

SZOTE Élettani Intézet és SZOTE Orvosi Vegytani Intézet

Számítógépes rendszer alkalmazása gyorsfotometriás mérési adatok  
feldolgozására

Szekeres László és Marek Nándor

Kémiai rendszerek jellemzésénél nagyon lényeges a lejátszó-  
dó reakciók minél pontosabb ismerete. Ez megköveteli, hogy a reak-  
ció lejátszódása közben mérjük a rendszerre és a változásra jellemző  
fizikai mennyiségeket. Reakciókinetikai szempontból legjellemzőbb a  
koncentráció változása. Ennek közvetlen mérése azonban csak igen  
lassu reakciók esetén lehetséges. Ezért inkább a koncentrációval egy-  
értelmű kapcsolatban lévő és könnyebben mérhető fizikai mennyiséget  
célszerű vizsgálni.

Az egyik ilyen jellemző paraméter a fényelnyelés. A fényelnye-  
lő képesség és a koncentráció közötti kapcsolatot a Lambert-Beer-tör-  
vény írja le. Az abszorpciós spektrum, amely az anyag fényelnyelő ké-  
pességének hullámhossz függését adja meg, a fentiek mellett anyagszer-  
kezeti következtetésekre is lehetőséget ad.

Egy - a látható tartományba eső - abszorpciós spektrum felvéte-  
le, ha a mérés hullámhosszról hullámhosszra (pl. 2-5 nm-enként) törté-  
nik, órákat vehet igénybe. Megfelelő, irószerkezettel ellátott fotomé-  
tert használva ez az idő 5-10 percre csökkenthető. Az időben ennél  
gyorsabban változó jelenségek abszorpciós spektrumai az említett mérési  
módszerekkel tehát nem követhetők.

Az 50-es években, amikor már az elektronika fejlettsége lehe-  
tővé tette, kidolgozták a spektrumok gyors felvételének és rögzítésének  
módszerét. A megfelelő készülékek jellemzésére az átfogható spektrum-  
tartományt és a spektrális, illetve időbeni felbontóképességet adják meg.  
Általában a látható tartományban működnek, 4-5 nm-es felbontóképes-  
séggel. Az egy spektrum felvételéhez szükséges idő a legjobb készülé-  
keknél néhány másodperc.

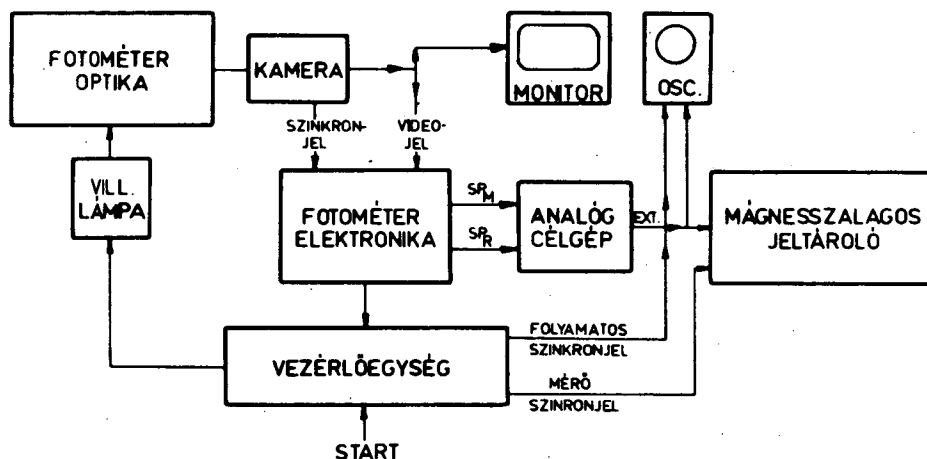
A fotoelektronsokszorozó és az oszcilloszkóp elterjedése gyorsabb változások megfigyelését tette lehetővé. Kezdetben csak egyetlen hullámhosszon vizsgálták a minta abszorpciójának változásait. Később, hogy teljesebb képet kapjanak a mintában végbemenő változásokról, felmerült az igény, hogy egy bizonyos spektrumtartomány időbeni változását egyszerre tudják megfigyelni. Az első ilyen készülékek nagy sebességgel mozgó mechanikával működtek. A monokromátor belépő részére bocsátották a vizsgálólandó, a mintán áthaladt fénysugarat. A bontóelemet (prizma vagy rác) nagy fordulatszámmal forgatva, a spektrum hullámhossz szerinti bontásban vonult el a kilépő résen. A kilépő résnél elhelyezett fotoelektronsokszorozó fotóáramát a bontóelem forgási frekvenciájával szinkronizált oszcilloszkópba vezették, így láthatóvá vált a minta abszorpciós spektruma. A spektrumok rögzítése az oszcilloszkóp képernyőjének fényképezésével vagy megfelelő sebességű filmezésével történhetett. Az időbeni felbontás növelése a mozgó mechanikai elem miatt nem volt lehetséges.

