

Исследование методов и разработка средств
оценки элементного состава веществ с
использованием методов лазерной масс-
спектрометрии.

Студент: Сорокин Д. С. Руководитель: Власов А.И.

Цель работы:

Исследование методов и разработка средств оценки элементного состава веществ с использованием методов лазерной спектromетрии, использование современных аппаратных средств для оценки элементного состава.

Задачи:

1. Решение проблемы оцифровки различных типов фотодетектора.
2. Создание модели обработки фотодетектора.
3. Разработка программного комплекса для оценки элементного состава веществ.
4. Поддержка проведения различных методик расчета.

Применение методов оценки элементного состава веществ

Медицина



оценка элементного состава
веществ

Стоматология



Контроль за элементным составом
стоматологических препаратов,
приспособлений.

Исследовательские
работы

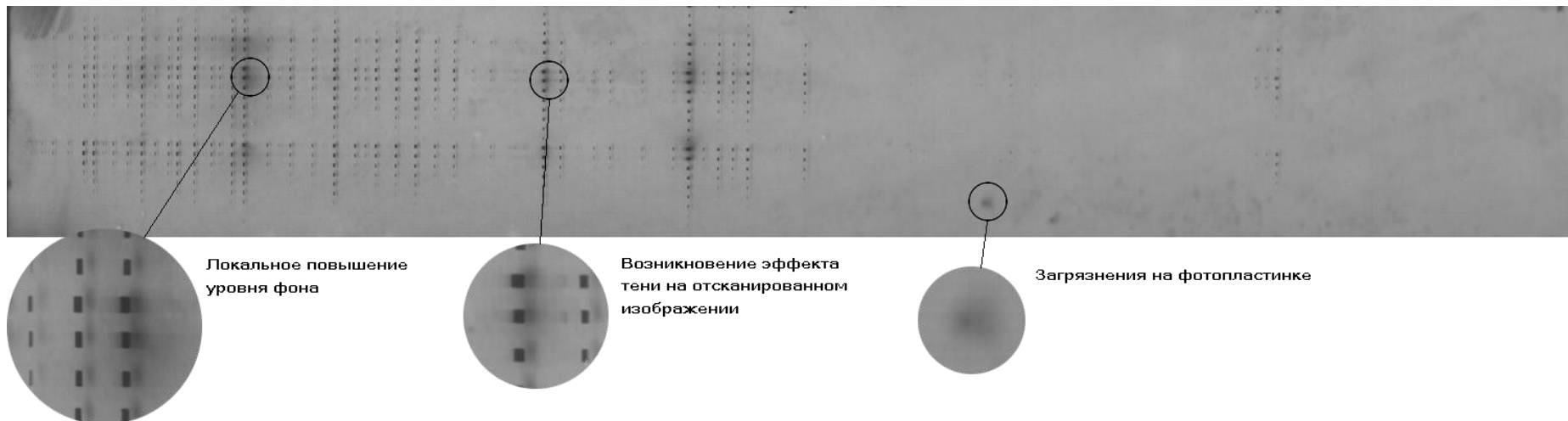


Идентификация личности погибших на основе
анализа элементного состава костной ткани и др.

