

**Каменський А.О.**

Черкаський державний технологічний університет

## РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ВЕБ-ДОДАТКУ ДЛЯ АНАЛІЗУ РЕЗУЛЬТАТІВ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ЕЛЕКТРОННО-КАТАЛІТИЧНОЇ КОНВЕРСІЇ ВУГЛЕКИСЛОГО ГАЗУ

*Застосування комп'ютерних технологій в сучасних дослідженнях хімічної галузі є надзвичайно актуальним і необхідним процесом. На сьогодні існують комп'ютерні програми, які здатні обробляти результати експериментів, створювати графічні залежності та аналізувати одержану інформацію. Однак є ряд досліджень, в яких доцільно використовувати програми, написані безпосередньо для аналізу даних, отриманих в результаті певних експериментальних розробок.*

*В даній статті розроблено веб-додаток, який створено для опрацювання результатів досліджень електронно-каталітичної конверсії вуглекислого газу в органічні сполуки, отриманих після аналізу на спектрофотометрі, у вигляді графічних залежностей та Excel таблиць. Оскільки дослідження з утилізації діоксиду вуглецю проводились за різних умов і параметрів, великий обсяг одержаних даних потребував комп'ютерної обробки. При створенні веб-додатку зроблено теоретичний огляд існуючого програмного забезпечення, яке застосовується в хімічній галузі.*

*Для написання програми було обрано мову JavaScript, як одну з сучасних, динамічних, прототипних та об'єктно-орієнтованих мов програмування, що застосовується при розробці веб-сторінок. Для оптимізації роботи інтерфейсу програми, гнучкості коду та подальшому розширенні функціональності додатку використано фреймворк Vue. Візуалізацію даних створено за допомоги мов програмування HTML5 та CSS3. При роботі з Excel таблицями підключено бібліотеку Sheet.js.*

*Створений веб-додаток дає можливість швидко опрацьовувати великі обсяги результатів, що отримані при спектрофотометричному аналізі проб синтезованих речовин, відфільтровувати дані, розраховувати концентрації речовин. Програму може бути застосовано не тільки для визначення метанолу та формальдегіду, але і для інших органічних речовин, що синтезовані в пробах. Комп'ютерна обробка експериментальних даних є необхідною складовою досліджень конверсії вуглекислого газу плазмо-каталітичним методом з використанням бар'єрного розряду.*

**Ключові слова:** веб-додаток, Excel таблиці, електронно-каталітична конверсія, спектрофотометр, комп'ютер, вуглекислий газ, програмне забезпечення, JavaScript.

**Постановка проблеми.** Сучасні наукові дослідження, в основних своїх рисах, суттєво відрізняються від тих, якими були нещодавно. Вони набувають нових форм, засобів реалізації, мають більш чітку та уніфіковану структуру. І тут значну роль відіграють в дослідницькій роботі новітні інформаційні технології. Застосування комп'ютерної техніки, програмного забезпечення надзвичайно оптимізують як теоретичну частину досліджень, так і практичну обробку результатів. На сьогодні експериментальна робота, значною мірою, орієнтована на використання комп'ютера та Інтернету для опрацювання сучасних методів, методик та технологій виконання експерименту.

В експериментальних розробках, які проводяться в хімічній галузі, застосування комп'ютерних програм значно полегшують пошук інформації, моделювання експерименту, роботу з обчисленням результатів, зберігання

даних та їх аналіз. І, не зважаючи на різноманіття програмного забезпечення, часто існує потреба в написанні програми під певні вузьконаправлені дослідження.

Проблематика роботи – впровадження веб-додатку для комп'ютерної обробки результатів, отриманих при експериментальних дослідженнях електронно-каталітичної конверсії діоксиду вуглецю в продукти органічного синтезу (метанол і формальдегід) [1, с. 73]. Для аналізу проб застосовувався прилад спектрофотометр, дані з якого виводились у вигляді Excel таблиць, що мали великий об'єм інформації, яка потребувала фільтрації та додаткового математичного обрахунку для визначення концентрації синтезованих речовин. Так як математичне обчислення даних займало багато часу і місця, постала необхідність у створенні відповідного веб-додатку для відфільтрування, обрахунку і оптимізації даних.

Об'єктом дослідження є застосування програмного забезпечення для аналізу результатів експериментів в хімічній технології.

