

УДК 004.352:543.422.7

І. І. Желтвай¹, Є. В. Тимухін¹, Р. Є. Хома^{2,3}, С. В. Водзінський^{2,3}¹Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського НАН України
Люстдорфська дорога, 86, м. Одеса, 65080, Україна
email: zselvay@i.ua²Одеський національний університет ім. І. І. Мечникова,
вул. Дворянська, 2, Одеса, 65026, Україна³Фізико-хімічний інститут захисту навколишнього середовища і людини
МОН України та НАН України, вул. Преображенська 3, 65082, Одеса

ВИКОРИСТАННЯ ОФІСНОГО СКАНЕРУ ДЛЯ ОТРИМАННЯ ЦИФРОВИХ ЗОБРАЖЕНЬ ОБ'ЄКТІВ АНАЛІЗУ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ ВИЗНАЧЕННЯ ЇХ КОЛІРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Розглянуто деякі методичні питання отримання цифрових зображень поверхонь об'ємних об'єктів (рідини, тверді тіла, порошки) за допомогою офісного сканеру з їх подальшою обробкою в графічному редакторі з метою визначення колірних характеристик.

Ключові слова: сканер, цифрові зображення, кольориметричні визначення,

Вимірювання аналітичного сигналу в спектроскопічних методах аналізу засноване на визначенні амплітудних характеристик оптичного випромінювання після його взаємодії з об'єктом аналізу. Основними інформативними параметрами при цьому служать такі характеристики, як оптична густина, коефіцієнт дифузного відбиття, інтенсивність люмінесценції і т. д. Останнім часом в практику аналітичної хімії входить хімічна кольориметрія, заснована на вимірюванні інтегральних характеристик кольору (координати кольору в різних системах, світлота та насиченість кольору, жовтизна, колірний тон і інші). Цей метод дозволяє як розрізняти спектрально близькі речовини, так і отримувати додаткові відомості про них. Метод досить інформативний і сфера його застосування постійно розширюється [1–3].

У зв'язку з розвитком експрес-методів аналізу з візуальним детектуванням виникає завдання визначення вмісту речовини за сумарною зміною кольору тест-зразка, яке дозволяють вирішити кольориметричні системи, максимально наближені за своїми характеристиками до людського зору. Математичний опис кольору в кольориметрії базується на тому принципі, що будь-який колір можна представити у вигляді суміші (суми) певних кількостей трьох лінійно незалежних кольорів. Кольори, як сукупність тривимірних векторів, можна геометрично уявити в просторі, яке називається колірним. У більшості випадків використовують координати кольору досліджуваного зразка в колірній системі RGB, яка утворена трьома основними кольорами – червоним (Red), зеленим (Green) і синім (Blue). Існують інші системи, такі, як CMYK, LAB, HSB, кожна з яких оптимізована для вирішення певного кола завдань, що виникають при кількісному представленні кольору. Відзначимо, що вибір трьох основних кольорів, які задають систему вимірюван-

ня, не має принципового значення для вирішення кольориметричних завдань. Слід брати ту систему, яка для даного випадку найбільш зручна.

На першому етапі розвитку кольориметрії кольірні характеристики розраховували на основі спектрів поглинання або дифузного відбиття з використанням функцій додавання кольорів, що лежать в основі рівняння Грасмана [4–6]. Потім, з розвитком приладової бази, з'явилися фотометри, зазвичай великогабаритні та коштовні, що дозволяли безпосередньо вимірювати кольориметричні функції. З поширенням цифрової фотографії, настільних сканерів і комп'ютерних програм обробки кольорового зображення з'явився швидкий і об'єктивний спосіб оцінки кольорних характеристик забарвлених зразків, що відкриває перспективу застосування кольориметрії в хімічному аналізі різних об'єктів за відсутності приладового забезпечення або з мінімальним його застосуванням [7–8]. Отриманий за допомогою цифрового фотоапарату [9], кіно- або відеокамери [10–12] або сканеру [13–23] файл зображення обробляється графічним редактором. Таким чином, процес кольориметричного аналізу розбивається на дві частини: отримання якісного цифрового зображення об'єкту, що аналізується, та обробка отриманого файлу в графічному редакторі. Під якістю зображення в даному випадку мається на увазі рівномірно залита кольором вимірювана поверхня.

При використанні фото- або кінозйомки виникають суттєві незручності, пов'язані зі стандартизацією освітлення і взаємного розташування камери і об'єкта дослідження. У даній роботі показана перспективність використання настільного офісного сканеру в якості аналітичного приладу, придатного для оцінки кольорних характеристик забарвлених об'єктів непланарної форми, а також порошків і рідин.

Звичайний офісний планшетний сканер призначений для отримання цифрових файлів зображень двовимірних об'єктів (в основному поліграфічної продукції), тому він без особливих проблем може бути пристосований для фіксації зображень пластинок тонкошарової хроматографії [13, 15, 16, 18], кольорних тест-шкал на папері або інших плоских носіях [10, 14]. Відзначимо, що офісний сканер успішно використовується як науковий інструмент у різних областях науки, наприклад, для вимірювання площ фрагментів рослин [24], сканування ямкових планшетів [25–27], поверхонь мінералів [28], проте методичні питання щодо сканування розчинів, порошків, поверхонь лікарських форм у науковій літературі практично не обговорюються.