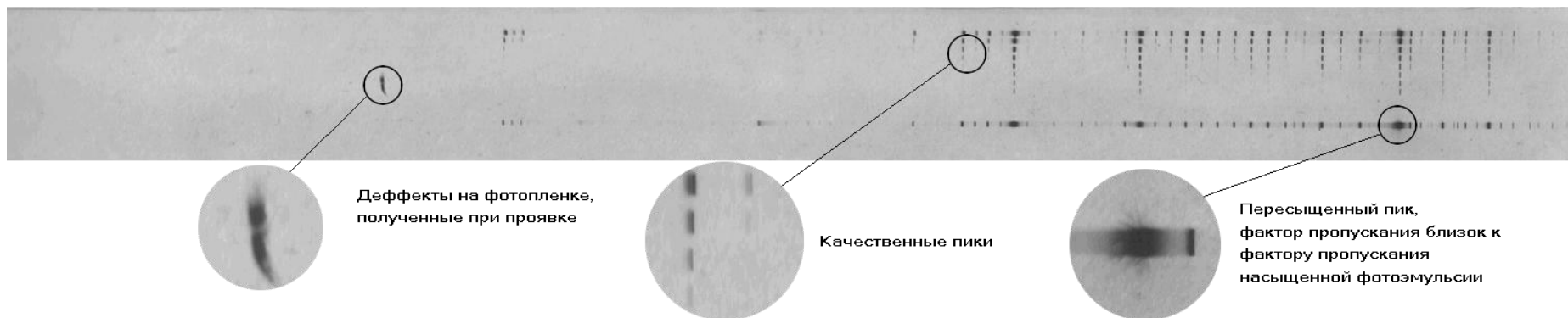
Организация анализа элементного состава веществ.



Вид отсканированного фотодетектора



Вид фотопластинки и основные проблемы после сканирования



Вид фотопленки и основные проблемы после сканирования

Порядок получения элементного состава веществ.