Предметом дослідження є розробка веб-додатку для обробки даних отриманих після спектрофотометричного аналізу проб на вміст метанолу та формальдегіду при електронно – каталітичній конверсії вуглекислого газу.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** На сьогодні існує достатньо великий спектр програмного забезпечення, що використовується в хімії та хімічному аналізі. Широкий огляд матеріалу надано в конспекті лекцій «Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії» під редакцією С.О. Коновалової. В ньому розглядаються комп'ютерні програми для створення хімічних формул, трьохмірної візуалізації молекул та відтворення органічних та неорганічних речовин: ChemOffice (ChemDraw, Chem3D, ChemFinder) ChemWindow, ACD/ChemSketch Free-ware for personal or academic use, ChemSketch, MarvinSketch і т.д.. Окрему увагу автор приділяє базам даних та хімічним каталогам, які користувач може знайти в Інтернеті у вільному доступі: PubChem, ChemSpider, NIST Chemistry WebBook, Organic Syntheses, Merck та інші [2]. В науковому посібнику авторів Винник О.Ф., Свечнікова О.М., Грановська Т.Я. детально аналізується програмне забезпечення ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0, основне призначення якого – моделювання структур молекул та визначення їх параметрів, написання формул різних органічних сполук, розглядаються рівняння реакцій та їх механізми [3]. В хімічних дослідженнях важливу роль мають не тільки результати експериментів, а й аналіз даних, які були отримані. Нині існує багато програм для наукових розрахунків та статистичного аналізу даних, які є необхідними для розробників, експериментаторів, наукових співробітників, що передбачає роботу з масивами інформації, розрахунками [4; 5]. Серед яких можна відмітити такі програми як Minitab, StatSoft(Statistica), Comsol, Microsoft Excel та багато інших. Безпосередньо, в хімічній галузі, розроблено програмне забезпечення, що може забезпечувати роботу лабораторій аналітичного та науково-технічного характеру, а саме: збір та обробку даних, передачу результатів від всіх типів приладів (лабораторні ваги, іономери, титратори, аналізатори (AAS, ICP), хроматографи, спектрофотометричні інструменти (УФ, ІЧ), а також від будь-яких інших приладів в лабораторії), управління всіма видами хроматографів, ведення електронних журналів. Як приклад, можна відмітити програми: LogiLabPRO, Kalabie, Openlab ECM, Openlab ICM, Openlab Intelligence Reporter (OLIR) [6].

**Постановка завдання.** Метою роботи є створення комп'ютерного додатку для обрахунку результатів досліджень за темою наукової роботи «Електронно-каталітична конверсія вуглекислого газу в продукти органічного синтезу» при обробці результатів спектрофотометричним методом аналізу.

**Виклад основного матеріалу.** Експериментальна робота пов'язана з такою глобальною проблемою як боротьба з парниковим ефектом, який зумовлений рекордно високим рівнем концентрації вуглекислого газу в атмосфері Землі, що сприяє глобальному потеплінню та більш частим екстремальним погодним явищам [7]. Способів утилізації та переробки CO<sub>2</sub> існує досить багато (звичайне термічне перетворення вуглекислого газу, сонячна термохімічна конверсія, фотохімічне перетворення, біохімічна конверсія, електрохімічне перетворення, плазмова технологія перетворення вуглекислого газу і т.д.) і кожен з них може бути використаний, в залежності від поставленої мети [8, с. 82]. Дана стаття базується на дослідженнях конверсії вуглекислого газу із застосуванням плазмо-каталітичної технології при використанні бар'єрного розряду. Плазмова технологія для переробки вуглекислого газу є сучасним і перспективним напрямом досліджень [9]. Аспект хімічної частини (переваги методу, фізико-хімічні основи) дослідження описується в статті [1]. На сьогодні розроблена методика, технологічна схема лабораторної установки, отримані позитивні результати при різних параметрах процесу конверсії оксидів вуглецю в органічні сполуки методом плазмового каталізу з використанням бар'єрного розряду [1]. Визначення наявності метанолу та формальдегіду в дослідних зразках проводився спектрофотометричним методом аналізу. В сучасних хімічних дослідженнях спектрофотометрію широко використовують для аналізу органічних і неорганічних речовин, якісного і кількісного визначення різних речовин, для контролю за протіканням технологічних процесів [10]. Варіювання технологічними параметрами, застосування різних каталізаторів при експериментальних дослідженнях – все це створило велику кількість результатів, які виводились у вигляді Excel таблиць після аналізу на спектрофотометрі UV-5800PC (рис. 1).

