je elektron "vyho-

zen" do energeticky vyšší hladiny. Při zpětném přechodu je následně elektron deexcitován a přebytečná energie je vyzářena ve formě fotonu s vlnovou délkou odpovídající rozdílu energií hladin.

V případě podrobnějšího zájmu o fluorescenční jevy, metody jejich měření, vyhodnocení a další, doporučuji čtenáři studium některé z následujících knih: [10, 11].

II. PROJEKTOVÁ ČÁST

K tvorbě programu pro řízení spektrofluorometru jsem využil výhody jazyku VBScript pro automatizaci procesů v kombinaci s příkazy pro NirCmd. NirCmd ve verzi v2.81 jsem využil z důvodu požadavku co nejjednoduššího kódu a jeho přehlednosti. Tento požadavek plyne z požadavku na možnost jednoduché úpravy programu v budoucnu a na přehlednost kódu. Právě NirCmd umožňuje redukovat množství řádků kódu, kód je pak koncipován tak, aby byl co nejjednodušší a je v něm minimalizován počet příkazů na minimum, ovšem při zachování celkové požadované funkčnosti programu.

5 Kód programu

```
1
2 'Program slouzi k ovladani SW Vinci2
3 'Autor Bc. Martin Bielak – martin.bielak(a)seznam.cz
4
5
6 Set WshShell = CreateObject("WScript.Shell")
7 Dim wait, wait2, iter, name, help, a, b
8
9
10 wait = 0 'Cas Cekani mezi jednotlivymi merenimi v minut ch
11 iter = 0 'Pocet mereni (opakovani behu programu)
12 help = False
13
14 b = MsgBox("Otevrete SW Vinci2 ve FullScreen rezimu a nasledne
15         nastavte hodnoty mereni",0,"Info")
16
17 name = InputBox("Zadejte pozadovany nazev souboru (datum a cas bude
18         doplnen automaticky)","Nazev souboru")
19 iter = InputBox("Zadejte pocet mereni (pouze cela cisla)","Pocet
20         mereni", 10)
21 wait = InputBox("Zadejte prodlevu mezi merenimi (v minutach)","
22         Prodleva", 15)
23
24 wait2 = wait*60*1000
25
26 If IsNumeric(wait)=True And IsNumeric(iter)=True Then
27 If wait > 0 And iter > 0 Then
28     help = True
29     WScript.Echo "Nazev souboru bude ve tvaru: rrrmmdd_hh-mm_" &
30         name & vbCr & "Mezi pocatky mereni bude " & wait & " minut."
31         & vbCr & "Bude provedeno " & iter & " mereni."
32
33 For i=1 to iter Step 1
34     WshShell.Run "c:\nircmd\nircmd.exe setcursor 36 108", 0, True
35     wscript.sleep 1000
36     WshShell.Run "c:\nircmd\nircmd.exe sendmouse left dblclick ",
37         0, True
38
39     WshShell.Run "c:\nircmd\nircmd.exe setcursor 100 137", 0, True
40     wscript.sleep 1000
41     WshShell.Run "c:\nircmd\nircmd.exe sendmouse left dblclick ",
42         0, True
43
44     WshShell.SendKeys "~{a}"
45     wshshell.sendkeys Year(Now())
46     wshshell.sendkeys Month(Now())
47     wshshell.sendkeys Day(Now())
48     wshshell.sendkeys " "
49     wshshell.sendkeys Hour(Now())
50     wshshell.sendkeys "-"
51     wshshell.sendkeys Minute(Now())
52     wshshell.sendkeys " "
53     wshshell.sendkeys name
54     wshshell.sendkeys vbCr
55
56     WshShell.Run "c:\nircmd\nircmd.exe setcursor 30 70", 0, True
57     wscript.sleep 1000
58     WshShell.Run "c:\nircmd\nircmd.exe sendmouse left click ", 0,
59         True
60     wscript.sleep wait2
61 Next
62 b = MsgBox("Vsechna mereni byla dokoncena",0,"End")
63
64 End If
65 End If
66
67 If help = False Then
68     b = MsgBox("Nektera z hodnot byla zadana chybne, psosim spustte
69         program opetovne",0,"Warning")
70 End If
```

5.1 Rozbor hlavních částí kódu

V první části kódu dochází k inicializaci proměnných, následně jsou tyto proměnné naplněny uživatelskými daty. K tomuto slouží příkazy *InputBox*, kdy syntaxe je následovná:

```
InputBox("Zobrazený text", "Název okna", "Přednastavená hodnota")
```

Tímto jsou naplněny všechny proměnné potřebné k běhu programu uživatelskými hodnotami.