Суттєвим обмеженням використання офісного сканеру при вимірюванні кольору об'ємних об'єктів є спотворення результатів через попадання стороннього світла (кришка сканера відкрита). Частково зняти цю проблему можна використовуючи трафарет з білого паперу, який розташований безпосередньо на склі сканеру (рис. 1). Для цього, за допомогою стандартного набору свердел для пробок, в аркуші білого паперу вирізаються отвори різного діаметру, які обмежують площу сканування. Поверхня трафарету одночасно служить вихідної міткою для характеристики білого кольору (наприклад 250 RGB). Використання трафарету також істотно усуває відхилення кольору на кромках об'єкту сканування, пов'язане з відблисками і тінню від поверхні, що відбиває в результаті руху лампи. Особливо це актуально при скануванні поверхні таблеток, що мають опуклу форму [17]. У фармацевтичній хімії оцінка кольору таблеток може бути використана для технологічного контролю оптимальної товщини кольорової оболонки,

яка впливає на її кольорові характеристики. Також представляє інтерес контроль зміни кольору таблеток в процесі зберігання, визначення ефективної концентрації стабілізатора і т. п.

Для отримання кольориметричних характеристик забарвлених рідин можна використовувати кювети від універсального фотометру ФМ [29]. Для зручності розташування на горизонтальній площині вони мають розширену плоску підставку. Світловий потік проходить через ці кювети від низу до верху, тому товщина їх шару обмежується кришками. З цього набору оптимальними виявилися кювети з рівнем рідини висотою 1 см (рис. 1). Кювети повинні бути заповнені розчином таким чином, щоб при розгляданні зверху під кришкою не спостерігалось бульбашок повітря. Необхідно ретельно стежити за чистотою поверхонь дна і кришки кювети. Найменші сліди від висохлих крапель рідини можуть істотно спотворювати результат вимірювань. Верхня сторона кришки кювети накривається білим папером, а вся робоча поверхня сканеру – щільною тканиною з не відбиваючого матеріалу.

Сканування порошків зручно проводити, поміщаючи їх в спеціальний контейнер, виготовлений з двох смужок скотчу [30]. Для цього на скотч завширшки 45 мм наклеюють трафарет з білого паперу з пробитим отвором діаметром 1–2 см. Поверхню отвору рівномірно покривають досліджуванним порошком (50–80 мг) і заклеюють зверху другою смужкою скотчу. Зовнішній вигляд такого контейнера з порошком наведено на рис. 1.

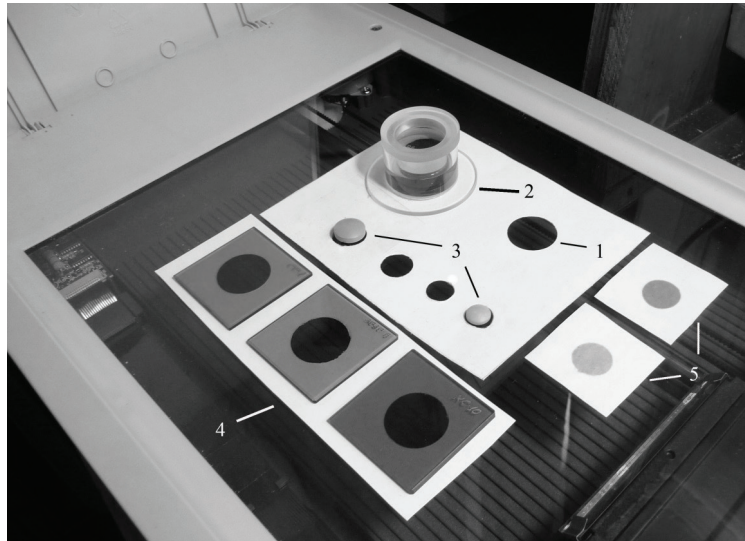


Рис. 1. Розташування різних об'єктів на поверхні сканера: 1 – паперовий трафарет із отворами, 2 – кювета з рідиною, 3 – таблетки, 4 – кольорові стекла, 5 – контейнери з порошками.

Fig. 1. Location of various objects on the surface of the scanner: 1 – paper stencil with holes, 2 – cuvette with liquid, 3 – tablets, 4 – colored glasses, 5 – containers with powders.

Зчитування інформації в графічному редакторі

В даний час багато графічних редакторів мають в своєму арсеналі можливість визначення кольориметричних параметрів як зображення у цілому, так і окремих пікселів, з яких воно складається. Графічний редактор – це потужний інструмент обробки цифрових зображень, який володіє множиною функцій і можливостей, для освоєння яких необхідні значні витрати часу і зусиль. Нижче наведено опис процедури, що дозволяє легко і швидко освоїти навички отримання інформації, що цікавить хіміка-аналітика.

На рис. 2 наведено зовнішній вигляд монітора після відкриття файлу зображення в графічному редакторі Photoshop CS3. У наведеному прикладі саме зображення представляє собою трафарет з білого паперу з двома отворами, накритими кюветами з розчинами різних концентрацій і позначено на рис. 2 як робоча область (1). Головним інструментом для «вимірів» є плаваюча палітра (2), що містить вкладки Навігатор, Гістограма і Інфо.