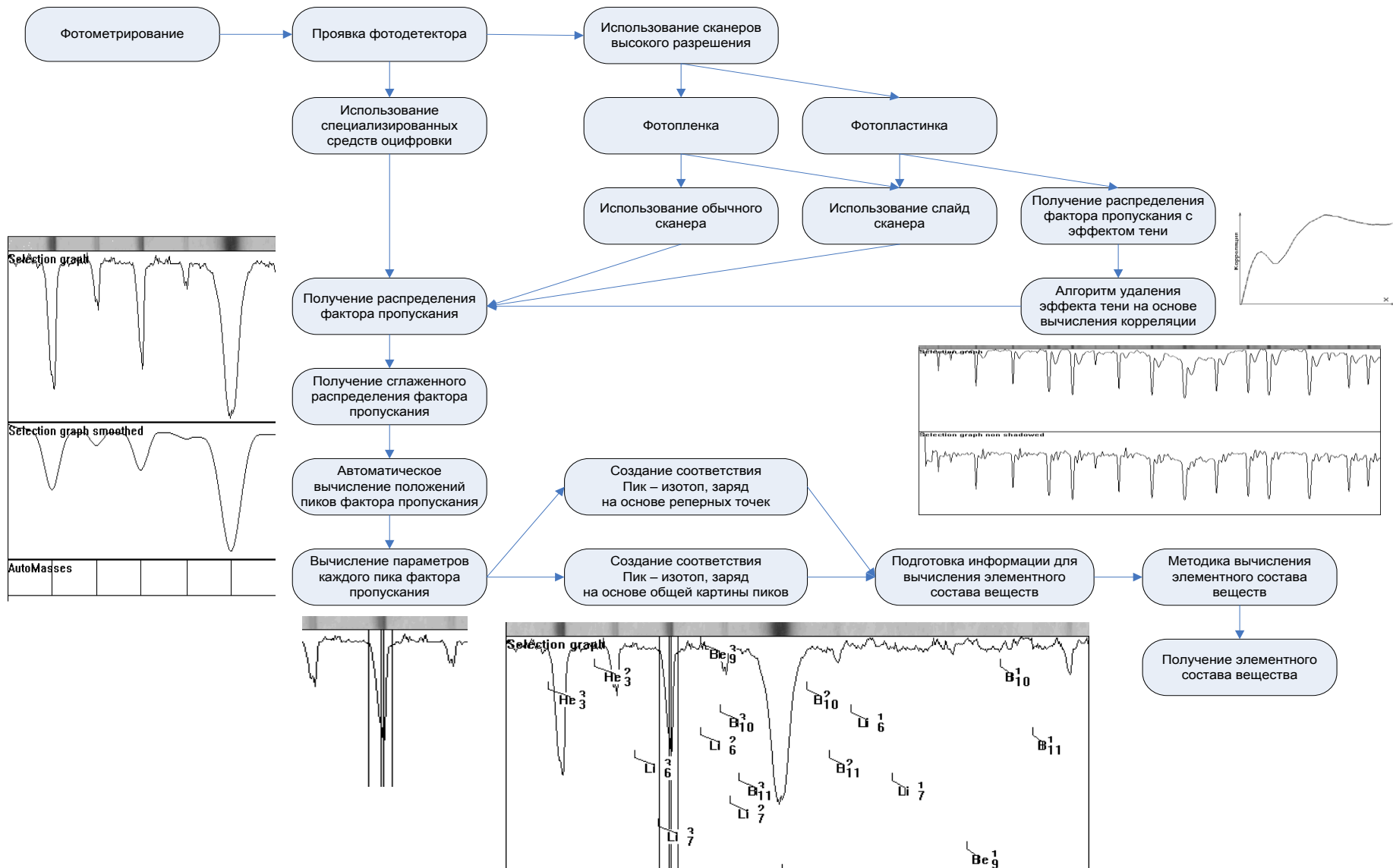


Диаграмма пакетов разработанного ПО.