Následně je v 21 řádku kódu proveden převod proměnné *wait* z minut na milisekundy a uložen do proměnné *wait2*.

V dalším kroku je pomocí funkcí *If* a *IsNumeric* provedena kontrola validity zadaných dat. Pokud jsou zadaná data validní, dojde k vypsání zadaných hodnot na obrazovku pomocí funkce *WScript.Echo*. V případě že je některá z hodnot zadána špatně, je přeskočen hlavní cyklus programu a uživatel je na tuto skutečnost upozorněn pomocí okna se správou *MsgBox*.

V *For* cyklu začínajícím na řádku 29 začíná tělo samotného programu. V prvním kroku dochází k nastavení kurzoru na požadované souřadnice *X* a *Y* a dvojklik.

```
WshShell.Run "c:/nircmd/nircmdc.exe setcursor X Y", 0, True  
wscript.sleep 1000
```

```
WshShell.Run "c:/nircmd/nircmdc.exe sendmouse left dblclick", 0, True
```

Do označeného pole je vloženo do programu Vinci 2 aktuální časové razítko pomocí příkazu

```
WshShell.SendKeys Vkládaná hodnota.
```

Pomocí stejného příkazu je vloženo i požadovaný název souboru zadaný uživatelem v prvních krocích po spuštění.

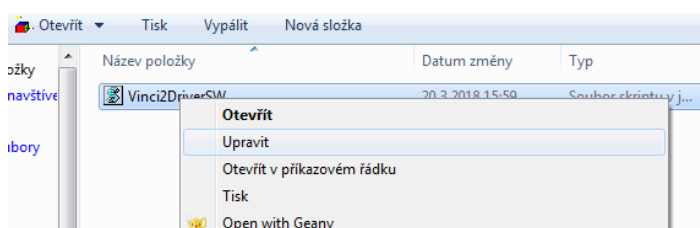
Poté je opět pomocí stejného příkazu, jako je uvedeno výše, nastaven kurzor nad tlačítko spuštění měření. Tímto je spuštěno měření v programu Vinci 2.

Následně program počká nastavenou dobu a postup je opakován až do dosažení požadovaného počtu opakování.

6 Popis funkce programu

6.1 Možnosti uživatelských nastavení

Program je již od počátku a výběru programovacího jazyka koncipován jako plně uživatelsky upravitelný. Do kódu programu je možné zasahovat přímo bez nutnosti jeho překladu před spuštěním. Do režimu editace je možné se přepnout kliknutím pravým tlačítkem na ikonu programu Vinci2DriverSW.vbs a zvolením "Upravit" z kontextové nabídky. Tímto se kód programu otevře v poznámkovém bloku a je možné do něj zasahovat a upravovat jej dle aktuálních požadavků. Popis jednotlivých částí kódu je uveden v předchozí kapitole 5.1.

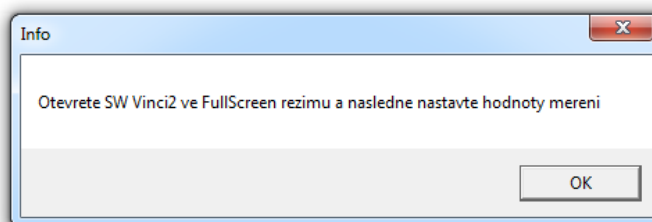


Obr. 6.1 Dialogová nabídka.

Avšak nastavování proměnných před každým měřením přímo editací kódu programu by bylo velmi nepohodlné a mohlo by vyústit v krajních případech i k ovlivnění funkčnosti programu. Proto je mimo přímého zásahu do kódu programu možné měnit základní nastavení jako jsou název souboru, počet a periodu opakování přímo za běhu programu. Tato nastavení je možné volit při každém spuštění programu (jak je uvedeno v následující kapitole).