Опрацювання таблиць і подальший розрахунок проводився вручну, математично, що і послугувало необхідністю в створенні комп'ютерного веб-додатку для оптимізації часу обчислень, виключення помилок в аналізі результатів, фільтрації даних.

A	B	C	D	E	F	G	H
1387	207	0,154	0,2486	0,0919	0,0367	0,0538	0,323
1388	206,5	0,16	0,2578	0,0964	0,041	0,0576	0,3267
1389	206	0,16	0,2588	0,0964	0,0401	0,0586	0,327
1390	205,5	0,1665	0,2685	0,1021	0,0427	0,0623	0,3265
1391	205	0,1669	0,2681	0,1015	0,0435	0,062	0,3274
1392	204,5	0,1736	0,2793	0,1083	0,0464	0,0658	0,3304
1393	204	0,1726	0,2786	0,1074	0,045	0,0655	0,329
1394	203,5	0,179	0,2881	0,1122	0,0493	0,069	0,3318
1395	203	0,1781	0,288	0,1122	0,0482	0,0691	0,3312
1396	202,5	0,1831	0,2953	0,1147	0,0497	0,0719	0,331
1397	202	0,1835	0,2954	0,1152	0,0502	0,0709	0,3314
1398	201,5	0,1886	0,3032	0,1198	0,0526	0,0741	0,3334
1399	201	0,1886	0,3038	0,1197	0,0524	0,0734	0,3327
1400	200,5	0,1942	0,3096	0,1239	0,054	0,0762	0,3349
1401	200	0,1948	0,3098	0,1243	0,0544	0,0766	0,3346
1402	199,5	0,1994	0,3146	0,1252	0,0549	0,078	0,334
1403	199	0,2001	0,3151	0,1256	0,0556	0,0779	0,3342
1404	198,5	0,2013	0,3173	0,1277	0,056	0,0768	0,3332
1405	198	0,2016	0,3174	0,1275	0,0558	0,0778	0,3333
1406	197,5	0,2041	0,3185	0,1264	0,0533	0,0761	0,3304
1407	197	0,2038	0,3182	0,1265	0,0532	0,0765	0,3309
1408	196,5	0,208	0,3227	0,1291	0,0569	0,0771	0,3319
1409	196	0,2075	0,3221	0,129	0,056	0,0764	0,331
1410	195,5	0,2096	0,3196	0,126	0,0524	0,0726	0,3274
1411	195	0,2094	0,3201	0,126	0,0524	0,0737	0,328
1412	194,5	0,2105	0,319	0,1229	0,0493	0,0705	0,324
1413	194	0,2107	0,3193	0,1233	0,0495	0,0718	0,3246
1414	193,5	0,2128	0,3208	0,1247	0,049	0,0706	0,3187
1415	193	0,2138	0,3215	0,1254	0,0497	0,07	0,3188
1416	192,5	0,2194	0,3241	0,1227	0,0492	0,0696	0,318
1417	192	0,2194	0,3249	0,122	0,0492	0,0693	0,3177
1418	191,5	0,2232	0,3262	0,1209	0,0479	0,0686	0,3144
1419	191	0,222	0,3249	0,121	0,047	0,069	0,3142
1420	190,5	0,229	0,3238	0,1152	0,0428	0,0668	0,3056
1421	190	-0,1156	-0,0301	-0,2208	-0,2874	-0,2656	-0,0464

Рис. 1. Максимальні значення в кожній пробі Excel файлу

**Розрахунок концентрацій органічних речовин до впровадження веб-додатку (приклад).** В Excel таблиці колонка А відповідає за номер позиції, колонка В – довжина хвилі, в колонках С, D, E, F, G, H знаходяться проаналізовані результати проб. В кожній з цих колонок (С – Н) знаходимо максимальне значення (рис. 1). Для прикладу візьмемо максимальне значення з колонки С (D=0,229).

Далі, використовуючи графічну залежність оптичної густини метанолу (або формальдегіду) від довжини хвилі (рис. 2), (рис. 3), визначаємо максимальне значення оптичної густини еталонного розчину (метанолу, формальдегіду). Спектр поглинання еталонного розчину речовини знаходимо експериментально, вимірюючи оптичну густину при різних значеннях довжини хвилі.



