

УДК 543.423

ОБРАБОТКА СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ  
ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ФРАКЦИОННОГО ПОСТУПЛЕНИЯ  
ВЕЩЕСТВА ПРОБЫ В ПЛАЗМУ РАЗРЯДА

К. В. ФРАНЦКЕВИЧ

Государственное научное учреждение  
«ИНСТИТУТ ТЕХНОЛОГИИ МЕТАЛЛОВ НАН БЕЛАРУСИ»  
Могилев, Беларусь

Поступление вещества порошкообразной пробы сложного состава, находящейся в канале угольного электрода в плазму электрического разряда при атомно-эмиссионном спектральном анализе, обычно характеризуется достаточно большой фракционностью. При этом наблюдается существенная неравномерность поступления различных элементов в течение времени исследования. Это объясняется различными свойствами соединений элементов, входящих в состав пробы, и непрерывным протеканием химических реакций с их участием. Исходя из характера процессов, происходящих с веществом пробы при атомно-эмиссионном спектральном анализе, поступление любого из элементов можно охарактеризовать как комбинацию безфракционного и фракционного процессов поступления вещества. Для корректного анализа полученных результатов следует разделять влияние этих процессов на изменение интенсивности спектральных линий элементов во времени.

Безфракционное поступление вещества наблюдается в течение непродолжительного начального промежутка времени с момента зажигания разряда, когда всё вещество пробы ещё не успело нагреться до высокой температуры. В этом случае вещество пробы выносятся в плазму разряда как есть, без разделения на фракции. При таком процессе поступления содержание элементов в плазме будет пропорционально их первоначальной концентрации в веществе пробы, концентрация их в пробе при этом не меняется. В дальнейшем, после расплавления и перемешивания вещества пробы, всё большее влияние начинает оказывать процесс фракционного поступления вещества. При этом скорость поступления элементов в плазму зависит от летучести их соединений, концентрация их в пробе в процессе исследования меняется и мгновенное значение их содержания в плазме соответствует текущей, а не первоначальной их концентрации в веществе пробы.

Для разделения частей интенсивности спектральной линии, обусловленных различными видами процесса поступления, воспользуемся предположением, что для труднолетучего соединения элемента в самом начале процесса поступления вся зарегистрированная интенсивность спектральной линии обусловлена только процессом безфракционного выноса вещества. Можно считать, что зарегистрированное на начальном

этапе изменение интенсивности спектральных линий этого элемента можно распространить на процесс безфракционного поступления всего вещества пробы. Долю вещества пробы, поступившую в плазму разряда за счёт этого процесса, можно оценить по отношению интегральных интенсивностей спектральной линии этого элемента в течение первоначальной стадии процесса и за всё время его поступления. Полученную таким образом величину будем использовать в дальнейшем для разделения долей интенсивности спектральной линии других элементов, обусловленных фракционным и безфракционным процессами поступления вещества пробы.

Для обработки полученной спектральной информации выбираем зависимость интенсивности спектральной линии от времени, характеризующуюся наличием хорошо выраженного первоначального максимума с последующим минимумом с достаточно небольшой интенсивностью (близкой к интенсивности шума). Выделяем участок этой зависимости, на котором определяющим для данного элемента будет безфракционное поступление вещества.

Для каждого зарегистрированного кадра начиная с нулевого и заканчивая последним кадром выделенного участка создаём массив коэффициентов с элементами, вычисляемыми как:

$$\eta_k = \frac{I_k}{I_{\text{int}}},$$

где  $I_k$  – интенсивность выбранной спектральной линии, зарегистрированная в  $k$ -ом кадре;  $I_{\text{int}} = \sum_{i=0}^{N-1} I_i$  – интегральная интенсивность выбранной линии за всё время исследования,  $N$  – количество кадров регистрации спектральной информации.

В дальнейшем производим обработку спектральной информации с использованием полученных коэффициентов для всех используемых линий элементов пробы. Выделение части интенсивности линии, обусловленной фракционным поступлением элемента, осуществляем следующим образом:

$$I_{ak\text{cor}} = I_{ak} - I_{a\text{int}} \cdot \eta_k,$$

где  $I_{ak}$  – зарегистрированная интенсивность линии элемента в  $k$ -ом кадре;

$I_{a\text{int}} = \sum_{i=0}^{N-1} I_{ai}$  – интегральная интенсивность этой линии за всё время исследования.