

Norman Herz & Ervan G. Garrison, Geological Methods for Archaeology, NYC, Oxford U Press, 1998. 343 p.

С.К. Панкратов, О.В. Градов
Институт энергетических проблем химической физики им. В.Л. Тальрозе РАН
o.v.gradov@gmail.com

Компьютерный классификатор и база данных для подбора средств ускорительной масс-спектрометрии для геоархеологических и археоминералогических исследований

При датировании и в аутентификации документов и артефактов при археологических исследованиях с использованием радиоуглеродных методик применяются ускорительные масс-спектрометры. В высшей степени оптимальны для работы с многозарядными ионами ускорительные масс-спектрометры на платформах тандемных ускорителей. Предельный ускоряющий потенциал тандемных ускорителей варьирует до 14 МВ, однако во многих лабораториях используют серийно изготавливаемые для масс-спектрометрии ускорители с относительно низким потенциалом порядка 2 МВ. Аппараты подобного рода «заточены» для проведения радиоуглеродных и, реже, тритиевых методов измерений. Существуют и более компактные системы с потенциалом до 1 МВ, такие как Цюрихский ускорительный масс-спектрометр с потенциалом 200 кВ. Метрология ускорительной масс-спектрометрии удовлетворительна не только для радиоуглеродного и тритиевого, но и для бериллиевого, алюминиевого, кальциевого, йодного и иных методов. [Левченко и др., 2006].

Между тем, метрологические характеристики ускорительных масс-спектрометров зависят от технических характеристик используемых ускорителей и имеет место прямая зависимость между дескрипторами масс и величиной напряженности поля. В связи с этим существует потребность в создании программного обеспечения и баз данных для выбора ускорительных масс-спектрометров под конкретные задачи, исходя из метрологических и археохронографических предпосылок, сводящаяся в конечном итоге к задаче многокритериальной оптимизации при выборе ускорителя, положенного в основу масс-спектрометра. Актуальность этой задачи можно подтвердить наличием ряда статей, в которых осуществляется сопоставление метрологических характеристик ускорительных масс-спектрометров через свойства используемых ускорителей [Young et al., 2008], а также сопоставление ускорительной масс-спектрометрии с другими методами [Warwick et al., 2009].

Нами создан программный продукт, классифицирующий ускорители, пригодные для этих целей и предлагающий выбор ускорителей, а, следовательно, ускорительных масс-спектрометров под задачи пользователя. Инициировано создание удаленной базы данных, предназначенной для этих целей, которую планируется разместить в Интернете по адресу: <http://accelerator-ms.3dn.ru/>. Разработанная система классификации ускорителей основана на принципах действия и диапазонах кинетических энергий. В качестве условных реперов диапазонов кинетических энергий (при условии соответствия принципов действия и типов ускоряемых частиц) предложено

использовать названия соответствующих ускорителей из общей физической практики. Так, для комплексов типа Цюрихского ускорительного масс-спектрометра с потенциалом от десятков до нескольких сотен кВ используется суррогатный ключ KEVATRON; соответствующей технике масс-спектрометрии при нахождении в базе данных статей с положительным откликом по маске «kV» присваивается технологическое описание и отнесение к классификационной единице «кэватронная масс-спектрометрия». Возможно отнесение при поиске по маскам «МэВ» и далее к другим классифицирующим единицам, начиная с MEVATRON, и внесение на страницу классификатора «мэватронная масс-спектрометрия» и далее.

Более сложную задачу (если в тексте статьи не оговариваем принцип или не указан точно характер использовавшегося аппарата) представляет различение комплексов не по потенциалу или кинетической энергии, а по принципу действия, что актуально для разных тандемных ускорителей. Для поиска по маске доступно использование отбраковываемых критериев: скажем, при сканировании загруженного массива PDF статей отбраковываемые работы, где, несмотря на то, что встречаются фрагменты по маске «масс» и «спектры» или «масс» и «спектрометрия» без прямой связи друг с другом, встречаются не подходящие по критерию использования в масс-спектрометрии типы ускорителей. Вследствие этого база данных при автоматическом заполнении не будет содержать страниц «синхрофазотронная масс-спектрометрия», «тэватронная / бэватронная / зэватронная масс-спектрометрия» или «космотронная масс-спектрометрия» (на соответствующих языках поиска). Более того, по принципам поиска можно ввести запрещенные типы ускорителей, на которых в принципе нереализуемо построение масс-спектрометров, чтобы отключить «ложноположительные» результаты при контент-анализе. Последняя функция сработает при использовании графы «without the word» в интерфейсе.

