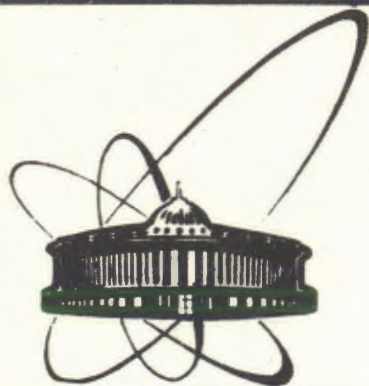


89-223



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

C 98

P10-89-223

З.Сюч, З.Иллеш, Й.Молнар

**ОБРАБОТКА РАДИОАНАЛИТИЧЕСКИХ ДАННЫХ  
НА ОСНОВЕ ПЕРСОНАЛЬНОГО КОМПЬЮТЕРА  
COMMODORE C-64**

Направлено в журнал "Приборы и техника  
эксперимента"

**1989**

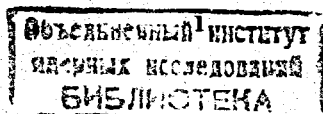
## ВВЕДЕНИЕ

Работу с короткоживущим изотопом - таким, как  $\text{At}(211)$ , - всегда приходится проводить довольно быстро, поэтому вся обработка полученных данных обычно откладывается на более свободное время. Запись данных эксперимента вручную отнимает много времени и внимания. Большую помощь в этом случае может оказать персональный компьютер (ПК), регистрируя и даже обрабатывая данные в течение эксперимента. Разработанная нами система, включающая ПК COMMODORE C-64, позволяет собирать, хранить и обрабатывать данные, получаемые от сцинтилляционных детекторов, применяемых нами в качестве регистрирующих устройств при проведении исследований по химии астата.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Разработка методов синтеза новых соединений связана с выбором способа анализа продуктов. Поскольку астат - элемент, получаемый только в ультрамикроколичествах, то следить за его поведением, используя обычные методы химического анализа, невозможно. Астат регистрируют по его радиоактивности, строя эксперимент таким образом, чтобы детектирование исходного и конечного продукта проводилось в идентичных условиях. Например, синтез органических соединений астата строят по следующей схеме:

Предварительно подбирают наиболее благоприятные условия введения астата в органическую молекулу - температуру, время, pH-среды, объем и концентрацию реагентов. Используют операции растворения, упаривания, экстракции, отбора аликвотных объемов и очистки получаемого продукта на жидкостном хроматографе под высоким давлением (HPLC). Для определения химического выхода собирают фракцию очищенного на HPLC продукта, измеряют ее радиоактивность обычно на сцинтилляционном счетчике, и в таком же объеме и таком растворителе, как элент, измеряют активность аликвотного количества исходного препарата. Привлечение ПК на данном этапе позволит оптимизировать процесс поиска условий синтеза - прогнозируя по первым нескольким экспериментам направление в выборе параметров. Даст возможность подобрать наиболее подходящую смесь элюирующего раствора, обычно состоящую из 2-3 компонентов. И, наконец, поможет в определении химического выхода продукта астатирования органической молекулы, и, проводя соответствующую математическую обработку, выдаст все это в виде таблицы.



При проведении исследований по изучению химических свойств полученных органических соединений астата с помощью ПК можно полностью автоматизировать процесс анализа и обработки получаемых данных.

## АППАРАТУРНО-ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС

### 1. АППАРАТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ КОМПЛЕКСА

Аппаратурно-программный комплекс на основе ПК типа COMMODORE C-64 предназначен для накопления и обработки данных с двух отдельных одноканальных амплитудных анализаторов импульсов со сцинтилляционными детекторами. В данном комплексе один из анализаторов осуществляет общие измерения <SCA>, а другой — специальные, в системе <HPLC>.

Блок-схема аппаратурно-программного комплекса приведена на рис. 1.