Az általunk tervezett és megépített villanófény gyorspektrofotométerben a fénybontó egységből (spektrogrófból) kilépő szinképet egy TV kamera képfelvevő csővének targetjére képezzük le. E célra kameraként a HTV - kereskedelemben is kapható - TV kameráját használtuk, minimális átalakítással. A letapogatást végző elektronsugár igen kis tehetetlensége révén értünk el tehát az előbbieknél sokkal nagyobb időbeni felbontást.

A gyorspektrofotométer blokkvázlata az 1. ábrán látható. A fotométer-optikából kilépő szinképeket a kamera alakítja mérhető analóg villamos jellé. A videojelet monitorba vezetve ellenőrizni lehet a kamera helyes beállítását, és közvetlenül láthatjuk a spektrumok fényintenzitás-változásait. A videojel a fotométer elektronikába kerül, ahol a megfelelően vezérelt mintavevő és tároló áramkörök előállítják a  $SP_M$  és  $SP_R$  jeleket, amelyek a mérő - és referenciaspektrum fényintenzitásával arányosak. Ezeket a jeleket egy analóg célgéphez vezetjük, amely tulajdonképpen analóg számítógép. Ez az extinkciót az

$$E = \lg \frac{SP_R}{SP_M} = \lg SP_R - \lg SP_M$$

PILLANATREAKCIÓK GYORSSPEKTROFOTOMETRIÁS KÉPÉNEK  
RÖGZÍTÉSE MÁGNESSZALAGON



1. ábra

összefüggés alapján két logaritmizáló és egy kivonó áramkör segítségével határozza meg. Az extinkciót szinkronizáló jel segítségével jelenítjük meg az oszcilloszkóp képernyőjén hullámhossz-függésben, az x tengely megfelelő hitelesítése mellett. Az oszcilloszkópon a megfelelő spektrumok regisztrálása fotózással vagy filmezéssel is történhet, ezen a "holt" anyagon azonban a lejátszódó kémiai változások finomabb analizisét nem lehet elvégezni.