Рис. 2. Спектр поглинання еталонного розчину метанолу

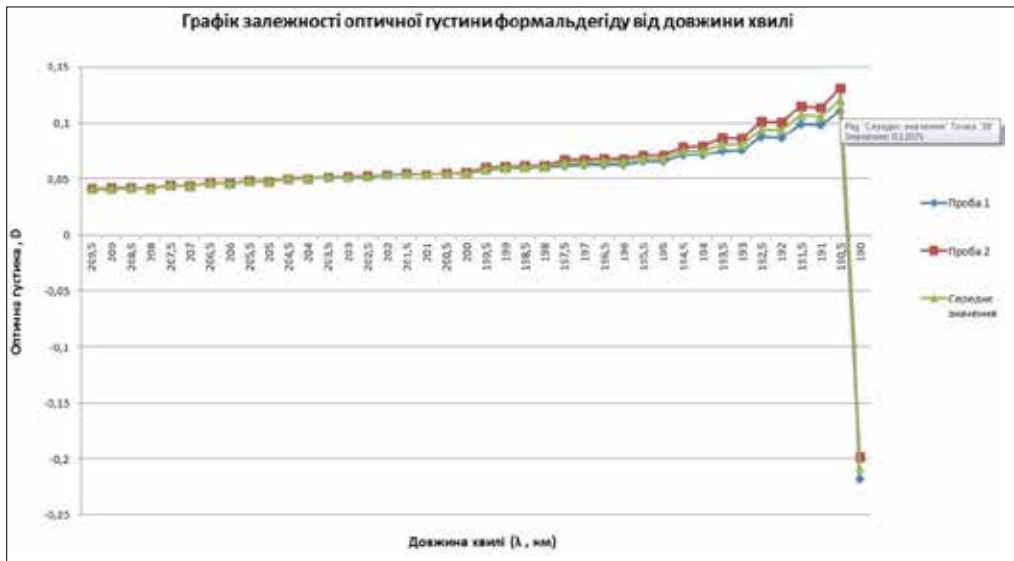


Рис. 3. Спектр поглинання еталонного розчину формальдегіду

Максимальне значення для оптичної густини еталонного розчину метанолу становить по графіку  $D_{ст} = 0,03355$ . Дане значення підставляємо в формулу (1) для обрахунку концентрації метанолу в аналізованих пробах.

Для визначення формальдегіду все проводиться аналогічно, використовуючи графік спектру поглинання еталонного розчину формальдегіду ( $D_{ст} = 0,12075$ ).

$$x = \frac{C_{em} \cdot D}{D_{em}}, \quad (1)$$

де  $C_{ст}$  – еталонна концентрація, г/дм<sup>3</sup>;

$D$  – оптична густина досліджуваної речовини аналізованої проби;

$D_{ст}$  – оптична густина для еталонного розчину.

Приймаємо:  $x$  – концентрація формальдегіду, г/дм<sup>3</sup>;

$y$  – концентрація метанолу, г/дм<sup>3</sup>.

Розрахунок концентрацій формальдегіду і метанолу в пробі, що аналізується:

$$x = \frac{0,1 \cdot 0,229}{0,12075} = 0,1896 \text{ г / дм}^3;$$

$$y = \frac{0,1 \cdot 0,229}{0,03355} = 0,6825 \text{ г / дм}^3;$$

**Вебдодаток.** Для створення веб-додатку була застосована мова JavaScript – динамічна, об’єктно-орієнтована прототипна мова програмування з використанням фреймворку Vue 3. Основні особливості цієї мови – гнучкість роботи з функціями та універсальність. JavaScript підтримується всіма сучасними браузерами, легко інтегрується з версткою (HTML) та дає змогу налаштувати комунікацію з сервером. Серед

переваг JavaScript можна відмітити: тип даних визначається, коли змінній або константі присвоюється значення; функції можна як виконувати, так і повертати, передавати їх як параметри іншим функціям і привласнювати як значення змінних. Методологія об’єктно-орієнтованого програмування дає змогу представити програму у вигляді сукупності об’єктів. Дозволяє частково перенести бізнес-логіку із сервера на сторону користувача, тобто виконувати код в браузері, що своєю чергою зменшує навантаження на сервери [11]. JavaScript має розвинену інфраструктуру, дає можливість працювати з великою кількістю бібліотек, фреймворків як React, Angular і Vue, декількома пакувальниками, як Webpack, Gulp, та допоміжними бібліотеками як Lodash, axios [11; 12].