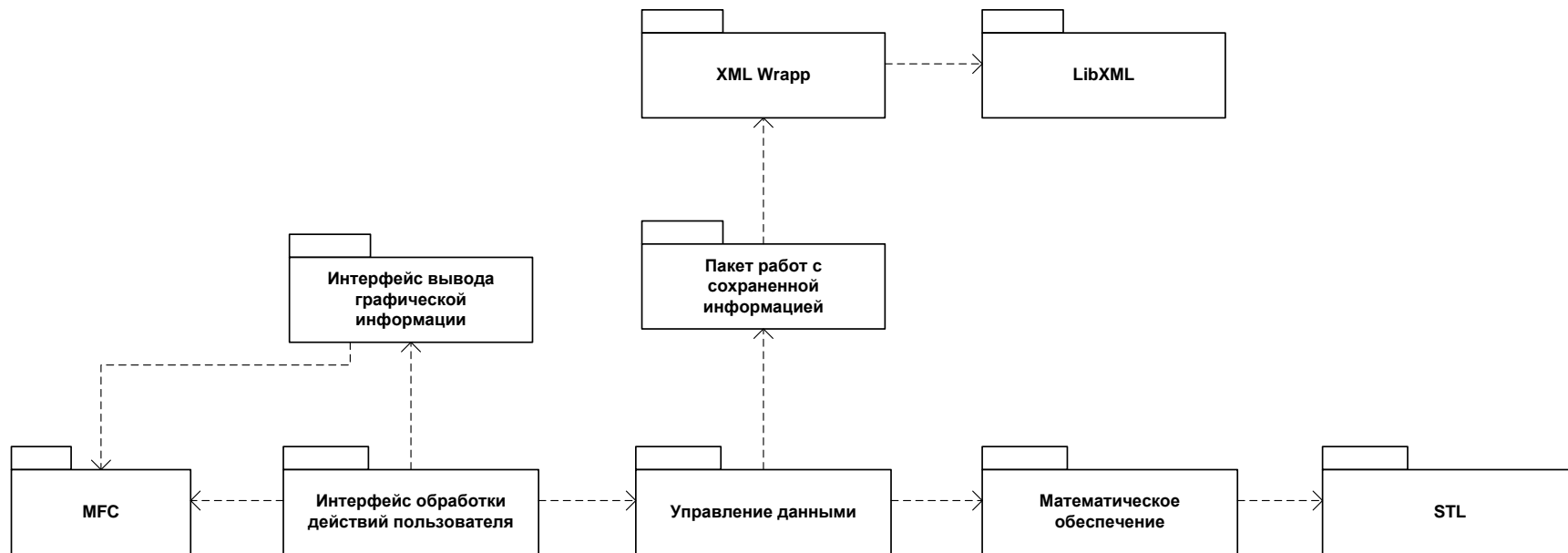
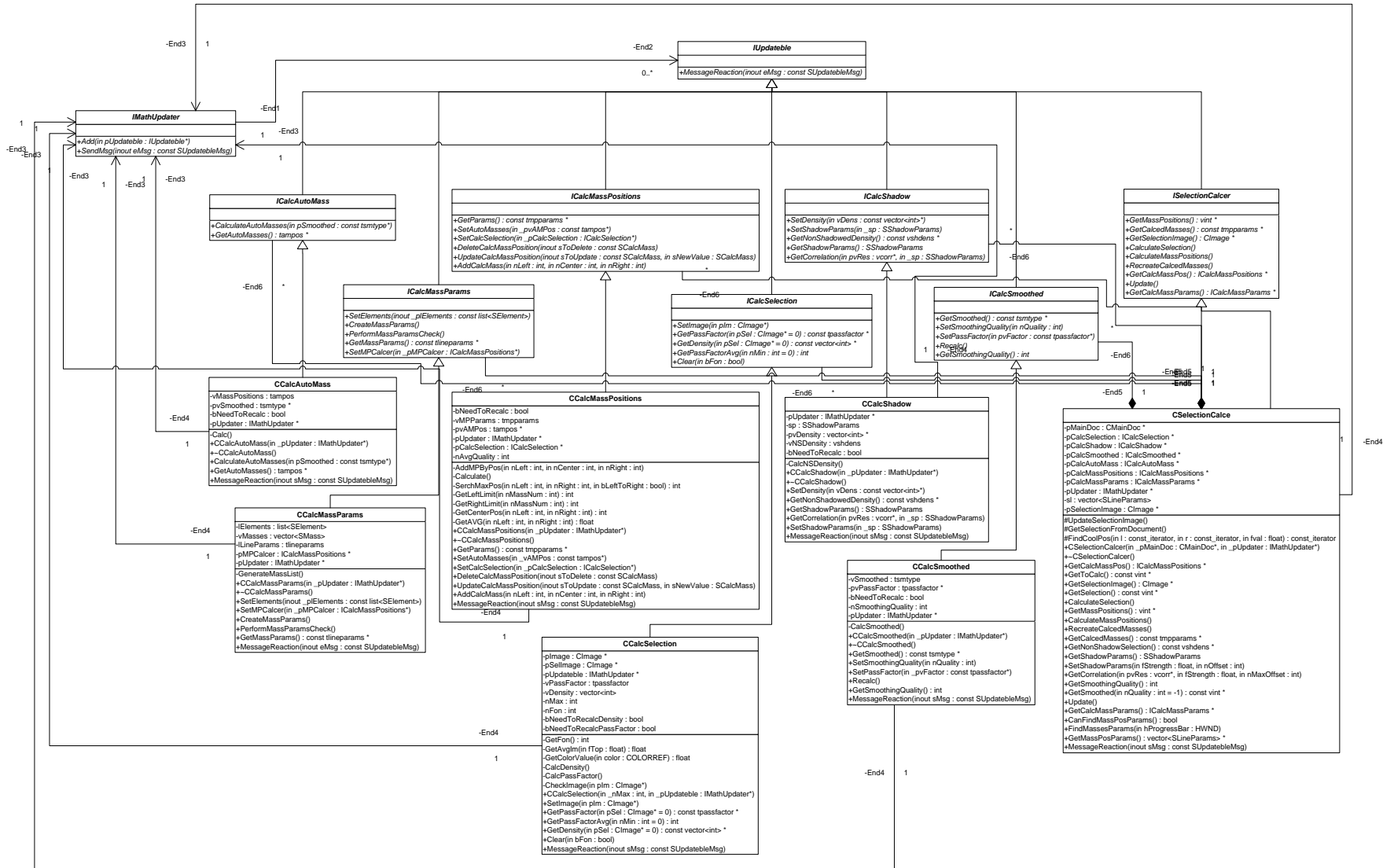
