разработка и применение Новых алгоритмов обработки информации для программного обеспечения современных АТОМНО-эмиссионных спектрометров на примере исследования сталей и сплавов [[1]](#footnote-1)\*)

1Попова А.Н., 2Сухомлинов В.С., 1Мустафаев А.С.

1Санкт-Петербургский Горный университет, Санкт-Петербург, Россия,
 popova\_an@pers.spmi.ru
2Санкт-Петербургский Государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Аналитическая методика АЭСА позволяет выбирать и учитывать определенные параметры системы возбуждения спектра, системы регистрации, набора аналитических линий и т.д. Для каждого спектрометра применяется индивидуальный комплект градуировочных кривых, полученных путем исследования стандартных образцов, значения массовых долей примесей которых аттестованы. Фоновое излучение плазмы (не зависящее от концентрации данного примесного элемента), динамический диапазон ПЗС-приемников и, так называемые, «третьи» элементы [1-4] оказывают влияние на регистрируемую интенсивность спектральной линии исследуемого элемента. Необходимо производить систематическую рекалибровку эмиссионных спектрометров (корректировать градуировочные кривые).

В современном ПО спектрометров нет возможности точно вычислить фоновое излучение плазмы в месте расположения аналитической линии определяемого элемента, что приводит, в том числе, к необходимости калибровки каждого прибора по большому числу образцов. Учет этого излучения особенно важен при исследовании низких концентраций определяемых элементов.

Разработана уникальная методика, позволяющая точно рассчитывать фоновое излучение плазмы в месте расположения аналитической линии элемента, что дает возможность производить экспорт градуировочных кривых в приборах одного типа, применяя всего два образца. Спектры этих образцов используются для определения двух коэффициентов линейного преобразования измеряемых интенсивностей.

Проведено сравнение разработанного алгоритма рекалибровки (с точным учетом фонового излучения плазмы) и общепринятого алгоритма на примере определения концентрации углерода в диапазоне 0,005–0,05% для низко- и среднелегированных сталей по комплектам стандартных ГСО на четырех различных модификациях спектрометров «СПАС». Все построенные по новому алгоритму градуировочные кривые близки к линейным. Разработанный алгоритм позволяет существенно уменьшить среднеквадратическое отклонение при определении низких содержаний примесей в пробах, а также значительно улучшить метрологические характеристики существующей методики.

Литература

1. Мосичев В.И., Николаев Г.И., Калинин Б.Д. Металлы и сплавы. Анализ и исследование. Методы атомной спектроскопии. Атомно-эмиссионный, атомно-абсорбционный и рентгенофлуоресцентный анализ. Том 2. / СПб. НПО Профессионал. в 4 томах. 2006. 716 с.
2. Зайдель А.Н., Островская Г.В., Островский Ю.И. Техника и практика спектроскопии / М. Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1972. - 376 с.
3. Мустафаев А.С., Цыганов А.Б., Добролеж Б.В. Многопроцессорная фотометрическая система спектрального анализа на основе линейных ПЗС-приемников. // Записки Горного института, 2010, т.187, с.98-100.
4. Sukhomlinov V.S.,, Mustafaev A.S.,, Popova A.N.,, Koubaji H. Accounting for the effects of third elements in the emission spectral analysis and construction of global analytical techniques. Journal of Physics: Conference Series, 1384, [012054]. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1384/1/012054
1. \*) [DOI – тезисы на английском](http://www.fpl.gpi.ru/Zvenigorod/XLVIII/Pt/en/GH-Popova_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)