Vue – це платформа JavaScript для створення інтерфейсів користувача. Він створений на основі стандартних HTML, CSS і JavaScript і забезпечує декларативну модель програмування на основі компонентів, допомагаючи ефективно розробляти інтерфейс користувача будь-якої складності [13]. Vue охоплює більшість загальних функцій, необхідних для розробки інтерфейсу. Однією з його переваг є гнучкість і поступова адаптивність до змін. Даний фреймворк можна використовувати для розширення статичного HTML, вбудовування як веб-компонента на будь-яку сторінку, створення односторінкового додатку (SPA), фулстек / додаток з рендерингом на стороні серверу (SSR), Jamstack / генерація статичного додатку (SSG), створення десктопних, мобільних, WebGL додатків і навіть додатків для терміналу [13].

```
chooseFile(event) {
  this.selectedFile = event.target.files[0];
},
```

Рис. 4. Функція вибору файлу

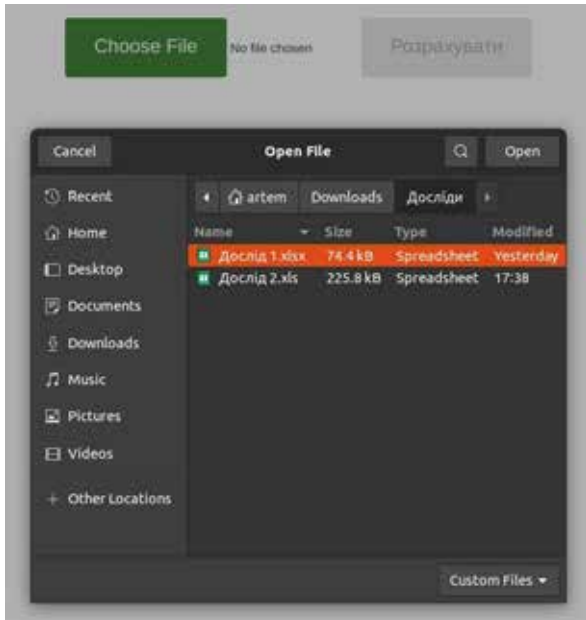


Рис. 5. Вибір excel файлу

Для візуалізації даних використано мову розмітки гіпертексту HTML5 та CSS3 – мова стилю сторінок, що використовується для опису їхнього зовнішнього вигляду. Для отримання даних з Excel файлу в програму було підключено бібліотеку Sheet.js з відкритим вихідним кодом. Основні етапи програми:

**1. Вибір Excel файлу.** Вносимо в програму Excel файл який отримуємо наприкінці досліді при аналізі на спектрофотометрі. Він містить в собі велику кількість даних. Для зчитування інформації потрібно натиснути на кнопку Choose File (рис. 4) після чого обираємо потрібний нам файл (рис. 5).

Програма дозволяє вносити файли з розширенням .xls та .xlsx. Це зроблено за допомогою спеціального атрибуту accept в тегу input.

**2. Розрахунок.** Далі натискаємо кнопку **Розрахувати**, ця кнопка заблокована поки не буде внесено файл. Після чого отриманий масив обрізаємо за допомогою методу slice (рис. 6). Прибираємо з масиву непотрібні дані, які будуть заважати знайти максимальне значення та переводимо дані в числовий тип:

**3. Знаходження максимального значення.** Після обрізки масиву обчислюємо максимальне значення та додаємо в масив maxValues (рис. 7).

```
this.columnValues.slice(50, this.columnValues.length).forEach(i => {
  this.slicedArray.push(Number(i.toString().replace( searchValue: ',', replaceValue: '.')));
});
```

Рис. 6. Обрізка масиву

```
this.maxValues.push(Math.max.apply( thisArg: null, this.slicedArray));
```

Рис. 7. Додавання у масив maxValues максимальних значень

```
this.maxValues.forEach(i => {
  this.calculationResults(i, number: 0.03355, this.methanolResults);
  this.calculationResults(i, number: 0.12075, this.formaldehydeResults);
});
```

Рис. 8. Перебір масиву та виклик функції calculationResults

```
calculationResults(value, number, array) {
  let result = (0.1 * value)/number;

  array.push(Math.trunc( x:result * 10000 ) / 10000);
},
```

Рис. 9. Функція обрахунку результатів

Масив з максимальними значеннями перебирається за допомогою методу `forEach`, де кожне зі значень потрапляє в функцію `calculationResults`, в якій відбувається обрахунок концентрацій метанолу та формальдегіду (рис. 8).