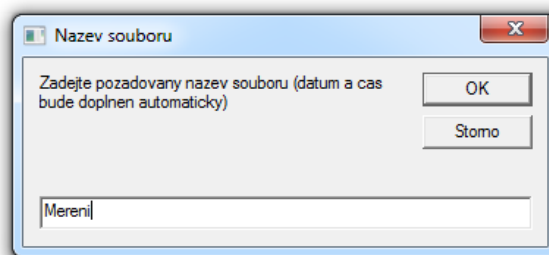
6.2 Automatizace procesu řízení spektrofluorometru

Program se spouští poklepnutím na ikonu programu Vinci2DriverSW.vbs, tím je program spuštěn. V prvním kroku je uživatel vyzván k otevření SW Vinci 2 sloužícího k ovládání spektrofluorometru PC1 a k nastavení požadovaných parametrů měření v tomto programu (obrázek 6.2).



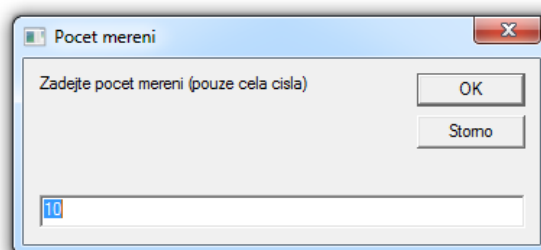
Obr. 6.2 1. okno programu.

Po nastavení a spuštění ovládacího SW Vinci 2 v celoobrazovkovém režimu a odkliknutí předchozího okna je uživatel vyzván k zadání dalších proměnných potřebných ke správnému běhu programu. Prvně je uživatel vyzván k zadání požadovaného názvu výstupního souboru (obrázek 6.3). K názvu souboru je automaticky doplněno časové razítko dle aktuálního data a času měření. Tento časový identifikační údaj je aktualizován pro každé opakování měření, aby bylo možno identifikovat přesný okamžik spuštění měření dle názvu souboru.



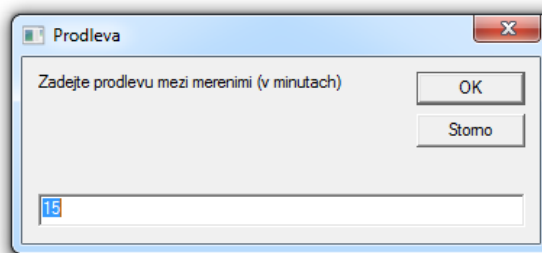
Obr. 6.3 2. okno programu - zadání požadovaného názvu.

Následně je uživatel vyzván k zadání počtu opakování měření (obrázek 6.4), defaultně je přednastaven počet opakování na 10.



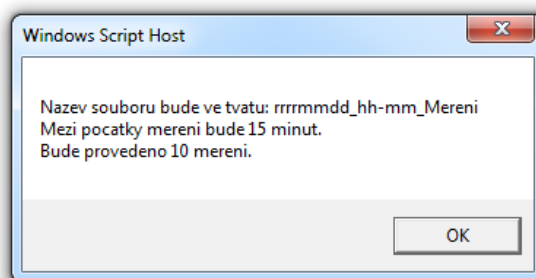
Obr. 6.4 3. okno programu - zadání počtu opakování měření.

Spolu s počtem měření je též důležitým údajem časová prodleva mezi měřeními, k jejímuž zadání je uživatel vyzván pomocí okna (obrázek 6.5), defaultně je přednastaveno opakování po 15 minutách. Pro správnou funkci programu je třeba zadat počet opakování v celočíselném formátu, čas je zadáván v minutách a jsou akceptovány i desetinné hodnoty. V obou případech je třeba zadat kladné hodnoty.



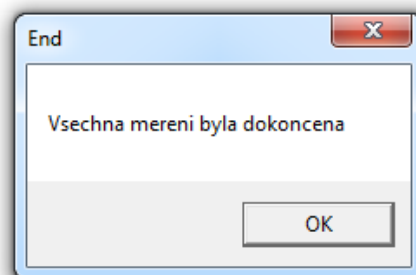
Obr. 6.5 4. okno programu - nastavení časové prodlevy.

Veškerá výše uvedená nastavení jsou klíčová pro správný běh ovládacího programu Vinci2DriverSW.vbs, stejně tak jsou tyto údaje o počtu opakování a časové prodlevě vzorkování zásadní pro správný výsledek měření. Proto ještě před samotným spuštěním prvního cyklu programu jsou uživateli zrekapitulovány všechna zadaná nastavení a údaje (obrázek 6.6).



