

Экспресс-анализ: одним взглядом

В Московском физико-техническом институте при содействии Института точной механики и вычислительной техники РАН создан действующий прототип портативного устройства для быстрого бесконтактного определения состава разнообразных химических веществ, в том числе находящихся в запечатанной прозрачной пластиковой или стеклянной упаковке. По сравнению с другими подобными устройствами новый прибор обладает рядом преимуществ, включая компактность и низкую себестоимость

Подавляющее большинство современных способов молекулярной идентификации веществ включают этап предварительной механической и химической обработки образцов. Это требует значительных временных и финансовых затрат и зачастую приводит к разрушению самого объекта исследования. А что делать, если в качестве последнего выступает, к примеру, уникальный музейный экспонат или драгоценный камень?

К счастью, существуют и другие – «бесконтактные» – способы анализа, основанные на физических методах исследования вещества. Неоспоримым преимуществом многих из них является простота выполнения теста, особенно когда не требуется специальной подготовки образца.

Важное место среди неразрушающих способов исследования вещества занимают оптические методы. В них используется способность каждого вещества генерировать при облучении светом ответный электромагнитный сигнал, спектр которого однозначно определяется атомно-молекулярной структурой этого вещества. По полученному спектру, решив обратную задачу, можно идентифицировать вещества, входящие в состав исследуемого образца.

Одним из наиболее информативных оптических методов является так называемая спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская спектроскопия), в основе которой лежит эффект неупругого рассеяния света. Такой рассеянный световой сигнал, как правило, в миллионы раз слабее исходного, однако с появлением в последние годы мощных лазеров и высокочувствительных фотоэлектрических детекторов стало возможным получать детальные сведения о молекулярном строении практически любых веществ.

Решить эту задачу помогает и активное развитие компьютерных технологий, позволяющих создавать базы данных эталонных спектров и разрабатывать алгоритмы сравнения и распознавания элементов спектра.

Области практического применения метода рамановской спектроскопии очень разнообразны. Главным образом, это контроль качества продукции, прежде всего фармацевтической и химической (нефтехимической) промышленности. Если использовать микродобавки специализированных маркеров, можно закодировать и впоследствии точно идентифицировать номер партии и дату выпуска продукта. Метод успешно используется в криминалистике, ювелирном деле, применяется для экологического мониторинга – контроля вредных примесей в воздухе, воде, почве, а также в сельскохозяйственной продукции. Востребован метод и в современной медицине. Так, вскоре с его помощью можно будет диагностировать заболевания на основе дистанционного анализа маркеров крови в организме, т.е. без взятия клинической пробы.

Сегодня существует ряд молекулярных анализаторов отечественного и зарубежного производства, основанных на методе рамановской спектроскопии. Обычно они представляют собой лабораторные спектрометры со встроенным источником монохроматического излучения. Для оборудования такого типа характерна большая точность измерений, однако у него есть существенный недостаток: чтобы идентифицировать спектральный сигнал, данные передают на внешний компьютер, который должен их интерпретировать и привести к формату базы данных для последующего сравнения. Из-за задержки, вызванной неавтономностью анализатора, эти приборы не могут работать в режиме реального времени, кроме того, они очень громоздки.

Что касается портативных устройств со встроенным дополнительным оборудованием, то число их невелико, к тому же большинство из них используют метод инфра-

Ключевые слова: портативный рамановский спектрометр, комбинационное рассеяние света, бесконтактная идентификация, анализ веществ сквозь упаковку.
Key words: portable Raman spectrometer, Raman scattering, contactless recognition of substances, chemical identification through walls of bags



С помощью нового оптического прибора можно быстро и точно определять химический состав вещества даже сквозь упаковку. На фото – Д. А. Гаврилов, один из создателей прибора, демонстрирует его возможности на выставке «РусНаноТех-2010» (Москва)