Поиск по маске «***tron» и «mass» «spectrometry» при применении опции «with all of the words» может выдавать ложноположительный результат также за счет нахождения статей радиоэлектронного профиля: ignitron, dekatron, klystron, gyrotron, quantron – проходят по маске с 4-мя переменными; trigatron, selectron, thyatron, amplitron, magnetron – с 5-ю; mechanotron, platinotron, stabilotron – с 7-ю (где «*» – варианта, переменная). Возможна фильтрация по UDC (УДК), PACS и другим кодификаторам, но в данном случае появляются ложноотрицательные результаты, обусловленные публикацией статей по ускорительной масс-спектрометрии в радиофизических, физико-методических и электронно-технических журналах: они будут выпадать из общего множества, порождая его диагностическую неполноту. Для этого сейчас используется графа «without the words», в которую вводятся слова, которые следует игнорировать. За прототип поисковой системы (точнее – ее интерфейса) принят освоенный научными работниками интерфейс «Springer», что упрощает работу с базой данных и ресурсом в целом.

Второй «метрологической» характеристикой, заложенной (в большинстве случаев – закладываемой вручную после автоматической сортировки статей) в инструментарий БД, является анализ порядка величин предельных измерений. В наиболее оптимальном случае это производится автоматически при сканировании названий и абстрактов статей. Так, на данный момент, предельными для разных случаев анализа и, следовательно, датирования можно считать уже не фемтомолярный [Salehpour et al.; DeGregorio et al., 2006] и аттомолярный [Dingley et al., 1998, Vogel et al., 2001], а субаттомолярный [Salehpour et al., 2001] и зептомолярный [Salehpour et al., 2008, Barker et al., 1999] уровень, что соответствует чувствительности на атомарном уровне и вписывается в

тренд «accelerator mass spectrometry-isotope measurements at the level of the atom» [Barker et al., 1999]. Для геоархеологии и археологической минералогии исследования на атомном уровне дают принципиально новый пласт материала для теоретического анализа, так как на уровне изотопии одиночных атомов представляется возможность проследить перенос в биосфере и ноосфере (оперируя терминологией и понятийным аппаратом В.И. Вернадского) специфичных для конкретных локальных природных и культурных формаций изотопных форм и произвести трассирование культурных градиентов и траекторий переноса тех или иных изделий по изотопии с высокой точностью. Вследствие этого, логично полагать, что предлагаемый подход и формируемая база данных позволяют не только чисто технически осуществлять поиск и систематизацию тех или иных данных, но и сформировать базис для новых направлений геоархеологии и археоминералогии. В дальней перспективе, согласно форсайт-анализу, проведенному с использованием созданных нами программных средств и с построением графов с целью реконструкции недостающих логических звеньев «дерева науки» можно будет, в частности, говорить об:

I. «атомной геоархеологии» как науке о биогенной миграции атомов под действием человека как биологического существа на этапах антропогенеза и человека же как источника антропогенного воздействия, при котором в биосфере резко ускоряется миграция атомов по сравнению с естественными биогеохимическими процессами, на стадиях культурного генеза (в т.ч. – в «ноосфере», если считать правомочным этот термин в данном случае) и «доместицирующего шифтинга» циклов миграции;

II. «атомной археоминералогии» как атомной минералогии техногенеза с элементами кристаллографического анализа, анализа изотопии замещения одиночных атомных кластеров и изоморфных кристаллических структур при культурном переносе;

III. «субмолекулярной геоархеологии» как науке о перестройке субмолекулярных или, точнее, низкоатомных структур в ходе исторического времени (в том числе после прекращения физической используемости или физической жизни источника этого образца), что концептуально балансирует между тафономией, заимствованной из палеонтологии, и хорошо известным подходом субмолекулярной биологии Сент-Дьердьи, экстраполированным с живого вещества на косное и биокосное, которое было преобразовано «геологической силой» (которой становится, по Вернадскому, человечество с тех пор, как начинает производить культурные артефакты);