Obr. 6.6 5. okno programu - rekapitulace.

Po ukončení běhu programu je uživatel o této skutečnosti informován následujícím dialogem (obrázek 6.7).



Obr. 6.7 Poslední okno programu.

Tímto jsou ukončena všechna měření, dále je možné program opětovně spustit spolu s dalšími měřeními, nebo ukončit a vyhodnotit naměřená data.

7 Instalace programu

Veškeré potřebné soubory jsou přiloženy na CD jako příloha k práci.

Nejprve je nutné zjistit jaká verze systému Windows 7 je využívána na PC, které má být ovládáno. To provedeme kliknutím pravým tlačítkem myši na ikonu *Teto počítač* a vybereme *Vlastnosti*. Zde v řádku *Typ systému* vyčteme zda je využita 32bit nebo 64bit verze systému.

7.1 32bit Windows 7

Na CD s přílohami otevřte složku nazvanou *32bit* a z ní přepokopírujte složku *nircmd* na disk C. Cesta k souboru bude vypadat následovně: *C:/nircmd/nircmdc.exe*. V dalším kroku přepokopírujte soubor *Vinci2DriverSW.vbs* na Vámi vybrané místo v PC (například na plochu).

7.2 64bit Windows 7

Na CD s přílohami otevřte složku nazvanou *64bit* a z ní přepokopírujte složku *nircmd* na disk C. Cesta k souboru bude vypadat následovně: *C:/nircmd/nircmdc.exe*. V dalším kroku přepokopírujte soubor *Vinci2DriverSW.vbs* na Vámi vybrané místo v PC (například na plochu).

III. LABORATORNÍ ÚLOHA

8 Měření kinetiky vytvrzování epoxidové pryskyřice

8.1 Zadání laboratorní úlohy

8.1.1 Úkoly

1. Nastudujte si ovládání spektrofluorometru ISS PC1, softwaru Vinci 2 a softwaru Vinci2DriverSW.vbs.
2. Podle uvedeného postupu proveďte měření.
3. Naměřená data zpracujte v softwaru MS Excel. Z 24 hodinového měření vytvořte 3D graf závislosti intenzity na emisní vlnové délce a na čase. Z tohoto grafu vyberte nejvýraznější pík a pro tento pík vytvořte bodový graf závislosti intenzity na čase. Dále vytvořte graf závislosti intenzity na čase, ve kterém porovnáte intenzitu jednotlivých složek pryskyřice s intenzitami směsi po namíchání (čas $t_0 = 0$) a po 24 hodinách měření.

8.1.2 Vzorky

- Dvousložková epoxidová pryskyřice 1200
- Tvrdidlo P11

8.1.3 Použité přístroje a pomůcky

- ISS PC1 spektrofluorometr
- Laboratorní váhy KERN PLT 2000-3DM
- Dřevěné špachtle, polypropylenový kelímek, Pasteurova pipeta z polyetylénu
- Plíšky pro umístění vzorku

8.1.4 Postup měření

1. Pomocí dřevěné špachtle naneste tenkou vrstvu epoxidové pryskyřice 1200 na plíšek. Plíšek umístěte do měřicího zařízení a proveďte několik měření s různým nastavením. Na základě získaných výsledků vhodně nastavte měřicí zařízení a zvolte nejvhodnější excitační vlnovou délku a odpovídající rozsah emisních vlnových délek.
2. Změřte emisní spektrum samotné pryskyřice a samotného tvrdidla.

