

УДК 681.3.069: 517.443: 539.143.43

С.П. Солодовникова (6 курс, каф. ИУС), В.С. Тутыгин, к.т.н., доц.

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СРЕДСТВА ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА ВЕЩЕСТВ МЕТОДАМИ ЯМР

В настоящее время во всем мире производится ужесточение таможенного контроля грузов с целью предотвращения провоза товаров группы риска.

С этой целью в мире уже разработано и разрабатывается в настоящее время большое количество технических средств контроля, основанных на различных физических принципах: рентгеновская и нейтронная томография, дрейф-спектрометрия ионов, поверхностная ионизация, резонансное лазерное поглощение, ЯМР (<http://www.detector.ru>, <http://www.zhdanov.ru>).

Нами изучались возможности экспресс-анализа органических веществ методами ЯМР. Особенностью спектров органических соединений является то, что каждая составляющая вещества характеризуется не одной, а несколькими спектральными линиями, причем спектральные линии расположены весьма близко друг к другу и значительно отличаются по амплитуде.

Технические возможности экспресс-анализа зависят как от аппаратуры регистрации, так и от методов обработки сигналов ЯМР. Была сделана попытка оценки возможности распознавания (идентификации) веществ по сигналам ЯМР с использованием лучшей отечественной и зарубежной аппаратуры регистрации и базовых методов обработки (спектрального и корреляционного анализа).

Задача обнаружения веществ по сигналам ЯМР при таможенном контроле, как правило, производится тогда, когда количество исследуемого вещества незначительно. Тогда отклик, соответствующий обнаруживаемому веществу находится значительно ниже уровня шумов. Дополнительные сложности возникают, если анализируемое вещество находится не в чистом виде, а в смеси с некоторыми другими веществами.

БПФ использовалось нами для изучения возможностей обнаружения слабой частотной составляющей в спектре сигнала ЯМР на фоне близко расположенной сильной частотной составляющей и при наличии значительных шумов. Накопление и последующее вычитание спектров позволяло улучшить эффект обнаружения слабой спектральной составляющей.

Логарифмическое масштабирование и оконная фильтрация (IEEE-1978,v.66,n.1,p.60) оказались полезны с точки зрения визуального представления результатов обнаружения.

Корреляционная обработка заключалась в вычислении коэффициентов корреляции сигнала спектрометра с эталонными сигналами различных частот в интересующем нас диапазоне. В результате получили зависимость коэффициента корреляции от частоты эталона.

Для улучшения условий наблюдения слабой спектральной составляющей использовано вычитание функций коэффициента корреляции сигнала спектрометра с эталоном и коэффициента корреляции сильной частотной составляющей с эталоном.

В результате нами получены следующие оценки основных достижимых технических характеристик компьютерной установки для экспресс-анализа продуктов методами ЯМР, использующей лучшую отечественную аппаратуру регистрации сигналов ЯМР ADC-402 (40 МГц, 2 канала, 256 Кбайт памяти):

- максимальное разрешение по частоте - $4 \cdot 10^{-3}$,
- максимальная чувствительность по амплитуде - 10^{-3} ,
- наилучшее отношение сигнал/шум - 1:30.

При использовании лучшей зарубежной аппаратуры DAS-4102 (64 МГц, 2 канала, 256 Кбайт памяти) и DAS-4301/8К (100 МГц, 2 канала, 8 Кбайт памяти) технические характеристики могут быть улучшены.