IV. «магнитно-изотопной археоминералогии» как методической дисциплины, задачей которой будет являться установление изотопии источников в археометаллографии и палеометаллургии, а также везде, где критериями отличия контроля и образца на стадии аутентификации и верификации происхождения артефакта и при датировке являются изотопные пары-тройки типа $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$, $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}/^{30}\text{Si}$, $^{32}\text{S}/^{33}\text{S}/^{34}\text{S}$, $^{72}\text{Ge}/^{73}\text{Ge}$, $^{199,201}\text{Hg}/^{200,202}\text{Hg}$, $^{24}\text{Mg}/^{25}\text{Mg}/^{26}\text{Mg}$, $^{235}\text{U}/^{238}\text{U}$, $^{117}\text{Sn}/^{119}\text{Sn}$ – в общем случае при фракционировании ядер по магнитным моментам в реакциях, запрещенных по электронному спину (в том числе – на радиоиндуцируемом магнитном изотопном эффекте), что часто встречается в естественно-исторических условиях;

V. «субатомной / спиновой археоминералогии», родственной с магнитно-изотопной в физическом аспекте, но позволяющей спуститься глубже за счет возможностей её углубленного изучения с использованием установок на базе ускорительных масс-спектрометров, позволяющих исследовать одиночные квантовые состояния частиц в атомах, в частности, регистрируя срабатывание принципа запрета

Паули по спине на существенно ультрамикроскопических дозах вещества, что важно в неразрушающем анализе исторических образцов;

VI. «фермионной геоархеологии», объединяющей эффекты и зоны анализа указанных выше двух направлений (IV, V), но включающей также возможность исследования на интродуцируемых в образец искусственных изотопов с позитронной эмиссией / распадом, после чего становится возможным анализ методами PET – позитронно-эмиссионной / двухфотонной эмиссионной томографии в пределах их времен распада с визуализацией распределения реагирующего изотопа в образце.

К сожалению, в силу ограничения списка цитируемой литературы 10-ю позициями, авторы не могут привести полный спектр требующей цитирования литературы, однако же, следует полагать, что она будет доступна для цитирования в виде ВІВТЕХ после доводки базы данных и вывешивания ее в сетевом доступе. Развитие вышеуказанных направлений ограничивается диапазоном прогностики форсайта по технике на ближайшие десятилетия.

Литература

Левченко В.А., Смит А.М., Зонни У., Куя Х. УМС – движущая сила современных радиоуглеродных исследований, С. 442–462 // Прил. к: Вагнер Г.А. Научные методы датирования в геологии, археологии и истории. М., Техносфера, 2006, 576 с.

Young G.C., Corless S., Felgate C.C., Colthup P.V. Comparison of a 250 kV single-stage accelerator mass spectrometer with a 5 MV tandem accelerator mass spectrometer—fitness for purpose in bioanalysis // *Rap. Comm. Mass Spectrom.*, 22(24). 2008. Pp. 4035–4042.

Warwick P.E., Croudace I.W., Hillegonds D.J. Effective determination of the long-lived nuclide ^{41}Ca in nuclear reactor bioshield concretes: comparison of liquid scintillation counting and accelerator mass spectrometry // *Anal. Chem.*, 81(5). 2009. Pp. 1901–1906.

Salehpour M., Forsgard N., Possnert G. FemtoMolar measurements using accelerator mass spectrometry // *Rap. Com. Mass Spectrom.*, 23(5). 2009. Pp. 557–563.

DeGregorio M.W., Dingley K.H., Wurz G.T., Ubick E., Turteltaub K.W. Accelerator mass spectrometry allows for cellular quantification of doxorubicin at femtomolar concentrations // *Can. Chem. Pharm.*, 57(3), 2006. Pp. 335–342.

Dingley K.H., Roberts M.L., Velsko C.A., Turteltaub K.W. Attomole detection of ^3H in biological samples using accelerator mass spectrometry: application in low-dose, dual-isotope tracer studies in conjunction with ^{14}C accelerator mass spectrometry // *Chem. Res. Tox.*, 11(10). 1998. Pp.1217–1222.

Vogel J.S., Grant P.G., Buchholz B.A., Dingley K., Turteltaub K.W. Attomole quantitation of protein separations with accelerator mass spectrometry // *Electrophoresis*, 22(10). 2001. Pp. 2037–2045.

Salehpour M., Possnert G., Bryhni H. Subattomole sensitivity in biological accelerator mass spectrometry // *Anal. Chem.*, 80(10). 2008. Pp. 3515–3521.

Salehpour M. FemtoMolar and zeptomole sensitivity in Biological Accelerator Mass Spectrometry // *BIO-Ångström*, 2008. Pp. 19, 45.

Barker J., Garner R.C. Biomedical applications of accelerator mass spectrometry-isotope measurements at the level of the atom // *Rap. Comm. Mass Spectrom.*, 13(4). 1999. Pp. 285–293.