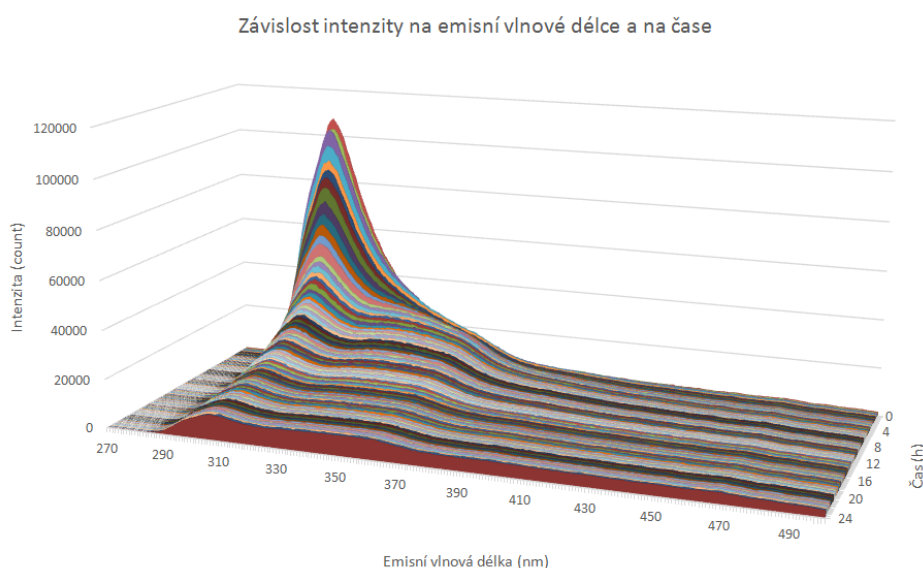
3. V polypropylenovém kelímku smíchejte pryskyřici s tvrdidlem v poměru 100:6,5. Tenkou vrstvou získané směsi naneste na plíšek. Poté plíšek umístěte do měřicího zařízení.
4. Spusťte software Vinci2DriverSW.vbs a nastavte měření po dobu 24 hodin, kdy vzorkovací interval měření bude 15 minut.
5. Spusťte měření.

8.2 Protokol o měření

Nejprve jsme si z manuálu nastudovali ovládání spektrofluorometru ISS PC1 a softwaru Vinci 2, který slouží k ovládání spektrofluorometru. Poté jsme se seznámili s ovládáním softwaru Vinci2DriverSW.vbs, který slouží k automatickému spouštění měření v zadaných časových intervalech.

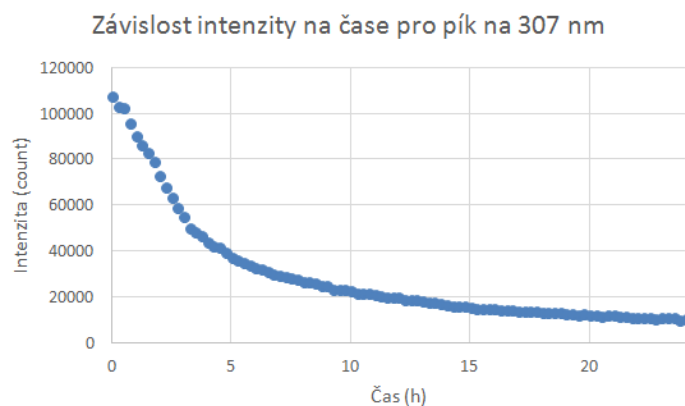
Dále jsme měřili epoxidovou pryskyřici 1200. Pomocí dřevěné špachtle jsme z plechovky odebrali malé množství pryskyřice, kterou jsme poté v tenké vrstvě nanесли na plíšek. Plíšek jsme umístili do měřicího zařízení a provedli několik měření s různým nastavením. Na základě provedených měření jsme nastavili clonu na polovinu a zvolili excitační vlnovou délku 260 nm. Rozsah emisních vlnových délek jsme zvolili od 270 do 500 nm.

S tímto nastavením jsme změřili znovu pryskyřici 1200 a tvrdidlo P11, které jsme z lahvičky odebrali pomocí polyetylenové pipety. Poté jsme na laboratorní váhy umístili kelímek a váhy jsme vynulovali. Do kelímku jsme umístili malé množství pryskyřice a spočetali, kolik je třeba přidat tvrdidla, aby výsledný obsah pryskyřice a tvrdidla ve směsi byl 100:6,5. Směs jsme důkladně promíchali a na plíšek nanесли tenkou vrstvu. Plíšek jsme umístili do měřicího zařízení a v softwaru Vinci2DriverSW.vbs jsme jako počet měření zvolili 97 a interval měření 15 minut, tzn. měření po 24 hodin. Z výsledků tohoto měření jsme vytvořili 3D graf závislosti intenzity na emisní vlnové délce a na čase (obrázek 8.1).