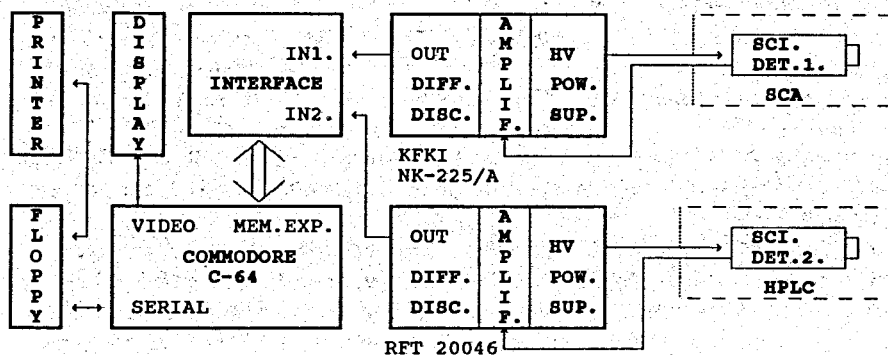


Рис. 1. Функциональная схема комплекса

Одноканальные анализаторы <KFKI NK-225/A>, <RFT 20046>, обрабатывающие сигналы со сцинтилляционных детекторов <SCI. DET. 1>, <SCI. DET. 2>, являются фирменными приборами [1,2]. Каждый анализатор содержит блок питания высокого напряжения, усилитель, дифференциальный дискриминатор, счетчик, дисплей, таймер и блок управления для ручного режима.

Сигналы с дифференциальных дискриминаторов через интерфейс <INTERFACE> поступают в компьютер. Интерфейс имеет 16-разрядный двоичный счетчик, который в режиме START-STOP принимает сигналы с

выбранного анализатора и обрабатывает данные с помощью управляющей программы.

Одной из важных частей комплекса является персональный компьютер типа COMMODORE C-64 [3]. Его конфигурация состоит из дисплея или цветного телевизора, принтера и одного или двух дисководов. Одноплатный компьютер C-64 размещен в одном корпусе с клавиатурой и имеет следующую техническую характеристику:

- ПРОЦЕССОР:.....MOTOROLA 6510, 8 битов, 2 МГц
- ОПЕРАТИВНАЯ ПАМЯТЬ:.....64 кб, динамическая
- ВИДЕО-ПАМЯТЬ:.....графическая, цветная
- ДОС:.....внутренний, БЕЙСИК транслятор
- ВВОДЫ/ВЫВОДЫ:.....последовательный, параллельный

Внешнее устройство через многоконтактный разъем <MEM. EXP.> подключается к шине компьютера, которая состоит из адресов <A0-A15>, данных <D0-D7>, управляющих сигналов <R/W, IO1, IO2, DRQ, IRQ...> и линии питания <+5V>.

Блок-схема интерфейса разработана для связи между компьютером COMMODORE C-64 и одноканальными амплитудными анализаторами импульсов и изображена на рис. 2.

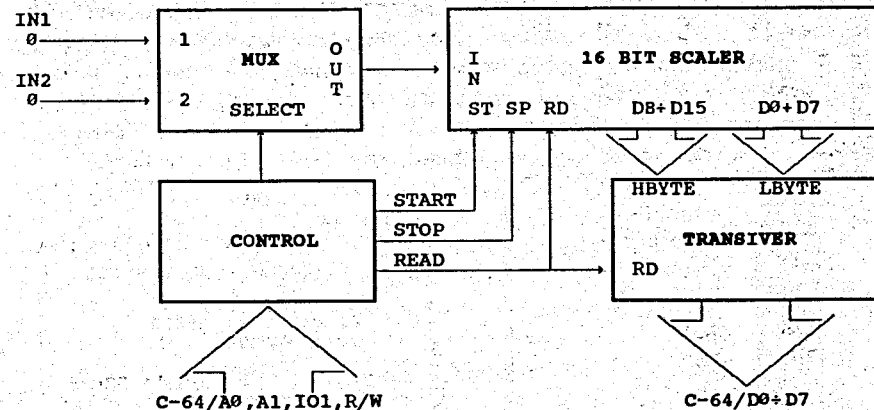


Рис. 2. Блок-схема интерфейса

Интерфейс принимает сигналы с одной из систем <SCA>, или <HPLC>, которые подключаются к входам <IN1>, <IN2> с помощью мультиплексора <MUX> и управляющей программы.

По команде <START> счетчик <16 BIT SCALER> сбрасывается, и

начинается накопление данных. По команде <STOP> цикл накопления оканчивается, и происходит считывание <READ> младших <LBYTE> и старших <HBYTE> байтов. В начале следующей команды <START> счетчик сбрасывается, и начинается новый цикл измерения. Количество циклов измерения задается программным путем. Емкость счетчика интерфейса равна 65535 событий, ее нельзя превышать в одном цикле измерения. Поэтому программа выбирает длительность цикла в соответствии с интенсивностью источника.