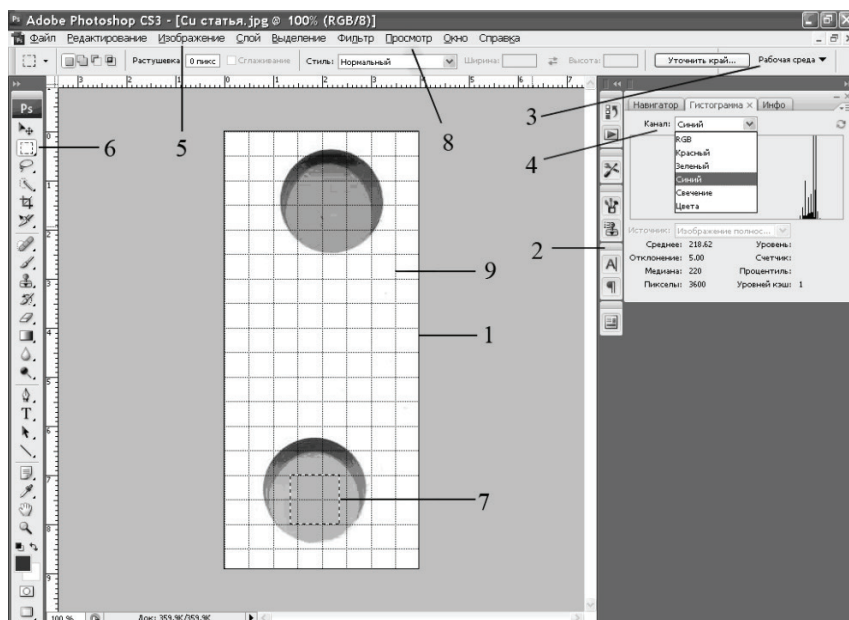


Рис. 2. Інтерфейс графічного редактора Adobe Photoshop CS3 із відсканованим зображенням кювет, що містять розчини CuSO_4 різної концентрації.

1 – робоча область; 2 – плаваюча палітра; 3 – випадаюче меню включення палітр; 4 – випадаюче меню списку каналів; 5 – випадаюче меню вибору колірної моделі; 6 – інструменти виділення; 7 – виділена область; 8 – випадаюче меню зображення сітки; 9 – сітка.

Fig. 2. Adobe Photoshop CS3 graphic editor interface with a scanned image of cuvettes containing CuSO_4 solutions of different concentrations.

1 – working area; 2 – floating palette; 3 – drop-down menu for enabling palettes; 4 – drop-down menu of the list of channels; 5 – drop-down menu for choosing a color model; 6 – selection tools; 7 – selected area; 8 – drop-down menu of the grid image; 9 – grid.

У цій палітрі відображаються дані про колір, координати і розміри окремих точок (пікселів) або виділених областей зображення. Таких плаваючих палітр декілька і їх можна включити – виключити у випадяючому меню «Робоче середовище» (3) вибравши режим «Робоче середовище за замовчуванням». Для настройки зовнішнього виду палітри служать команди, які викликаються за допомогою управляючої кнопки трикутного виду.

Основну інформацію про зображення отримують зчитуванням значень рядків Середнє, Відхилення, Медіана і Пікселі, розташованих у вкладці Гістограма. Ці значення міняються, в залежності від того, який канал обраний у випадяючому меню (4). У свою чергу, назви каналів також змінюються, в залежності від обраної колірної моделі. За замовчуванням, при кожному відкритті програми, назви каналів відображаються в колірній моделі RGB. Для вибору іншої колірної моделі (СМΥК, Lab і т.д.) використовують меню, що випадає Зображення (5) → Режим. Список каналів починається з композитного, де свій внесок в тоновий розподіл вносять всі колірні канали. Його назва збігається з ім'ям колірної моделі. Потім слідує список основних каналів обраної колірної моделі, для кожного з яких зчитують значення в рядку «Середнє». У ньому вказується середньозважений рівень яскравості пікселів зображення, яке виходить шляхом множення кожного рівня яскравості на число пікселів даного рівня, а потім ділиться на загальне число рівнів яскравості. Чим вище середньозважене значення, тим вище світлота зображення. У рядку «Відхилення» вказується статистичне (середньоквадратичне) відхилення рівнів тонів. Чим більше відхилення, тим вище контрастність знімка.

Сказане вище стосується до всієї робочої області (1) в цілому. Нас же цікавлять колірні характеристики кольорової плями, залишеної кюветою з її вмістом. Тому на поверхні плями необхідно виділити певну область і тоді підсумовування рівнів пікселів буде здійснюватися тільки в межах цієї області. Для виділення частини зображення використовують інструмент «Область» (6), розташований у верхній частині панелі інструментів (8). Виділена область відображається на екрані у вигляді рамки з «маршу мурашок» (9). Цю рамку можна переміщати в будь-яке місце робочої поверхні, навівши на неї курсор і утримуючи лівою кнопкою миші.

Зазвичай виділяють овальну область [16, 17, 19], але це не дуже зручно, коли необхідно виділяти площі однакового розміру. Ми рекомендуємо прямокутне виділення, використовуючи додатково команду «Сітка», яка дозволяє виділяти ділянки заданої площі і точно розміщувати їх на робочій області. Команда «Показати сітку» міститься в меню «Перегляд» (10) і при її включенні відображає над зображенням цілу сітку направляючих (11). Команда «Прив'язати до сітки» дозволяє при виділенні квадратної області зробити так, щоб контур виділення проходив по лініях сітки, як ніби притягнутий до них магнітом. Це дозволяє будувати квадрати однакової площі, значення якої можна контролювати на панелі (2) в рядку Пікселі.

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ЧАСТИНА

Як модельні в роботі використовували розчини солей $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ з концентраціями 46, 60 і 63 г/л, відповідно. Ці розчини використовув-

ють у Державній фармакопеї України в якості вихідних для отримання еталонів кольоровості [31]. Їх спектри поглинання перекривають майже весь видимий інтервал довжин хвиль, тому вони зручні для тестування. Прийоми сканування поверхні тривимірних об'єктів відпрацьовували на комерційних таблетках лікарських препаратів різних виробників.

Спектри поглинання розчинів реєстрували на спектрофотометрі Lambda 9 PerkinElmer. Спектри дифузного відбиття порошків записували на тому ж приладі з використанням скануючої сфери B013-9941. У роботі використовували сканер HP scanjet 2200с. Сканували в програмі HP PrecisionScan LTX 1.2. Роздільна здатність, чіткість зображення – висока, максимальна глибина пікселя, зниження шуму – включено, час світіння лампи – збільшено, глибина кольору – 16 біт. Рівень темного – 0, світлого – 255 Од. Перевірка передачі кольору сканера проводилася щодо відповідності результату сканування еталонних зразків білого, червоного і чорного кольорів ($R = 255, G = 255, B = 255$), ($R = 255, G = 0, B = 0$), ($R = 0, G = 0, B = 0$) відповідно. Помилка вимірювання кольору $\epsilon, \%$: 0,00, 0,12, 0,04 відповідно. Для отримання колориметричних параметрів використовували програму Adobe Photoshop CS3.