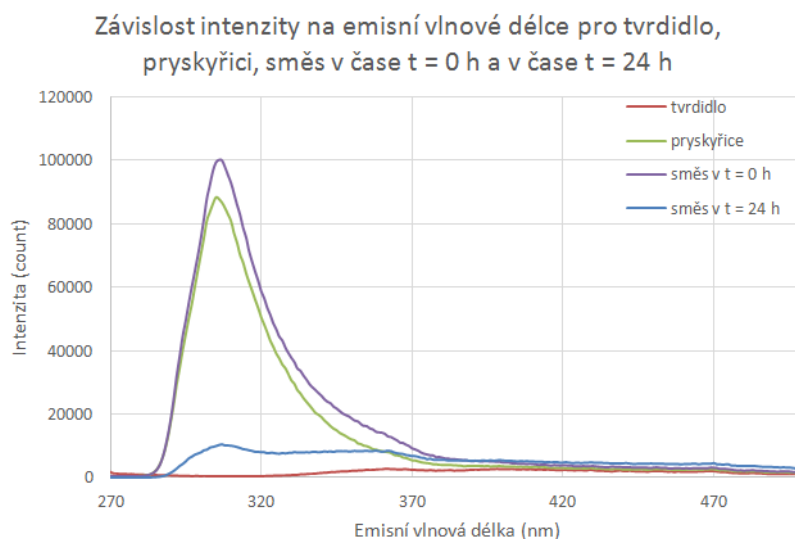
Obr. 8.1 Závislost intenzity na emisní vlnové délce a na čase.

Z 3D grafu jsme jako nejvýraznější pík vybrali pík na vlnové délce 307 nm. Pro tento pík jsme vytvořili graf závislosti intenzity na čase (obrázek 8.2).



Obr. 8.2 Závislost intenzity na čase pro pík na 307 nm.

Nakonec jsme vytvořili graf závislosti intenzity na emisní vlnové délce pro tvrdidlo, pryskyřici a směs v čase $t = 0$ h a v čase $t = 24$ h (obrázek 8.3).



Obr. 8.3 Závislost intenzity na emisní vlnové délce pro tvrdidlo, pryskyřici, směs v čase $t = 0$ h a v čase $t = 24$ h.

8.3 Závěr

Z 24 hodin měření jsme zjistili, že intenzita fluorescence směsi pryskyřice a tvrdidla s časem klesá. To je dáno vytvrzováním epoxidové pryskyřice. Jako nejvýraznější pík pro směs jsme určili pík na 307 nm. Pro tento pík jsme vytvořili graf závislosti intenzity na čase, ze kterého je patrný pokles intenzity fluorescence v čase. Nejrychleji klesá intenzita v prvních pěti hodinách. Po 10 hodinách již intenzita klesá velmi pomalu a po 20 hodinách se intenzita fluorescence v čase skoro nemění. Lze říci, že po 24 hodinách je směs epoxidové pryskyřice vytvrzená.

Nakonec jsme vytvořili graf závislosti intenzity na emisní vlnové délce pro tvrdidlo, pryskyřici a směs v čase $t = 0\text{h}$ a v čase $t = 24\text{h}$. Z grafu je patrné, že intenzita fluorescence směsi v čase $t = 0\text{h}$ je dána pryskyřicí, protože tvrdidlo nejeví téměř žádnou fluorescenci. Výrazný pík na 307 nm je společný pro pryskyřici i pro směs.

ZÁVĚR

K automatizaci procesů v laboratoři lze s úspěchem využít výhod výpočetní techniky. Způsobů jak tohoto dosáhnout je mnoho, na výběr je spousta programovacích jazyků. Ve výše uvedených kapitolách je popsáno využití jazyku VBScript k účelu automatizace měření. Tímto programovacím jazykem byla vytvořena nadstavba ovládající původní SW Vinci 2, který však umožňoval spouštět pouze jednotlivá měření. Pro účely vzorkování bylo třeba fyzického dozoru laboranta, který se stanovenou vzorkovací frekvencí spouštěl měření manuálně.