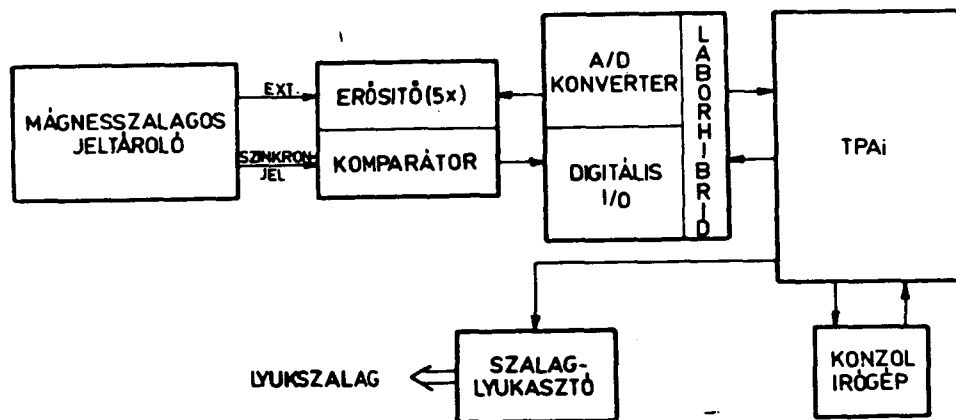
A gyorsfotométerekkel és így a mi villanófény gyorsfotométerünkkel is - mint azt a bevezetőben említettük - igen gyorsan lejátszódó jelenségeket lehet vizsgálni. Ilyen esetben a beavatkozás és a regisztrálás összehangolt működtetése csak elektronikus vezérlő egységgel lehetséges. A vezérlő-egység embertől ka-

pott indító jellel működésbe hozza a mágnesszalagos jeltárolót, majd néhány kiindulási spektrum rögzítése után, folyamatos regisztrálás mellett indítja a gyorsreakciót.

Mivel esetünkben nagy mennyiségű információ feldolgozásáról van szó, szükségessé válik egy megfelelő számítógép alkalmazása. Nehézségeket jelenthet azonban a spektrumok számítógépbe való juttatása. Az extinkció, mint feszültség-idő függvény, számítógépre illesztett A/D konverterrel digitalizálható. A vizsgált jelenség igen gyors, így a konverciónak és a mérési adatok tárolásának is igen gyorsnak kell lennie. A gyors konverzió (kb. 5-10.000 adat/s) a mai integrált áramkörös technika alkalmazásával viszonylag könnyen megvalósítható, a tároláshoz azonban igen nagy operatív memóriára, vagy nagyon gyors működésű háttértárolóra (pl. DISC) van szükség, hiszen minimálisan 100.000 mérési adatot kell tárolni 15-20 másodperc alatt.

E problémák megoldására kétféle kiszámítógépes rendszert próbáltunk ki. A 2. ábrán TPAi kiszámítógépes összeállítás blokkvázlata látható.

### KISSZÁMÍTÓGÉPES (TPAI) RENDSZER MÁGNESSZALAGON RÖGZÍTETT SPEKTRUMOK SZALAGRA LYUKASZTÁSÁRA

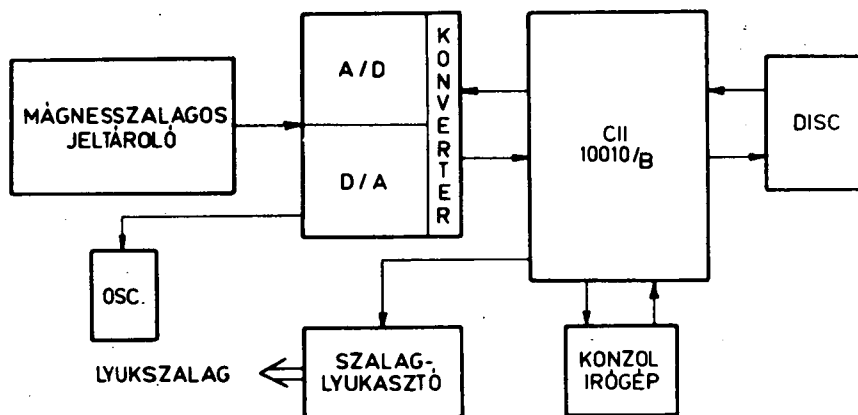


2. ábra

A mágnesszalagos jeltárolón rögzített analóg jel digitalizálására a Kandó Kálmán Villamosipari Műszaki Főiskola Számítástechnikai Tanszéke által kifejlesztett LABORHIBRID egységet használtuk. Háttér tároló hiányában a felvételt részletekben játszottuk be. A spektrumokat lyukszalagon nyertük, a konzol-írógépen pedig lista készült a lyukasztás menetéről. Ezuton is szeretném köszönetet mondani Ivanyos professzor urnak, hogy tanszékén e vizsgálataink elvégzését lehetővé tette.