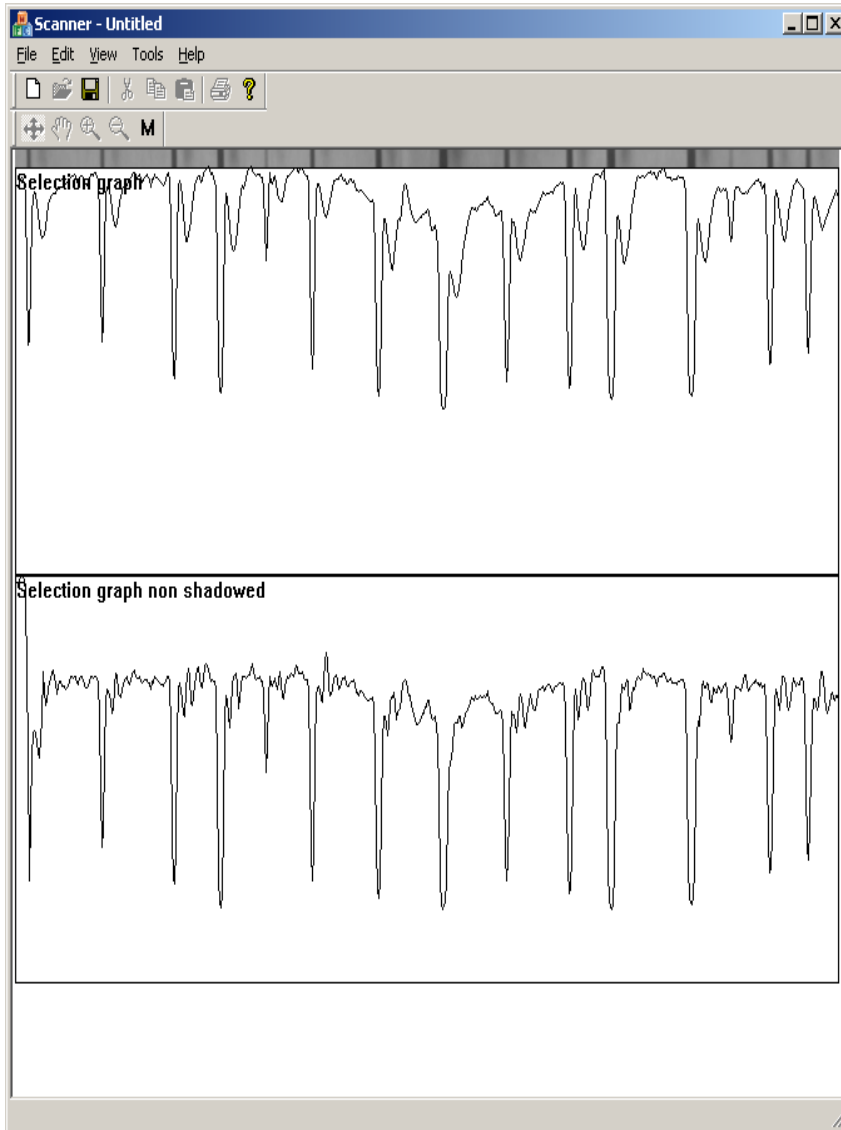