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 3 наведені концентраційні залежності колориметричних параметрів розчинів FeCl_3 (а), CoCl_2 (б) і CuSO_4 (в) різних концентрацій, представлених в кольірній системі RGB. Видно, що із збільшенням концентрації розчину, що супроводжується зростанням оптичної густини, спостерігається зменшення світлоти деяких каналів, викликане зменшенням частки білого в кольорі розчину. У кольірній системі RGB до найбільш сильної зміни схильні канали, які є доповнюючими (субстративними) до кольору розчину: канал В для FeCl_3 , канал Г для CoCl_2 , канал R для CuSO_4 , а в системі CMYK канали, що збігаються (атракативні) з кольором розчину: жовтий, пурпурний, блакитний для FeCl_3 , CoCl_2 і CuSO_4 відповідно. Для кольірної системи Cielab зміни інтенсивності каналів (а) і (б) не настільки значні, а для каналу «світлота» спостерігається істотний розкид результатів. Залежність інтенсивності каналу – концентрація розчину має експонентний характер і в разі каналів G (RGB) і пурпурний (CMYK) описується спадаючою експонентою першого порядку:

$$Y = A \cdot e^{-C},$$

де A , θ – параметри регресійного рівняння, що описують розташування і форму кривої, Y – інтенсивність сигналу, що змінюється в інтервалі від 0 до 255, C – концентрація розчину, мг/мл.

Експонентні залежності в координатах інтенсивність каналу – концентрація розчину переводили в лінійні:

$$(\ln Y - \ln A) / t = C.$$

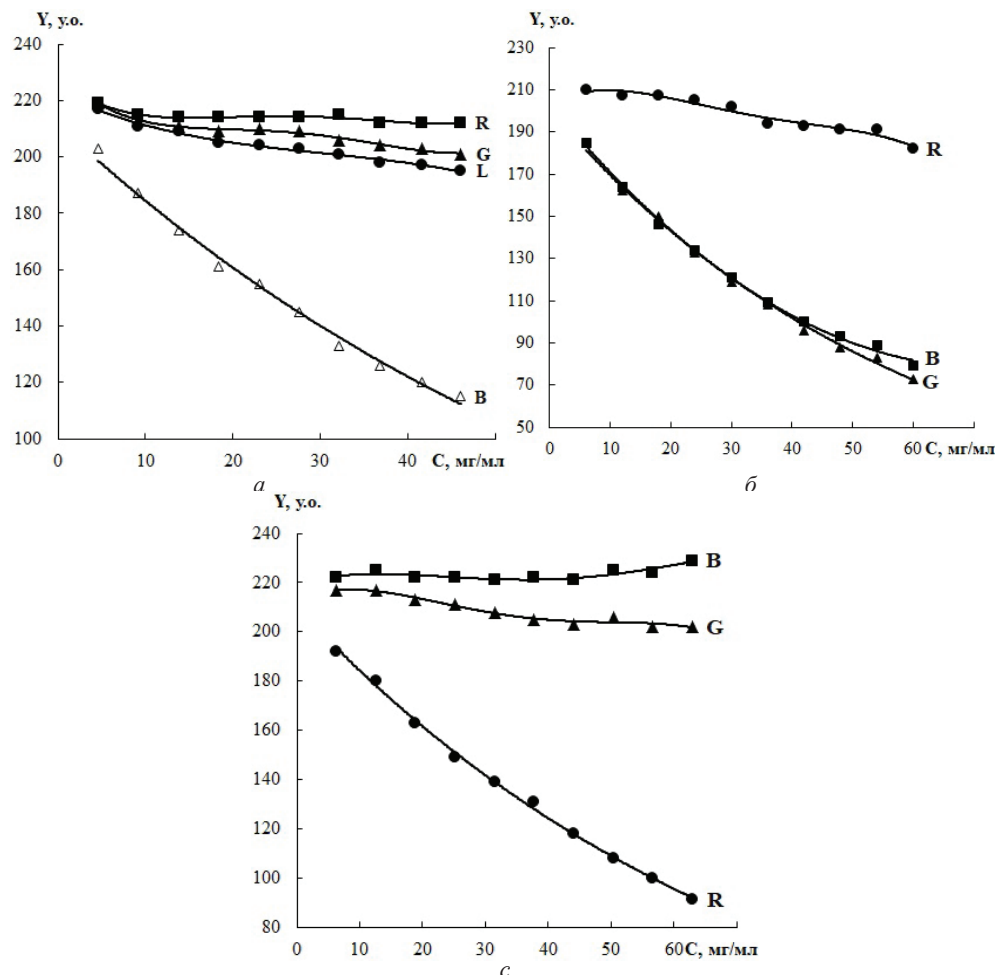


Рис. 3. Кольориметричні параметри розчинів FeCl₃ (а), CoCl₂ (б) і CuSO₄ (в) у системі RGB.

Fig. 3. Colorimetric parameters of FeCl₃ (a), CoCl₂ (b) and CuSO₄ (c) solutions in the RGB system.

Межі виявлення розраховували за формулою $C_{\min} = 3s_{\text{контр}}/\text{tga}$, де $\text{tga} = 1/t$, де $s_{\text{контр}}$ – стандартне відхилення величини $\ln(A/Y)$ для контрольного досліджу.

