

PIC mikrokontroller vezérlésű, gyors analóg-digitál konverter szilárd NMR spektrumok szélessávú detektálására

Koczor Bálint, III. évf. Vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

Témavezetők:

Dr. Rohonczy János egyetemi docens

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szervetlen Kémiai Tanszék

NMR mérések során az információt a Zeeman kölcsönhatást perturbáló egyéb, finomabb kölcsönhatások szolgáltatják, melyek irányfüggőek, de az oldatfázisban tapasztalható gyors mozgások miatt kiátlagolódnak, vagy eltűnnek. ^1H mérések esetén a detektálható kölcsönhatások a hangfrekvenciás tartományba esnek, így a spektrum szélessége is mindössze néhány tíz kHz.

Szilárd fázisban a gátolt mozgások következtében a kölcsönhatások nem átlagolódnak ki, ezért a jelek elkenődnek, a spektrum kiszélesedik, MHz-es nagyságrendbe eshet. A spektrum ablak szélességének növelése kulcsprobléma, mely FT NMR esetén az analóg digitál-konverter mintavételezési frekvenciájának növelésével érhető el. Erre a célra szélessávú analóg-digitál konvertereket gyártanak.

Munkám során egy olyan analóg-digitál konverter modult építettem, melynek maximális mintavételezési frekvenciája 10 MHz. Erre azért van szükség, mert a spektrométer gyári elektronikájának ezen paramétere mindössze 100 kHz, mely meglehetősen kis spektrum szélességet biztosít, ami nem teszi lehetővé szélessávú FID-ek detektálását. A modul lehetőséget biztosít túlmintavételezésre is, ami a spektrum jel/zaj arányát javítja. Utóbbi gyorsan relaxáló, kvadrupól magok esetén jelentős szerepet kaphat. Az spektrométer átviteli karakterisztikájának ismeretében egy korrekciós függvénnyel a szélessávú spektrumok frekvencia torzulása korrigálható. A modul építésére csupán néhány, ma már kommersz integrált áramkört használtam, így az építés költsége elhanyagolható volt egy szélessávú ADC árához képest.

Dolgozatomban ismertetem a megvalósítás részleteit, a felmerült problémákat és megoldásukat, alkalmazási példákat és a spektrométer átviteli karakterisztikájának felvételét.