Program vytvořený v rámci této bakalářské práce je využíván na automatizaci dlouhodobých měření v laboratoři FAI UTB. Bylo provedeno několik testů funkčnosti programu za účelem otestování stability řízení experimentů. Byly provedeny krátkodobé testy, které měly za úkol odhalit problémy v ovládání experimentu. Mimo těchto krátkodobých testů byl již program několikrát využit i k měřením trvajícím déle než 24 hodin. I při těchto dlouhotrvajících měřeních se program Vinci2DriverSW.vbs osvědčil a výsledky získané těmito měřeními mohou být dále využity pro výzkumnou činnost Fakulty Aplikované Informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] *Stuart B.: Forensic Analytical Techniques, Wiley 2013*
- [2] *Skvortsov L.A. : Laser methods for detecting explosive residues on surfaces of sistant objects, Quantum Electronics 42 (2012), pp. 1-11*
- [3] *R. C. M. Sales, M. F. Diniz, R. C. L. Dutra, G. P. Thim, D. Dibbern-Brunelli: Thermal Curing of Glass-Epoxy Prepregs by Luminescence Spectroscopy, Wiley 2010*
- [4] *R. Vatanparast, S. Li, H. Lemmetyinen: Fluorescence Method for Monitoring Isothermal Curing and Shelf Life of an Epoxy-Anhydride System, Wiley 2001*
- [5] *Firemní literatura fy ISS, uživatelský manuál PC1.*
- [6] *AITKEN, Peter G. Windows Script Host 2.0: dávkové soubory pro Windows. Praha: Grada, 2001. Moderní programování. ISBN 80-247-0134-0.*
- [7] *NirCmd v2.81. [online]. [cit. 2018-04-30]. Dostupný z <http://www.nirsoft.net/utills/nircmd.html>*
- [8] *PELANT, Ivan a Jan VALENTA. Luminescence doma, v přírodě a v laboratoři. Praha: Academia, 2014. Průhledy (Academia). ISBN 978-80-200-2394-0.*
- [9] *Schéma zářivých a nezářivých přechodů mezi elektronově vibračními stavy složité molekuly (forma Jablonského diagramu). [online]. [cit. 2018-04-29]. Dostupný z <http://psych.lf1.cuni.cz/fluorescence/soubory/principy.htm>*
- [10] *LAKOWICZ, Joseph R. Principles of fluorescence spectroscopy. 2nd ed. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, c1999. ISBN 0-306-46093-9.*
- [11] *PELANT, Ivan a Jan VALENTA. Luminescence spectroscopy of semiconductors. New York: Oxford University Press, 2012.*

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

| | |
|----------|--|
| CD | Kompaktní disk |
| PC | Osobní počítač |
| SW | Software (též programové vybavení) |
| VBScript | Visual Basic Scripting Edition |
| WSH | Windows Script Host, starším názvem Windows Scripting Host |

SEZNAM OBRÁZKŮ

| | | |
|----------|--|----|
| Obr. 1.1 | Fotografie spektrofluorometru ISS PC1 v laboratoři UTB. | 11 |
| Obr. 1.2 | Vyústění optického vlákna z spektrofluorometru. | 11 |
| Obr. 1.3 | Aparatura spektrofluorometru ISS PC1. | 11 |
| Obr. 4.1 | Schéma zářivých a nezářivých přechodů mezi elektronově vibračními stavy složité molekuly [9]. | 15 |
| Obr. 6.1 | Dialogová nabídka. | 21 |
| Obr. 6.2 | 1. okno programu. | 21 |
| Obr. 6.3 | 2. okno programu - zadání požadovaného názvu. | 22 |
| Obr. 6.4 | 3. okno programu - zadání počtu opakování měření. | 22 |
| Obr. 6.5 | 4. okno programu - nastavení časové prodlevy. | 23 |
| Obr. 6.6 | 5. okno programu - rekapitulace. | 23 |
| Obr. 6.7 | Poslední okno programu. | 23 |
| Obr. 8.1 | Závislost intenzity na emisní vlnové délce a na čase. | 28 |
| Obr. 8.2 | Závislost intenzity na čase pro pík na 307 nm. | 29 |
| Obr. 8.3 | Závislost intenzity na emisní vlnové délce pro tvrdidlo, pryskyřici, směs v čase $t = 0h$ a v čase $t = 24h$ | 29 |

SEZNAM TABULEK

Práce neobsahuje tabulky.

SEZNAM PŘÍLOH

P I. Seznam příloh na CD

PŘÍLOHA P I. SEZNAM PŘÍLOH NA CD

Program "Vinci2DriverSW.vbs" včetně zdrojového kódu v textovém souboru.

Instalační soubory k instalaci na 32/64bit verzi systému a soubor s popisem postupu instalace.