Порівняння метрологічних характеристик вказує на те, що за допомогою сканеру і цифрової обробки зображень можна визначати концентрацію розчину хлориду кобальту (в зазначеному інтервалі концентрацій) з такою ж точністю, як і за допомогою фотометрії. Дані наведені в таблиці, а зіставлення з фотометричними даними наведено на рис. 4.

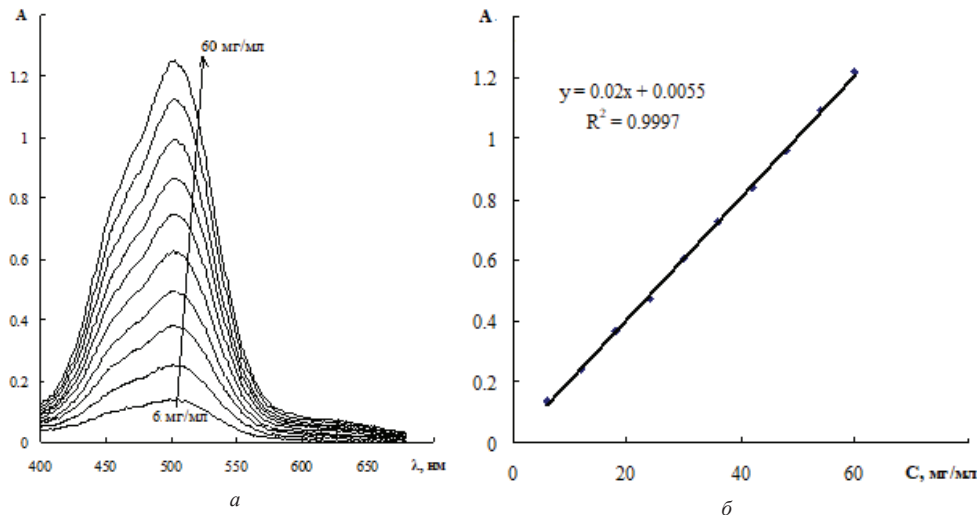


Рис. 4. Спектри поглинання водних розчинів CoCl_2 різної концентрації (а) і градувальний графік при $\lambda=510$ нм (б). $C_{\text{CoCl}_2} = 6\text{--}60$ мг/мл; $l = 1$ см.

Fig. 4. Absorption spectra of aqueous CoCl_2 solutions of different concentrations (a) and graduation graph at $\lambda=510$ nm (b). $C_{\text{CoCl}_2} = 6\text{--}60$ mg/ml; $l = 1$ cm.

Таблиця

Рівняння апроксимуючих кривих для кольорних каналів розчинів

Table

Equations of approximating curves for color channels of solutions

Розчин, що аналізується	Колірний канал (колірна система)	Рівняння апроксимуючої кривої	R^2
$\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	B(RGB) Жовтий (CMYK)	$Y=211.69e^{-0.0138C}$	0.9937
		$(\ln Y - \ln 211.69)/-0.0138 = 0.998C - 0.0007$	0.9937
		$-\lg Y/255 = 0.0006C + 0.0808$	0.9937
		$Y=213.29e^{-0.0184C}$	0.9936
$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	G(RGB) Пурпурний (CMYK)	$Y=200.71e^{-0.017C}$	0.9966
		$Y=207.35e^{-0.0244C}$	0.977
$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	R (RGB) Блакитний(CMYK)	$Y=210.13e^{-0.0131C}$	0.9981
		$Y=197.5e^{-0.0112C}$	0.9918

