

## Analýza UV/vis spekter pomocí singulárního rozkladu

Schopnost látek absorbovat světlo lze měřit pomocí UV/vis spektroskopie (ultraviolet/visible). Nejčastějším typem měření je tzv. titrace, kdy se do vzorku s jedním reaktantem o konstantní koncentraci postupně přidává reaktant druhý a sleduje se tvoření produktů; při každé koncentraci je změřeno UV/vis spektrum.

Naměřená titrační spektra jsou tedy lineární kombinací spekter všech reaktantů a produktů přítomných ve vzorku. Nabízí se otázka, jak zjistit počet různých produktů, jejich koncentrace a spektra (ne všechny přítomné látky je možné změřit izolovaně). K tomu slouží tzv. *singulární rozklad* matice  $A$ , jejíž sloupce jsou naměřená titrační spektra (viz **obr.**). Matice vzniklé z rozkladu  $A$ , čili  $U$ ,  $S$  a  $V$ , dokáží odlišit signál od šumu (viz barevné, resp. šedé složky na obr.) a poskytnou tím informaci o počtu absorbujících složek ve vzorku.

Sloupce  $U$  a  $V$ , které obsahují signál, lze lineární transformací převést na spektra jednotlivých absorbujících složek (tj. reaktantů a produktů). K tomu je obecně zapotřebí reakční model, který nemusí být známý. Existuje však možnost zrekonstruovat spektra absorbujících složek a jejich koncentrace i bez použití reakčního modelu. Právě tento přístup bude hlavní náplní studentského projektu.

**Cílem** tohoto projektu je prozkoumat možnosti analýzy UV/vis spekter pomocí singulárního rozkladu bez použití reakčního modelu. Student se seznámí s analýzou UV/vis spekter, základy tvorby modelů chemických reakcí a s použitím singulárního rozkladu, který má široké možnosti využití i v jiných oblastech (např. ve statistice nebo ve strojovém učení).

**Projekt bude zahrnovat především práci na počítači, popř. analytické výpočty a studium vědecké literatury.**

**Vedoucí projektu:** Václav Březina, Ph.D., e-mail: [vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz](mailto:vaclav.brezina@matfyz.cuni.cz)

**Pracoviště:** Katedra makromolekulární fyziky

**obr.** singulární rozklad UV/vis spekter (jsou přítomny dvě absorbující složky)

$$A = U S V^T$$