

Vyhodnotenie prvkového zloženia vybraných vzoriek metódou CFLIBS

Stanislava Šarišská, Zuzana Grolmusová, Pavel Veis

Katedra experimentálnej fyziky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava
stanislavass@gmail.com

LIBS je akronymom z *laserinduced breakdown spectroscopy*, po slovensky spektroskopia laserom indukovanej iskry. Táto metóda je jednou z mnohých atómových emisných spektroskopii. Medzi jej výhody patrí univerzálnosť, rýchlosť a šetrnosť k vzorke. Je možné jej kvalitatívne alebo kvantitatívne vyhodnotenie.

Pri kvantitatívnom hodnotení je možné použiť kalibračný aj bezkalibračný (CF-LIBS) prístup. LIBS je silne ovplyvnená matricovým efektom, preto kalibračné hodnotenie nie je vždy možné. CF-LIBS sa používa napríklad pri vzorkách, ktorých zloženie nie je dopredu známe, alebo je náročné získať kalibračné vzorky. Využitie nachádza pri skúmaní archeologických vzoriek [1], rôznych zliatin [2], umeleckých diel [3] ako aj biologických vzoriek [4]. Keďže našim cieľom je zisťovať kvantitatívne prvkové zastúpenie biologických materiálov, pri ktorých je náročné získať kalibračné vzorky, zamerali sme sa práve na CFLIBS.

CFLIBS je založená na určení zastúpenia jednotlivých prvkov pomocou Saha-Boltzmannových diagramov. V rámci diplomovej práce sme vyvinuli program v jazyku Java, v ktorom je implementované vyhodnocovanie spracovaného spektra metódou CFLIBS. Vstupným súborom do programu je súbor s potrebnými parametrami spektrálnych čiar a koncentrácia elektrónov. Výstupom sú Saha-Boltzmannove diagramy, teplota elektrónov a zastúpenie prvkov vo vzorke. Program sme otestovali na vzorkách so známou koncentráciou.

Použili sme dve vzorky – vzduch a metalické pásiky. Výsledky zodpovedali udávanej koncentrácii vzoriek s presnosťou typickou pre použitú metódu. Chyba presnosti /accuracy error/ podľa [5] pre naše výsledky bola okolo 5 %.

Nepresnosti mohli byť spôsobené viacerými faktormi. Ovplyvnenie niektorých použitých čiar samoabsorpciou, spôsobom výpočtov plochy spektrálnej čiary (fitovanie), štatistickými fluktuáciami použitých koeficientov, geometriou experimentálnej aparatury a stochastickou tvorbou iskry. Bodový charakter metódy môže byť zodpovedný za chyby, ktorých pôvod je v prípadnej nehomogenite vzoriek (napr. u metalických pásikov).

Prvotné testovanie nového programu na vyhodnocovanie prvkového zloženia bolo úspešné pri použitých vzorkách. Je však potrebné ďalšie testovanie algoritmu na iných materiáloch.

[1] Burakov, Raikov, Quantitative analysis of alloys and glasses by a calibration-free method using laserinduced breakdown spectroscopy, In *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, **2007**, 62, 217–223.

[2] Herrera, Tognoni, Smith, Omenetto, Winefordner, Semi-quantitative analysis of metal alloys, brass and soil samples by calibration-free laser-induced breakdown spectroscopy: recent results and considerations, *J. Anal. At. Spectrom.*, **2009**, 24, 413–425.

[3] Borgia, Burgio, Corsi, Fantoni, Palleschi, Salvetti, Squarcialupi, Tognoni, Self-calibrated quantitative elemental analysis by laser-induced plasma spectroscopy: application to pigment analysis, *J. Cult. Heritage*, **2000**, 1, S281–S286.

[4] Corsi, Cristoforetti, Hidalgo, Application of laser-induced breakdown spectroscopy technique to hair tissue mineral analysis, In *Applied optics, Optical Society of America*, **2003**, 42.

[5] Cremers, Radziemski, *Handbook of Laser-induced breakdown spectroscopy*, John Wiley 7 Son, Ltd., The Atrium, Southern Gate, Chichester, England, **2006**.