Функція `calculationResults` приймає в себе 3 аргументи. Перший, `value` – максимальне значення знайдене в стовбці; другий аргумент, `number` – це

оптична густина для еталонного розчину; третій аргумент, `array` – масив окремо створений для значень метанолу та формальдегіду. В середині функції присутня формула визначення концентрації метанолу та формальдегіду. Наприкінці функції дані обрізаються до десяти тисячних та додаються в масив (рис. 9).

Далі, отримані дані візуалізуються на екрані у вигляді таблиці (рис. 10).

Дослід 1.xlsx		Дослід 2.xlsx	
Метанол	Формальдегід	Метанол	Формальдегід
0.6925 г/дм <sup>3</sup>	0.1896 г/дм <sup>3</sup>	0.6378 г/дм <sup>3</sup>	0.1772 г/дм <sup>3</sup>
0.9722 г/дм <sup>3</sup>	0.2701 г/дм <sup>3</sup>	0.9472 г/дм <sup>3</sup>	0.2631 г/дм <sup>3</sup>
0.3847 г/дм <sup>3</sup>	0.1069 г/дм <sup>3</sup>	0.4745 г/дм <sup>3</sup>	0.1318 г/дм <sup>3</sup>
0.1695 г/дм <sup>3</sup>	0.0471 г/дм <sup>3</sup>	0.4131 г/дм <sup>3</sup>	0.1147 г/дм <sup>3</sup>
0.2324 г/дм <sup>3</sup>	0.0645 г/дм <sup>3</sup>	0.2795 г/дм <sup>3</sup>	0.0776 г/дм <sup>3</sup>
0.9982 г/дм <sup>3</sup>	0.2773 г/дм <sup>3</sup>	0.3025 г/дм <sup>3</sup>	0.084 г/дм <sup>3</sup>

Рис. 10. Візуалізація результатів

**Висновки.** Дана робота є прикладом оптимізації та цифровізації експериментальних даних при їх аналізі, отриманих в результаті досліджень технології конверсії вуглекислого газу в продукти органічного синтезу без використання дороговартісного програмного забезпечення.

В наукових дослідженнях хімічного напрямку важливу роль має комплексна робота, тобто потрібно не тільки розробити експеримент, створити технологічну схему, проаналізувати на приладах отримані дані, а й, застосувавши програмне

забезпечення або комп'ютерний додаток, розрахувати та відфільтрувати найбільш оптимальні результати. Розроблений веб-додаток вирішує проблему роботи з великим обсягом даних, які отримуємо в кінці експерименту, пришвидшує їх обробку, економить час для аналізу отриманої інформації. Веб-додаток має версію для комп'ютерів, планшетів та смартфонів. Він також є масштабуємим і в подальшому планується можливість додати функції архівації результатів або їх видалення, введення графіків та інших додаткових можливостей.

#### Список літератури:

1. Kamensky A., Olshevsky O., Pochynok V., Viazovyyk, V. (2021). Electrocatalytic Processing of Carbon Dioxide into Methanol and Formaldehyd. *Science and Innovation*. № 17 (5). P. 73–82. <https://doi.org/10.15407/scine17.05.073>
2. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання / уклад. С. О. Коновалова. Краматорськ : ДДМА, 2020. 80 с.
3. Винник О. Ф. Застосування програмного засобу ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0 для написання хімічних формул та моделювання хімічних процесів [Електронний ресурс] : навч. посіб. / О. Ф. Винник, О. М. Свечнікова, Т. Я. Грановська ; за ред. Колісника С. В., Панайотової Т. Д. Харків : ХНПУ, 2018. 92 с.
4. Роїк М. В., Присяжнюк О. І., Денисюк В. О. Огляд програмних засобів статистичного аналізу даних. URL: <http://www.economy.nauka.com.ua/?op=1&z=5676> (дата звернення: 25.05.2024).
5. 10 кращих програм та інструментів для статистики у 2022 році. URL: <https://ua.softlist.com.ua/articles/10-luchshikh-programm-i-instrumentov-dlia-statisiki-v-2022-godu/> (дата звернення 21.04.2024).
6. Список програмного забезпечення для науково-дослідних та аналітичних лабораторій. URL: <https://www.alsichrom.com/informatsionnye-resheniya-v-sovremennykh-laboratoriyakh/item/88->