ВИСНОВКИ

Таким чином, отримання та аналіз цифрових зображень аналітів можна розглядати як недорогу заміну спектрофотометрії, цілком порівнянну з нею за точністю та правильністю визначень в певному інтервалі концентрацій. Впровадження цього прийому у навчальний процес допоможе краще зрозуміти принципи поглинання світла та кольорознавства. Метод можна зробити портативним для аналізу результатів у віддаленій місцевості за допомогою сканера, що живиться від генератора або акумуляторної батареї.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Иванов В.М., Кузнецова О.В.* Химическая цветометрия: возможности метода, области применения и перспективы // *Успехи химии.*— 2001.— Т. 70, № 5.— С. 411–428.
2. *Химченко С.В., Эспериандова Л.П.* Цветометрия в инструментальном и визуальном тест-анализе.— Москва: LAMBERTA, 2014.— 210 с.
3. *Чеботарев А.Н., Снугур Д.В., Бевзюк Е.В., Ефимова И.С.* Анализ тенденций развития метода химической цветометрии (Обзор) // *Методы и объекты химич. анализа.*— 2014.— Т. 9, № 1–2.— С. 4–11.
4. *Bosch E., Casassas E., Izquierdo A., Roses M.* Color Changes in Screened Indicators // *Anal. Chem.*— 1984.— Vol. 56, N8.— P. 1422–1428. <https://doi.org/10.1021/ac00272a049>
5. *Roses M.* Evaluation of colour changes indicators: the SPERCOLOR program // *Anal. Chim. Acta.*— 1988.— Vol. 204.— P. 311–322. [https://doi.org/10.1016/s0003-2670\(00\)86368-0](https://doi.org/10.1016/s0003-2670(00)86368-0)
6. *Морозко С.А., Кузнецова О.В., Иванов В.М.* Цветовые измерения при определении констант диссоциации аналитических органических реагентов // *Журн. аналит. химии.*— 1997.— Т. 52, № 11.— С. 1146–1151.
7. *Capitan-Vallvey L.F., Lopez-Ruiz N., Martinez-Olmos A., Eranas M.M., Palma A.J.* Recent Developments in Computer Vision-Based Analytical Chemistry: A Tutorial Review // *Anal. Chim. Acta.*— 2015.— Vol. 899.— P. 23–34. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.10.009>
8. *Аяри В.В., Горбунова М.В., Исаченко А.И., Дмитриенко С.Г., Золотов Ю.А.* Использование бытовых цветорегистрирующих устройств в количественном химическом анализе // *Журн. аналит. химии.*— 2017.— Т. 72, № 11.— С. 963–977.
9. *Аяри В.В., Дмитриенко С.Г.* Применение цифрового фотоаппарата и компьютерной обработки данных для определения органических веществ с использованием диазотированного пенополиуретана // *Журн. аналит. химии.*— 2008.— Т. 63, № 6.— С. 581–588.
10. *Буданцев А.Ю.* Фотометрическое определение веществ в бумажных матрицах с использованием цифровой регистрации изображений в проходящем свете // *Журн. аналит. химии.*— 2004.— Т. 59, № 8.— С. 791–795.
11. *Gaiao E.N., Martins V.L., Lyra W.S., Almeida L.F., Silva E.C., Araujo M.C.U.* Digital image-based titrations // *Anal. Chim. Acta.*— 2006.— Vol. 570.— P. 283–290. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.04.048>
12. *Aghanouri A., Amirshahi S.H., Agahian F.* Estimation of the Concentration of Dyes in Clear Solutions Using a Digital Camera // *Anal. Sci.*— 2010.— Vol. 26.— P. 101–106. <https://doi.org/10.2116/analsci.26.101>
13. *Герасимов А.В.* Качественная и количественная интерпретация тонкослойных хроматограмм синтетических пищевых красителей в условиях неполного разделения // *Журн. аналит. химии.*— 2000.— Т. 55, № 12.— С. 1292–1297.
14. *Kompany-Zareh M., Mansourian M., Ravae F.* Simple method for colorimetric spot-test quantitative analysis of Fe(III) using a computer controlled hand-scanner // *Anal. Chim. Acta.*— 2002.— Vol. 471, N1.— P. 97–104. [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(02\)00871-1](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(02)00871-1)
15. *Герасимов А.В.* Применение цветной компьютерной обработки хроматограмм при ТСХ-анализе тартразина // *Журн. аналит. химии.*— 2003.— Т. 58, № 3.— С. 241–243.
16. *Малявина В.В.* Применение программных средств визуализации и обработки данных ТСХ-анализа при производстве фосфолипидных продуктов // *Фармация.*— 2003.— № 2.— С. 26–30.
17. *Гаврилов А.М., Залужина И.В., Конева Л.А., Бахарев В.П., Петров А.Ю.* Экспресс метод оценки цвета таблеток // *Хим.-фарм. журн.*— 2003.— Т. 37, № 5.— С. 54–56.
18. *Герасимов А.В.* Применение программной обработки сканированных изображений хроматограмм в количественной планарной хроматографии // *Журн. аналит. химии.*— 2004.— Т. 59, № 4.— С. 392–397.
19. *Шишкин Ю.Л., Дмитриенко С.Г., Медведева О.М., Бадакова С.А., Пяткова Л.Н.* Применение сканера и компьютерных программ цифровой обработки изображений для количественного определения сорбированных веществ // *Журн. аналит. химии.*— 2004.— Т. 59, № 2.— С. 119–124.
20. *Дмитриенко С.Г., Аяри В.В., Свиридова О.А., Бадакова С.А., Золотов Ю.А.* Использование реакций диазотирования и азосочетания с участием пенополиуретана для определения нитрит-ионов с помощью спектроскопии диффузного отражения и цветометрических сканер-технологий // *Вестн. МГУ. Сер. Химия.*— 2004.— Т. 45, № 2.— С. 131–138.
21. *Маслова Н.В., Коренман Я.И., Суханов П.Т., Хрипушин В.В.* Экстракционно-цветометрическое определение ванилинов в водных средах // *Аналитика и контроль.*— 2011.— Т. 15, № 2.— С. 233–237.
22. *Аяри В.В., Дмитриенко С.Г., Золотов Ю.А.* Аналитические возможности цифровых цветометрических технологий. определение нитрит-ионов с использованием пенополиуретана // *Вестн. МГУ. Сер. Химия.*— 2011.— Т. 52, № 1.— С. 36–42.

23. Khoma R.E., Ennan A.A.-A., Bienkovska T.S., Dlubovskii R.M., Vodzinskii S.V., Mykhailova T.V. The impregnated fibrous chemisorbents for colorimetric detection of the sulfur dioxide. // Укр. хім. журн. – 2022. – Т. 87, № 1. – С. 35–48. <https://doi.org/10.33609/2708-129X.88.01.2022.35-48>
24. Femat-Diaz A., Vargas-Vazquez D., Huerta-Manzanilla E., Rico-Garcia E., Herrera-Ruiz G. Scanner image methodology (SIM) to measure dimensions of leaves for agronomical applications // African J. Biotech. – 2011. – Vol. 10, N10. – P. 1840–1847. <https://doi.org/10.5897/AJB10.2293>
25. Jansen S., Kriegesmann B., Brenig B. Emulation of an ELISA Reader and Quantitative Image Analysis Using the Computer Program Digital-OD // BioTech. – 1988. – Vol. 24, N6. – P. 998–1001. <https://doi.org/10.2144/98246bc02>
26. Vellemann S.G. Quantifying immunoblots with a digital scanner // BioTech. – 1995. – Vol. 18, N6. – P. 1056–1058.
27. Shea T.B. An inexpensive densitometric analysis system using a Macintosh(TM) computer and a desktop scanner // BioTech. – 1994. – Vol. 16, N6. – P. 1126–1128.
28. Tarquini S., Armienti P. Quick determination of crystal size distributions of rocks by means of a color scanner // Image Anal. Stereol. – 2003. – Vol. 22, N1. – P. 27–34. <https://doi.org/10.5566/ias.v22.p27-34>
29. Пешкова В.М., Громова М.И. Практическое руководство по спектрофотометрии и колориметрии. – М.: МГУ, 1965. – С. 122.
30. Патент України на корисну модель UA100092, МПК C09J 7/00. Плівкова кювета для реєстрації оптичних характеристик порошкоподібних зразків. Желтвай О.І., Желтвай І.І. – № u201500145; заявл. 12.01.2015, опубл. 10.07.2015, бюл. № 13.
31. Державна Фармакопея України / Державне підприємство «Науково-експертний центр» – 1-ше вид. – Харків: PIPEГ, 2001. – Доп. 1. – 2004. – 520 с.