A 3. ábrán az előzőhöz hasonló összeállítást láthatunk. A SZOTE CII 10010/B számítógépébe, az egyébként EEG és EKG analízisre használatos A/D-D/A konverter segítségével juttattuk be a mágnes szalagról lejátszott jeleket. A számítógéphez csatlakozó 800 Kbyte-os DISC - amelynek utolsó negyedét használhatuk - lehetőséget adott egy teljes mérés folyamatos bejátszására és tárolására.

### KISSZÁMITÓGÉPES (CII10010/B) RENDSZER MÁGNESSZALAGON RÖGZITETT SPEKTRUMOK SZALAGRA LYUKASZTÁSÁRA

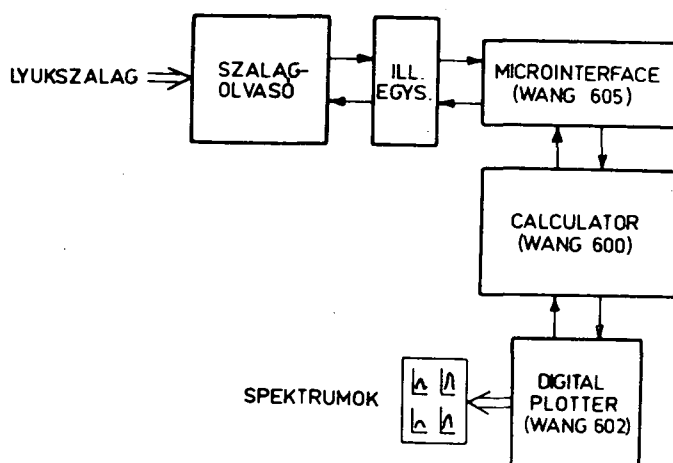


3. ábra

A számítógépek által lyukasztott szalag 8 bites, bináris formátumu 256 kvantálási szintű. Egy spektrum 128 értékből áll, amely kb. 1 nm-es felbontásnak felel meg.

A lyukszalagon nyert mérési adatokat - a közismert gazdasági és munkaszervezési nehézségek, illetve előnyök miatt - a laboratóriumunkban lévő WANG 600-2 típusu minicomputerrel dolgoztuk fel.

