

0.1. Ващенко П.В., Лабусов В.А. Алгоритм обработки атомно-абсорбционных спектров с непрерывным источником излучения

Атомно-абсорбционная спектрометрия (ААС) — метод аналитической химии, основанный на резонансном поглощении света свободными атомами, возникающем при пропускании излучения через слой атомного пара. Традиционный метод ААС имеет весьма низкую производительность, т.к. определение концентрации элементов таблицы Менделеева в веществе проводится последовательно. Для определения каждого элемента используется своя лампа с полым катодом, имеющая линии этого элемента. Определение некоторых элементов не возможно из-за отсутствия соответствующих ламп. Использование источника непрерывного спектра, например, дейтериевой лампы, и многоканального спектрометра позволяет получать спектр поглощения в широкой спектральной области и проводить определение всех необходимых элементов одновременно.

В докладе предложен алгоритм обработки последовательностей атомно-абсорбционных спектров во времени, зарегистрированных с помощью спектрометра «Колибри-2» [1] с анализатором МАЭС [2], электротермического атомизатора и дейтериевой лампы с непрерывным спектром в качестве источника излучения. Цель работы алгоритма — расчёт аналитического сигнала, равного интегралу линии поглощения по длине волны и времени, для определяемого элемента с минимальными пределами обнаружения.

Данный алгоритм был основан на нескольких этапах работы. Неселективное поглощение и излучение в зарегистрированном спектре приводит к существенной погрешности измерения аналитического сигнала даже в случае высоких концентраций определяемых элементов. Поэтому на первом этапе был рассчитан спектральный фон с помощью маскирования спектральных линий за счет известной оценки шума линейки фотодиодов [3] и аппроксимации участка спектра полиномом заданной степени. На втором этапе были найдены границы интегрирования линии поглощения, т.к. при низких концентрациях определяемого элемента амплитуда линии может быть сравнима или даже существенно меньше спектрального шума.

В настоящее время разработанный алгоритм внедряется в программное обеспечение «Атом» [4].

лов методом пламенной фотометрии // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 2007. — Т. 73, № 5, С. 35–39.

- [2] ЛАБУСОВ В.А., ГАРАНИН В.Г., ШЕЛПАКОВА И.Р. Многоканальные анализаторы атомно-эмиссионных спектров. Современное состояние и аналитические возможности // Журнал аналитической химии. — 2012. — Т. 67, № 7, С. 697–707.
- [3] БАБИН С.А., ЛАБУСОВ В.А. Оценка оптимальных параметров многоэлементных твердотельных детекторов для сцинтилляционного атомно-эмиссионного спектрального анализа // Аналитика и контроль. — 2014. — Т. 18, № 1, С. 40–49.
- [4] ГАРАНИН В.Г., НЕКЛУДОВ О.А., ПЕТРОЧЕНКО Д.В., СЕМЁНОВ З.В., ПАНКРАТОВ С.В., ВАЩЕНКО П.В. Программное обеспечение атомно-эмиссионного спектрального анализа. Программа «Атом» // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 2015. — Т. 81, № 1–II, С. 121–127.

Список литературы

- [1] ЛАБУСОВ В.А., ПУТЬМАКОВ А.Н., САУШКИН М.С., ЗАРУБИН И.А., СЕЛЮНИН Д.О. Многоканальный спектрометр «Колибри-2» и его использование для одновременного определения щелочных и щелочноземельных метал-