Диаграмма классов математического обеспечения разработанного ПО.



Удаление эффекта тени с изображения



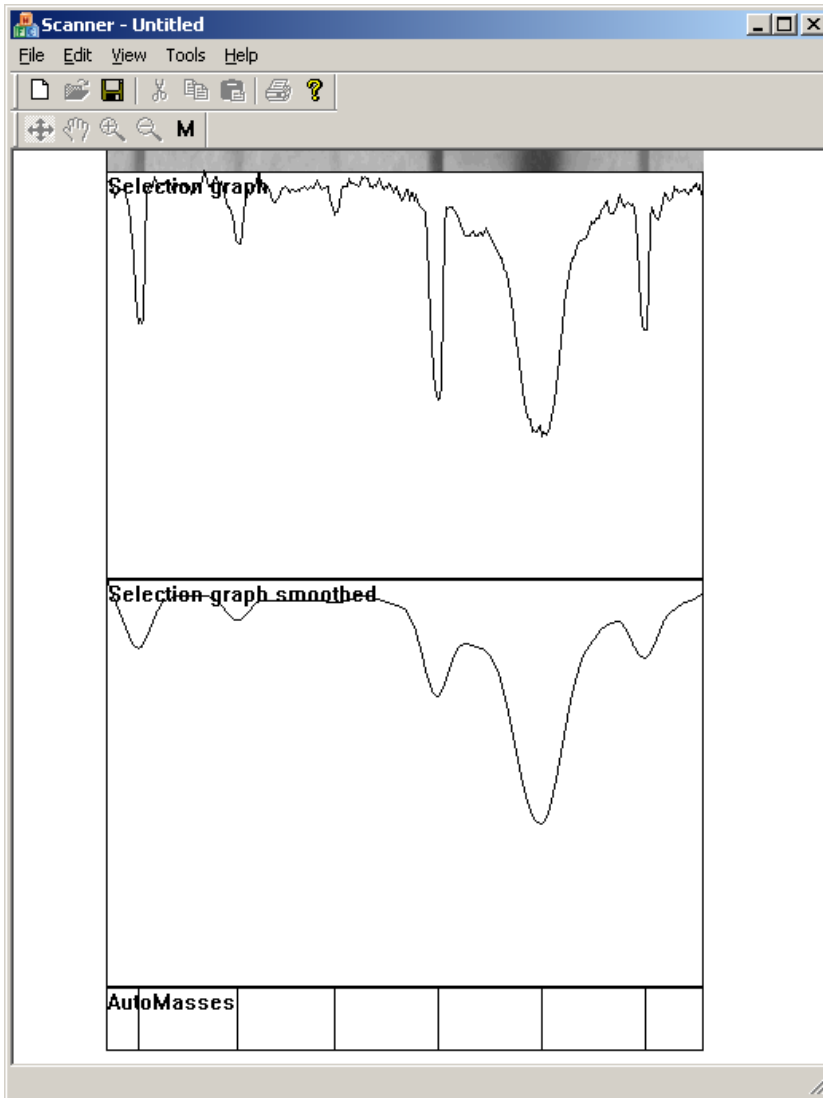
Модель тени:

$$I_{\text{измеренное}}(x) = I_{\text{реальное}}(x) + \alpha \cdot I_{\text{реальное}}(x - \beta)$$

Расчет параметров тени на основе корреляции между распределением с эффектом тени и распределением без эффекта тени.



Автоматическое определение положений пиков фактора пропуска

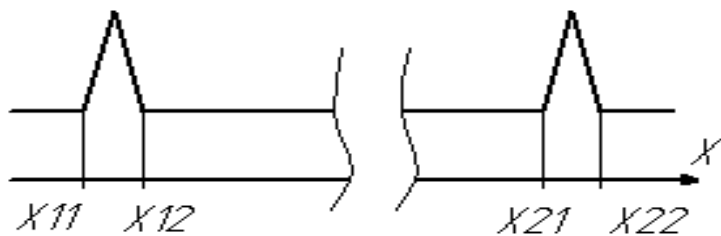


Создание вспомогательного сглаженного графика для определения положений пиков безотносительно к уровню фона при модификации исходного распределения в прямом и обратном направлении.

$$PassFactor[i] = \frac{PassFactor[i-1] + PassFactor[i+1]}{2}$$

Автоматической вычисление положений пиков на сглаженном распределении с переносом результатов на исходный график