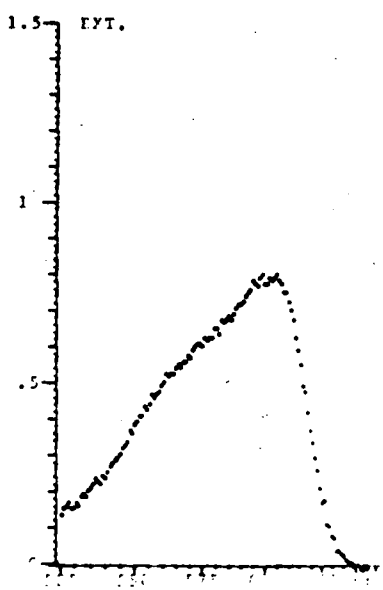
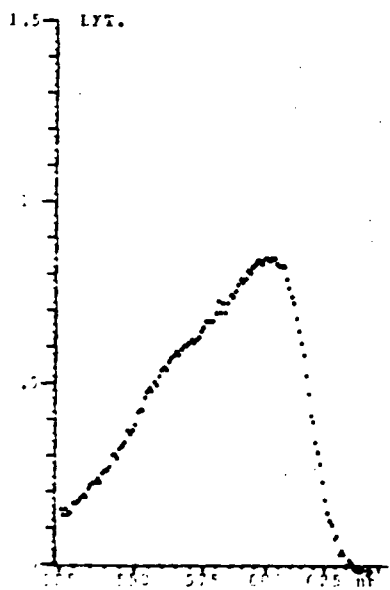
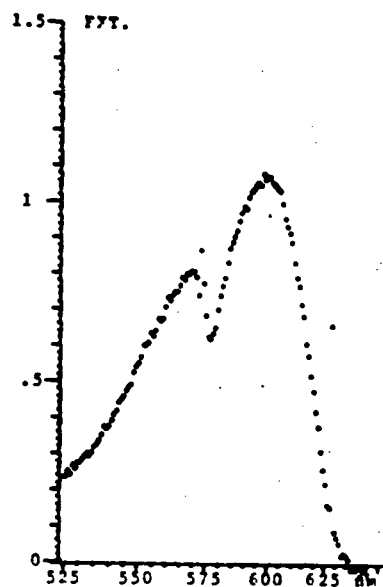
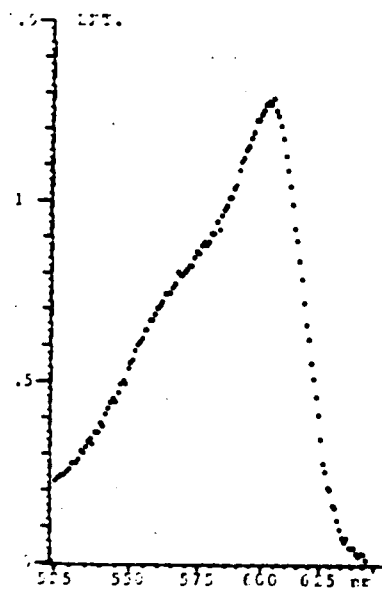
MINICOMPUTERES RENDSZER LYUKSZALAGON RÖGZITETT  
SPEKTRUMOK FELDOLGOZÁSÁRA



4. ábra.

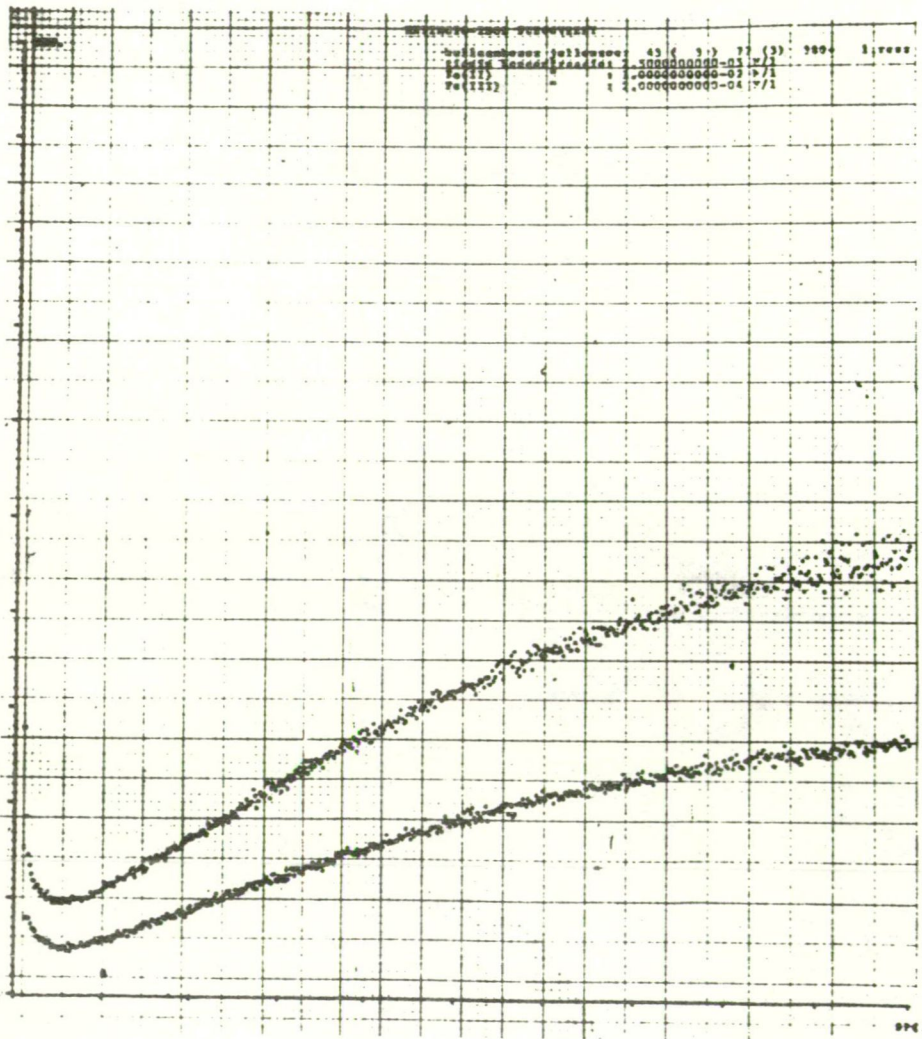
Ugy gondoljuk, nem szükséges részletezni, hogy amennyiben a mérési adatokat valamilyen módon lyukszalagra rögzítjük, és rendelkezésünkre áll egy számítógép, amely lehet egy minicomputer is, csak a probléma megfogalmazásától függ, hogy milyen szempontok szerint dolgozzuk fel az anyagot. A 4. ábrán az e célra alkalmas összeállítás blokkvázlata látható. Lyukszalag olvasóként egy READ-MOM 300 típusu készüléket használtunk, illesztését egyrészt egy saját építésű, másrészt a WANG cég által gyártott interface segítségével oldottuk meg. A kalkulátorhoz csatlakoztatott rajzoló írógép, lehetővé teszi a számítás eredményeinek görbe formájában, megfelelő koordináta rendszerben, szöveges megjegyzésekkel ellátott megjelenítését.