Интерфейс имеет следующие функции, адреса которых показаны ниже:

-<SCA> измерение:	OUT&H300.0
-<HPLC> измерение:	OUT&H301.0
-<START>:	INP(&H300)
-<STOP>:	INP(&H301)
-<LBYTE> считывание:	INP(&H302)
-<HBYTE> считывание:	INP(&H303)

## II. ПРОГРАММНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ КОМПЛЕКСА

Для измерения, накопления и обработки данных на ПК разработан комплекс программ SZIM, обеспечивающий управление системой для радиохимических анализов. Набор команд написан на основе SIMON'S BASIC с дополнительными операторами ассемблера [4]. Интерактивная связь между компьютером и пользователем не требует знания программирования, достаточно использовать управляющие кнопки, выбрать операцию и ответить на вопросы программы, как это видно на рис. 3.:

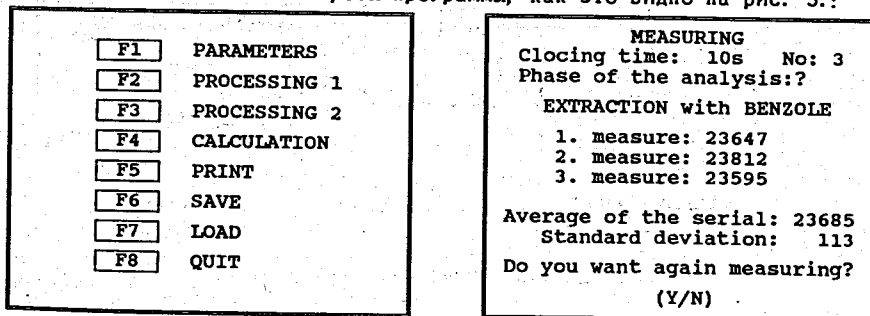


Рис. 3. Интерактивная связь экспериментатора с ПК.

Программа предоставляет следующие виды обслуживания:

PARAMETERS: выбор параметров измерения, обозначение условий проводимого синтеза;

PROCESSING1: измерение пробы с помощью <SCA>, полученной в результате данного химического взаимодействия, передача результатов со Средним Квадратным Отклонением (СКО) на Виртуальный Экран (ВЭ);

PROCESSING2: отдельный набор команд в программе для снятия хроматограммы с <HPLC>, ее калибровка и обработка;

CALCULATION: обработка измеренных с помощью <SCA> данных, с сохранением на ВЭ, при использовании Действия Арифметики (ДА);

PRINT: расчет химического выхода, с СКО;

SAVE: распечатка полученных результатов и параметров синтеза;

LOAD: запись информации из памяти ПК на дискетку;

QUIT: загрузка данных с дискетки в память ПК;

QUIT: выход из программы;

Набор <PROCESSING2> тоже разделен на следующие подпрограммы

PARAMETERS: выбор параметров хроматографической очистки;

CHROMATOGRAM: снятие хроматограммы с возможностью выбора граничного значения числа набранных импульсов, с текущим экраном по X-координате;

CALIBRATION: измерение активности аликвотного объема исходного препарата и активности фракции, содержащей определяемый продукт;

PEAK-SEARCHING: измерение фона хроматограммы и прибора; передача и хранение результатов на ВЭ;

CALCULATION: ручная обработка пиков хроматограммы; передача информации на ВЭ, где представлены номер, положение, площадь, ширина пика и его фон;

PRINT: калибровка и определение выходов по данным на ВЭ с помощью ДА, расчет средне-арифметического с СКО; распечатка содержания ВЭ и хроматограммы с параметрами;

SAVE: запись хроматограммы и калибровки на дискетку;

LOAD: загрузка названных хроматограмм и калибровок с дискетки в память ПК;

QUIT: возвращение в главное меню;

Программа занимает около 25 кбайтов памяти и полностью использует свободную емкость памяти ПК, оставшуюся после загрузки SIMON'S BASIC и управляющей программы. Комплекс программ защищен от ошибок пользователя, периферия постоянно держится под контролем программы. Распечатка выдается в виде протокола, данные сводятся в таблицу, хроматограмма приводится в виде рисунка.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение вычислительной техники увеличивает быстроту и надежность радиохимического анализа при исследовании Аг-содержащих соединений. Оно позволяет проводить измерения и обработку данных в течение эксперимента.

Аппаратурно-программный комплекс построен в радиохимической лаборатории ЛЯП ОИЯИ и успешно эксплуатируется уже в течение 5 месяцев. Описанный комплекс можно подключать не только к HPLC, но и к другим хроматографам и измерительным комплексам.

## ЛИТЕРАТУРА

- 1 KFKI NK-225/A Technical Reference, KFKI, 1980.
- 2 RFT 20046 Technical Reference, RFT, 1980.
- 3 COMMODORE C-64 Technical Reference, Data Becker, 1984.
- 4 Dr Úry László: Commodore-64; Budapest, Akadémiai ny., 1986.

Рукопись поступила в издательский отдел  
31 марта 1989 года.