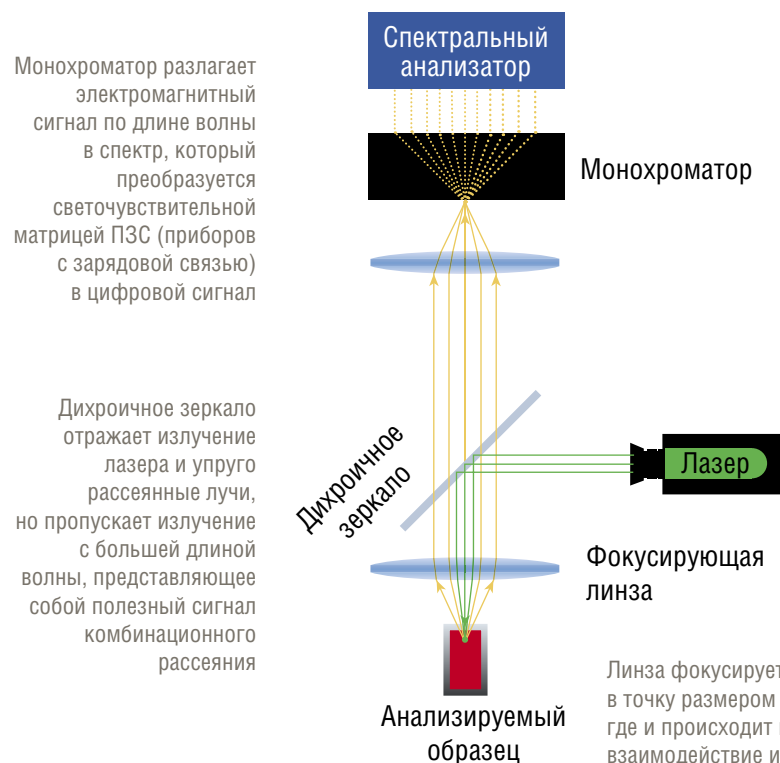
красной спектроскопии поглощения, при котором, как правило, требуется предварительная обработка вещества. Предназначены они в основном для решения узкого круга задач, например для контроля продукции на точное соответствие эталону. Однако для определения неизвестных компонентов смеси веществ такие устройства не годятся. Кроме того, использование подобной аппаратуры химического контроля сдерживается высокой розничной ценой: сегодня она исчисляется многими сотнями тысяч рублей (минимальная цена портативного устройства – 400 тыс. руб.).

Портативный молекулярный анализатор, разработанный в Московском физико-техническом институте при содействии Института точной механики и вычислительной техники РАН, полностью автономен. В качестве встроенного источника излучения используется относительно недорогой полупроводниковый лазер. Такие лазеры миниатюрны, поэтому прибор получился очень компактным. Избавиться от лишнего веса помогли и другие особенности конструкции прибора, например использование дихроичного зеркала. Несмотря на

СПЕКТР-«ОТПЕЧАТОК»

Явление упругого (рэлеевского) рассеяния света на молекулах вещества известно давно, энергия квантов и длина волны при этом виде рассеяния не меняются. А в начале XX в. был открыт эффект неупругого взаимодействия светового кванта с молекулой, когда она поглощает часть его энергии.

Величина «отобранной» у кванта энергии не является произвольной: она равна разности между двумя различными энергетическими уровнями состояния молекулы. Таким образом в спектре рассеяния монохроматического излучения помимо основной линии на длине волны источника появляются более слабые дополнительные линии, сдвинутые в длинноволновую область спектра. Поскольку каждое вещество имеет свой специфический набор энергетических уровней, получившийся спектр комбинационного рассеяния уникален. Такой своеобразный «отпечаток пальца» можно снять практически со всех органических и неорганических химических соединений в любом агрегатном состоянии



В новом портативном рамановском спектрометре специальной конструкции одно и то же дихроичное зеркало используется как для направления лазерного луча на анализируемый объект, так и для последующего «отсечения» упруго рассеянных световых лучей. Монохроматор, от которого зависит ширина регистрируемого спектрального диапазона, имеет оптимальные размеры, обеспечивающие компактность прибора и хорошую разрешающую способность. Слева – принципиальная схема устройства прибора

Полупроводниковый лазер генерирует монохроматический свет

Линза фокусирует световой пучок в точку размером менее 1 мкм, где и происходит наиболее интенсивное взаимодействие излучения с веществом. Эта точка является и центром ответного сигнала рассеяния