5.2.2.



5. abra

Végezetül szeretnénk bemutatni az előbbi elvek felhasználásával megvalósított két egyszerű megjelenítési módot. Az 5. ábrán egy fotokémiai reakciót kísérő elszintelenedési folyamat első négy spektruma látható 20 ms-es követési idővel. A jobb felső ábrán megfigyelhető spektrum a villantás pillanatában került felvételre, mint azt a görbén látható törés jelzi. Meg kell jegyeznünk, hogy az ilyen ábrázolási mód, amely a lyukszalagon rögzített számadatok pontonkénti ábrázolásával készült, már ebben az egyszerű formájában is jelentős információkat szolgáltat akár molekula szerkezeti, akár reakciókinetikai vizsgálatokhoz. A 6. ábrán az előbb látott spektrumok két jellemző hullámhossz-értékéhez tartozó extinkció változását láthatjuk az idő függvényében, abban az esetben ha nem az első néhány, hanem a teljes mérési idő alatt felvett 750 spektrum adatait használjuk fel.



6. ábra



Összefoglalásképpen az elmondottakból néhány gondolatot szeretnénk kiemelni. Ma a gyorsfolyamatok vizsgálata a kémia súlyponti kérdése. Az általunk kifejlesztett gyorsfotométerrel és az alkalmazott számítógépes rendszerrel igen gyors folyamatok analizisére is lehetőség van. Ezen felül azáltal, hogy a mérés folyamán csak egy fázisban kell nagy-számítógépet használni, a számító központok viszonylag nagy tehetetlenségének megkerülésével az egész feldolgozást mérőhely-közelbe lehet hozni. Ugyanis viszonylag olcsó, de mégis megfelelő minicomputeres konfigurációval, csak kérdésfeltevés függvénye, hogy a lyukszalagon lévő anyagot milyen szempontok szerint dolgozzuk fel. Ez gyors visszajelzésre, ennek következtében a feldolgozó program és a mérés gyors változtatására ad lehetőséget, tehát a pillanatreakciók - ha nem is pillanatszerű, de - gyors analizise valósítható meg.