programmnoe-obespechenie-dlya-nauchno-issledovatel'skikh-i-analiticheskikh-laboratorij.html (дата звернення 28.04.2024).

7. Екодія. Зміна клімату в Україні та світі: причини, наслідки та рішення для протидії. URL: [https://ecoaction.org.ua/zmina-klimatu-ua-ta-svit.html?gad\\_source=1&gclid=EAIaIQobChMIx6eC0YfChQMV96eDBx1\\_UQZqEAAAYASAAEgIjDPD\\_VwE](https://ecoaction.org.ua/zmina-klimatu-ua-ta-svit.html?gad_source=1&gclid=EAIaIQobChMIx6eC0YfChQMV96eDBx1_UQZqEAAAYASAAEgIjDPD_VwE) (дата звернення 25.05.2024).

8. Вязовик В. М., Починок В. В., Шинкаренко, Д. Ю. (2021). Класифікація технологій утилізації діоксиду вуглецю в умовах економіки замкнутого циклу. *Вісник Черкаського державного технологічного університету*. № 2. С. 82–107.

9. Ramses Snoeckx and Annemie Bogaerts. “Plasma technology – a novel solution for CO<sub>2</sub> conversion?”, *Chem. Soc. Rev.* 2017. № 46. P. 5805–5863. DOI: 10.1039/C6CS00066E

10. Л.М. Спасьонова, В.Ю. Тобілко, І.В. Пилипенко Інструментальні методи хімічного аналізу: навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» спеціалізації «Хімічні технології неорганічних керамічних матеріалів». Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. 69 с.

11. Чому JavaScript – перспективна мова програмування? Поради початківцям. URL: <https://dou.ua/forums/topic/35184/> (дата звернення: 24.05.2024).

12. Сучасний підручник з JavaScript. [Електронний ресурс]. URL: <https://uk.javascript.info/intro> (дата звернення: 24.05.2024).

13. What is Vue? URL: <https://vuejs.org/guide/introduction.html> (дата звернення: 25.05.2024).

### **Kamenskyi A.O. DEVELOPMENT OF A WEB-BASED SOFTWARE APPLICATION FOR ANALYZING THE RESULTS OF SPECTROPHOTOMETRIC STUDIES OF ELECTRON-CATALYTIC CONVERSION OF CARBON DIOXIDE**

*The use of computer technology in modern chemical research is an extremely relevant and necessary process. Today, there are computer programs that can process the results of experiments, create graphical dependencies, and analyze the information obtained. However, there are a number of studies in which it is advisable to use programs written directly for analyzing data obtained as a result of certain experimental developments.*

*This article describes a web application designed to process the results of studies of the electron-catalytic conversion of carbon dioxide into organic compounds obtained after analysis on a spectrophotometer in the form of graphical dependencies and Excel tables. Since the carbon dioxide utilization studies were conducted under different conditions and parameters, a large amount of data required computer processing. When creating the web application, a theoretical review of existing software used in the chemical industry was made.*

*To write the program, we chose JavaScript as one of the modern, dynamic, prototyping and object-oriented programming languages used in web page development. The Vue framework was used to optimize the program interface, code flexibility, and further expand the application's functionality. Data visualization was created using HTML5 and CSS3 programming languages. When working with Excel tables, the Sheet.js library is connected.*

*The developed web application makes it possible to quickly process large volumes of results obtained during the spectrophotometric analysis of samples of synthesized substances, filter data, and calculate substance concentrations. The program can be used not only for the determination of methanol and formaldehyde, but also for other organic substances synthesized in samples. Computer processing of experimental data is a necessary component of studies of carbon dioxide conversion by the plasma-catalytic method using a barrier discharge.*

**Key words:** web application, Excel spreadsheets, electron-catalytic conversion, spectrophotometer, computer, carbon dioxide, software, JavaScript.