Создание соответствий положений пиков распределения фактора пропускания изотопам



$$x_{m,z} = A \cdot \sqrt{\frac{m}{z}} + B$$

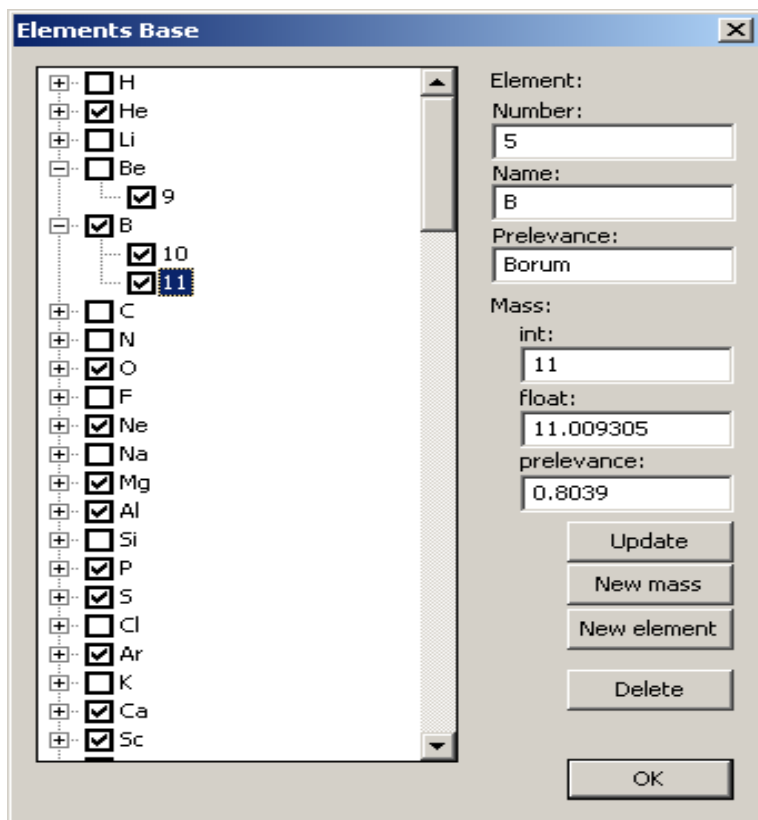
$$\left\{ \begin{array}{l} A_{\min} = \frac{x_{21} - x_{11}}{\sqrt{\frac{m_1}{z_1}} - \sqrt{\frac{m_2}{z_2}}} \\ B_{\min} = x_{11} - \frac{x_{21} - x_{11}}{\sqrt{\frac{m_1}{z_1}} - \sqrt{\frac{m_2}{z_2}}} \cdot \sqrt{\frac{m_1}{z_1}} \\ A_{\max} = \frac{x_{22} - x_{12}}{\sqrt{\frac{m_1}{z_1}} - \sqrt{\frac{m_2}{z_2}}} \\ B_{\max} = x_{12} - \frac{x_{22} - x_{12}}{\sqrt{\frac{m_1}{z_1}} - \sqrt{\frac{m_2}{z_2}}} \cdot \sqrt{\frac{m_1}{z_1}} \end{array} \right.$$

Вычисление параметров расположения на основе задания коэффициентов, при которых координатами реперных пиков являются и левые, и правые границы крайних пиков.

В предположении, что данным пикам соответствуют определенные изотопы определенного заряда, создаются максимальные и минимальные значения коэффициентов.

Проверка на принадлежность пика определенной массе. Если данного соответствия нет, то данный вариант расположения не учитывается в дальнейших расчетах.