Стаття надійшла до редакції 23.06.2022

I. I. Zheltvay¹, E. V. Timukhin¹, R. E. Khoma^{2,3}, S. V. Vodzinskii^{2,3}

¹A.V.Bogatsky Physico-Chemical Institute of NAS of Ukraine, 86 Lustdorfka Doroga Str., 65080, Odessa, Ukraine email: zselvay@i.ua

²I. I. Mechnikov Odessa National University, 2, Dvoryanska Str., 65026, Odessa, Ukraine,

³Physico-Chemical Institute for the Protection of the Environment and Human of MES of Ukraine and NAS of Ukraine, st. Preobrazhenskaya 3, Odessa, 65082, Ukraine

OFFICE SCANNER USE FOR OBTAINING ANALYSIS OBJECTS DIGITAL IMAGES AND THEIR COLOR CHARACTERISTICS COMPUTER DETERMINATION

Recently, the practice of analytical chemistry has included the method of chemical chromaticity, based on the measurement of the integral characteristics of the color reflected from the surface of the analyte and which makes it possible to distinguish between spectrally close substances. With the spread scanners and computer programs for color image processing, a fast and objective method for assessing the color characteristics of colored samples has appeared, opening up the prospect of using chemical chromaticity in the chemical analysis of various objects in the absence of special spectrophotometric equipment or with minimal use of it. Thus, the process of chemical chromaticity analysis is divided into two parts: obtaining a high-quality digital image of the analyzed object and processing the resulting file in a graphics editor.

The article describes in detail the methodological issues of scanning solutions, powders, surfaces of dosage forms using an office scanner and processing the resulting digital images in a graphics editor. On the example of model samples, standard solutions of salts $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, it is shown that in the range of 6–60 g/l their concentrations can be determined with sufficient accuracy as with using its absorption spectra (registered on a Lambda 9 PerkinElmer spectrophotometer) or spectra of diffuse reflection (on the same instrument using a scanning sphere B013–9941), and when using an desktop scanner HP scanjet 2200c with HP PrecisionScan LTX 1.2 software, followed by digital processing of

the scan in Photoshop CS3. Acquisition and analysis of digital images of analytes can be considered as an inexpensive replacement for spectrophotometry in a certain interval of concentrations, comparable with it in terms of accuracy and reliability of determinations. The introduction of this technique into the educational process makes it possible to increase the efficiency of teaching students when mastering the skills of converting color characteristics into optical density values and to better understand the principles of the science of color and light absorption. The method can be made mobile for analysis of results in remote areas using a portable scanner powered by battery.

Keywords: hand-scanner, digital images, colourimetric detection

REFERENCES

1. Ivanov V.M., Kuznetsova O.V. *Chemical chromaticity: potential of the method, application areas and future prospects*. Russ. Chem. Rev., 2001, vol. 70, no 5, pp. 411–428. <https://doi.org/10.1070/RC2001v070n05ABEH000636>
2. Khimenko S.V., Eksperiandova L.P. *Colorimetry in instrumental and visual test analysis*. Moscow, Lambertap, 2014, 210 p. (in Russian)
3. Chebotarev A.N., Snigur D.V., Bevzuk K.V., Efimova I.S. *The trends analysis of chemical chromaticity method evolution*. Methods Objects Chem. Anal., 2014, vol. 9, no 1–2, pp. 4–11. (in Russian)
4. Bosch E., Casassas E., Izquierdo A., Roses M. *Color Changes in Screened Indicators*. Anal. Chem., 1984, vol. 56, no 8, pp. 1422–1428. <https://doi.org/10.1021/ac00272a049>
5. Roses M. *Evaluation of colour changes indicators: the SPERCOLOR program*. Anal. Chim. Acta., 1988, vol. 204, pp. 311–322. [https://doi.org/10.1016/s0003-2670\(00\)86368-0](https://doi.org/10.1016/s0003-2670(00)86368-0)
6. Morozko S.A., Kuznetsova O.V., Ivanova V.M. *Color measurements in the determination of analytical organic reagents dissociation constants*. J. Anal. Chem., 1997, vol. 52, no 11, pp. 1146–1151. (in Russian)
7. Capitan-Vallvey L.F., Lopez-Ruiz N., Martinez-Olmos A., Eranas M.M., Palma A.J. *Recent Developments in Computer Vision-Based Analytical Chemistry: A Tutorial Review*. Anal. Chim. Acta., 2015, vol. 899, pp. 23–34. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.10.009>
8. Apyari V.V., Gorbunova M.V., Isachenko A.I., Dmitrienko S.G., Zolotov Yu.A. *Use of household color-recording devices in quantitative chemical analysis*. J. Anal. Chem., 2017, vol. 72, no 11, pp. 1127–1137. <https://doi.org/10.1134/S106193481711003X>
9. Apyari V.V., Dmitrienko S.G. *Using a digital camera and computer data processing for the determination of organic substances with diazotized polyurethane foams*. J. Anal. Chem., 2008, vol. 63, no 6, pp. 530–537. <https://doi.org/10.1134/S1061934808060038>
10. Budantsev A. Yu. *Photometric Determination of Compounds in Paper Matrices Using Digital Imaging Technique and Transmitted Light Images*. J. Anal. Chem., 2004, vol. 59, no 8, pp. 703–707.
11. Gaiao E.N., Martins V.L., Lyra W.S., Almeida L.F., Silva E.C., Araujo M.C.U. *Digital image-based titrations*. Anal. Chim. Acta., 2006, vol. 570, pp. 283–290. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2006.04.048>
12. Aghanouri A., Amirshahi S.H., Agahian F. *Estimation of the Concentration of Dyes in Clear Solutions Using a Digital Camera*. Anal. Sci., 2010, vol. 26, pp. 101–106. <https://doi.org/10.2116/analsci.26.101>
13. Gerasimov A.V. *Qualitative and Quantitative Treatment of Thin-Layer Chromatograms of Incompletely Separated Synthetic Food Colors*. J. Anal. Chem., 2000, vol. 55, no 12, pp. 1161–1165. <https://doi.org/10.1023/A:1026615120365>
14. Kompany-Zareh M., Mansourian M., Ravaee F. *Simple method for colorimetric spot-test quantitative analysis of Fe(III) using a computer controlled hand-scanner*. Anal. Chim. Acta., 2002, vol. 471, no 1, pp. 97–104. [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(02\)00871-1](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(02)00871-1)
15. Gerasimov A.V. *Use of Computer-Assisted Color Treatment of Chromatograms in the TLC Determination of Tartrazine*. J. Anal. Chem., 2003, vol. 58, no 3, pp. 241–243. <https://doi.org/10.1023/A:1022674101564>
16. Malyavina V.V. *Use of software for visualizing and processing the data of thin-layer chromatographic analysis in the production of phospholipid product*. Pharmacy, 2003, no 2, pp. 26–30. (in Russian)
17. Gavrilov A.S., Zalukina I.V., Koneva L.A., Bakharev V.P., Petrov A. Yu. *Rapid Evaluation of Tablet Color*. Pharm. Chem. J., 2003, vol. 37, no 5, pp. 273–276. <https://doi.org/10.1023/A:1025399026973>
18. Gerasimov A.V. *Use of the Software Processing of Scanned Chromatogram Images in Quantitative Planar Chromatography*. J. Anal. Chem., 2004, vol. 59, no 4, pp. 348–353. <https://doi.org/10.1023/B:JANC.0000022787.55169.9c>