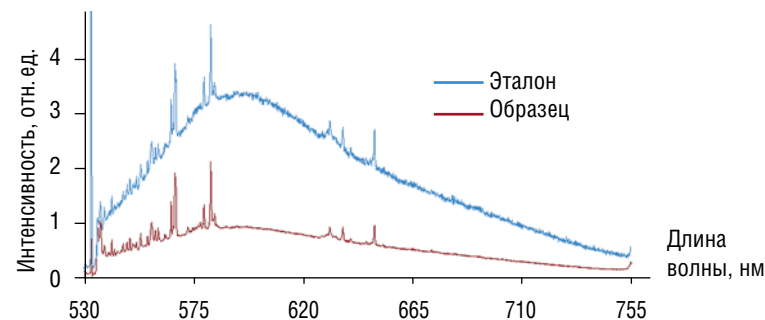
компактность прибора, его спектральное разрешение позволяет безошибочно распознавать большинство представляющих интерес химических соединений.

В качестве эталонов используются спектры, полученные на прецизионном оборудовании. Однако точность оптической идентификации веществ во многом зависит от алгоритмов компьютерной обработки сигнала. В новом приборе применяется алгоритм распознавания, основанный на так называемом *вейвлет-анализе* – разложении спектра по специальным непериодическим базисным функциям, ограниченным по амплитуде и частоте. Этот способ обработки данных реализован в специализированном вычислительном устройстве, встроенном непосредственно в прибор, что позволило радикально сократить время идентификации.

Испытания прототипа нового прибора были успешно проведены в лабораторных условиях при различном освещении: двух вариантах искусственного освещения, дневном уличном свете, а также в темной комнате. Длительность полного аналитического цикла при этом составила менее 2 секунд.

Конкурентные преимущества нового молекулярного анализатора с красноречивым названием *LightProbe* очевидны. Он по-настоящему компактен – его масса со всем встроенным оборудованием составляет всего 1,9 кг (из коммерческих устройств близкий вес имеет только американский *EnSpectr R532*, но он требует подключения к компьютеру). Что касается стоимости нового устройства, то она на порядок ниже рыночных аналогов. Предполагается, что даже при изготовлении по индивидуальному заказу его цена едва ли будет превышать 70 тыс. руб. В условиях же мелкосерийного производства она может быть существенно ниже.

До сих пор речь шла об универсальном анализаторе. Однако на его основе можно делать более простые устройства, предназначенные для идентификации веществ из интересующей потребителя группы, например лекарственных препаратов. При серийном производстве стоимость таких приборов составит около 25 тыс. руб. Для сравнения: анализатор *TruScan* американской компании «Ahuja» – один из лидеров среди портативных устройств и ближайший конкурент *LightProbe* – в 50 раз дороже.



Максимум за 2 секунды встроенное программное обеспечение молекулярного анализатора *LightProbe* (вверху) сравнит спектр, снятый с анализируемого образца, с эталонными записями. Слева – спектр образца лекарственного препарата бисептол

Достоинства нового прибора позволяют рассчитывать на его внедрение во многие сферы человеческой деятельности. Благодаря оригинальным аппаратным и программно-алгоритмическим решениям он может идентифицировать вещества в реальном времени, и в этом смысле речь идет о совершенствовании так называемых «систем технического зрения». Если сейчас робототехнические устройства способны на расстоянии выполнять визуальный анализ объектов (измерение габаритов, топологии, анализ цветности и т. п.), то в будущем «одним взглядом» смогут определять их качественный и количественный химический состав.

Дополнительные перспективы практического применения открывает возможность проводить анализ веществ, находящихся в прозрачной стеклянной или пластиковой упаковке. Например, можно построить систему неразрушающего производственного контроля, которая позволит рассортировать изготовленную продукцию непосредственно на конвейере. Кроме того, благодаря портативности и быстрдействию прибор идеально подходит и для работы в полевых условиях.

Д. А. Гаврилов, Т. С. Гаврилова (Московский физико-технический институт, Долгопрудный), к. т. н. Н. Б. Преображенский (Институт точной механики и вычислительной техники им. С. А. Лебедева РАН, Москва)

Литература
Гаврилов Д. А., Леус А. В., Гаврилова Т. С. Применение портативного рамановского спектрометра «Око» в системах безопасности // *T-Comm – телекоммуникации и транспорт*, 2011. № 1. С. 35–37.

Гигантское комбинационное рассеяние / Под ред. Р. Ченга, Т. Фуртака. М.: Мир, 1984.

В публикации использованы фото А. Дуковского (МФТИ, Москва)