

Интегрированная система анализа спектров полученных методом ЛИЭС для обеспечения качества измерений

© Шакирянов Инсаф Ильясович, Бахтеев Саит Алиевич,
Смердова Светлана Геннадиевна, Мальцев Артем Сергеевич
и Юсупов*[†] Рафаил Акмалович

Кафедра аналитической химии стандартизации и менеджмента качества.
Казанский национальный исследовательский технологический университет.
ул. К. Маркса, 68. Казань, 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: 917 390 3168. E-mail: yusupovraf@yandex.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: эмиссионная спектрометрия, выделение полезного сигнала, метрологическое обеспечение.

Аннотация

Для обеспечения достоверности расчетов параметров спектров, полученных различными методами в работе создана программа по разложению спектров на Гауссовы компоненты в ручном и автоматическом режимах. Ручной режим используется для определения граничных условий необходимых при определении глобального экстремума. Далее проводится запуск автоматического режима обеспечивающего экспрессность расчетов параметров спектров и определение их метрологических характеристик, отделение значение полезного сигнала от сигналов компонентов, фона и шума. В работе показаны примеры отделения сигнала хрома от сигналов компонентов находящихся справа и слева, также от сигнала фона и учета уровня шума, что позволяет улучшать характеристики анализа. Оптимизация программы с целью определения граничных параметров перебора рассчитываемых параметров и ее робастность отлажена с помощью создания данных аналогичных данным эксперимента методом «складного ножа» или «BUTSTRAP». Обеспечение качества измерений проводится путем интегрирования экспериментальных данных с возможностями программы «СПЕКТР». Программа «СПЕКТР» применяется в качестве базы данных, для метрологического обеспечения измерений и определения достоверности, экспрессности и экономичности измерений. В примерах представлены 11 параметров: S1, S2, S3, M1, M2, M3, σ_1 , σ_2 , σ_3 , A, B, где S2 – площадь полезного сигнала; S1, S3 площади вредных сигналов; M1, M2, M3 – длины волн сигналов; σ_1 , σ_2 , σ_3 – полуширины сигналов; A, B – параметры фона; I – уровень шума. Полезные сигналы S2 в зависимости от концентрации хрома являются основой для определения градуировочной функции и определения метрологических характеристик как градуировочной функции, так и результата анализа.