19. Shishkin Y.L., Dmitrienko S.G., Medvedeva O.M., Badakova S.A., Pyatkova L.N. *Use of a Scanner and Digital Image-Processing Software for the Quantification of Adsorbed Substances* J. Anal. Chem., 2004, vol. 59, no 2, pp. 102–106. <https://doi.org/10.1023/B:JANC.0000014733.32082.4b>
20. Dmitrienko S.G., Apyari V.V., Sviridova O.A., Badakova S.A., Zolotov Yu.A. *On the new approach to the theory of preferential wetting of heterogeneous solid surfaces*. Moscow University Chem. Bull., 2004, vol. 45, no 2, pp. 131–138. (in Russian)
21. Maslova N.V., Korenman Y.I., Sukhanov P.T., Hripushin V.V. *Extraction-colorimetric determination of vanillins in aqueous solution*. Analityka i kontrol, 2011, vol. 15, no 2, pp. 233–237. (in Russian)
22. Apyari V.V., Dmitrienko S.G., Zolotov Yu.A. *Analytical possibilities of digital colorimetry determination of nitrite using polyurethane foam*. Moscow University Chem. Bull., 2011, vol. 52, no 1, pp. 36–42. (in Russian)
23. Khoma R.E., Ennan A.A.-A., Bienkovska T.S., Dlubovskii R.M., Vodzinskii S.V., Mykhailova T.V. *The impregnated fibrous chemisorbents for colorimetric detection of the sulfur dioxide*. Ukr. Chem. J., 2022, vol. 87, no 1, pp. 35–48. <https://doi.org/10.33609/2708-129X.88.01.2022.35-48>
24. Femat-Diaz A., Vargas-Vazquez D., Huerta-Manzanilla E., Rico-Garcia E., Herrera-Ruiz G. *Scanner image methodology (SIM) to measure dimensions of leaves for agronomical applications*. African J. Biotech., 2011, vol. 10, no 10, pp. 1840–1847. <https://doi.org/10.5897/AJB10.2293>
25. Jansen S., Kriegesmann B., Brenig B. *Emulation of an ELISA Reader and Quantitative Image Analysis Using the Computer Program Digital-OD*. BioTech., 1988, vol. 24, no 6, pp. 998–1001. <https://doi.org/10.2144/98246bc02>
26. Velleman S.G. *Quantifying immunoblots with a digital scanner*. BioTech., 1995, vol. 18, no 6, pp. 1056–1058.
27. Shea T.B. *An inexpensive densitometric analysis system using a Macintosh(TM) computer and a desktop scanner*. BioTech. 1994, vol. 16, no 6, pp. 1126–1128.
28. Tarquini S., Armienti P. *Quick determination of crystal size distributions of rocks by means of a color scanner*. Image Anal. Stereol., 2003, vol. 22, no 1, pp. 27–34. <https://doi.org/10.5566/ias.v22.p27-34>
29. Peshkova V.M., Gromova M.I. *Practical guide on spectrometry and colorimetry*. Moscow, MGU, 1965, p. 122.
30. Zheltvay O.I., Zheltvay I.I. *Film trough to record optical specifications of the powdered sample*. Patent UA, no 100092, publ. 10.07.2015.
31. *State Pharmacopoeia of Ukraine*. State Enterprise «Ukrainian scientific Pharmacopoeial center», 1-st edd, iss. 2, Kharkiv, RIREG, 2004, 520 p.