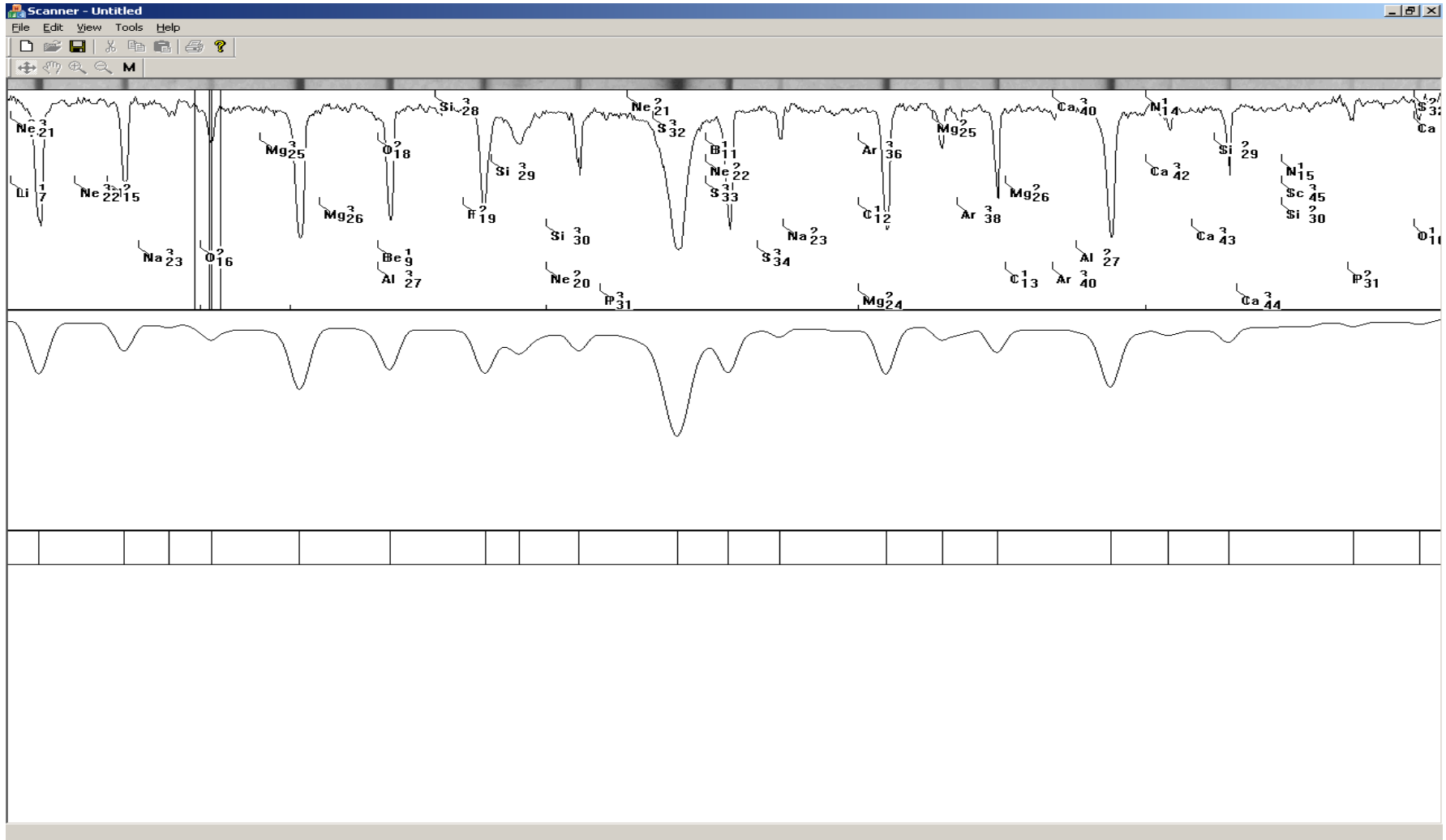
Использование в расчетах точных масс изотопов для возможности выделять двойные и тройные пики



Хранение информации о округленной массе, точной массе, природной распространенности изотопов одного элемента реализовано на основе популярной технологии XML.

Позволяет динамически отображать положение требуемых изотопов различных зарядов в режиме реального времени при использовании различных групп коэффициентов и отображать левую и правую границу предполагаемого положения изотопа.

Визуализация результатов создания соответствия Пик – изотоп, заряд.



Выводы

1. Исследованы способы оценки элементного состава веществ методами лазерной масс-спектрометрии
2. Разработаны алгоритмы для математической обработки фотодетектора
3. Разработано программное средство для оценки элементного состава веществ, поддерживающее несколько методик расчета, использующее дружественный интерфейс Windows
4. Разработанное программное средство позволяет сократить время обработки одного фотодетектора в несколько раз.
5. Поставлен вопрос о создании стандартизированного программного комплекса, позволяющего производить расчет элементного состава веществ для различных видов анализов (лазерная масс-спектрометрия, искровая масс-спектрометрия)