

О создании программного обеспечения для поддержки экспрессной экспертизы химического состава твердотельных материалов

Бельков⁽¹⁾ М.В., Кирис⁽¹⁾ В.В., Райков⁽¹⁾ С.Н., Рудикова⁽²⁾ Л.В.

Лаборатория лазерной диагностики плазмы

⁽¹⁾Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

e-mail: raikov@imaph.bas-net.by;

⁽²⁾Кафедра программного обеспечения интеллектуальных и компьютерных систем
факультет математики и информатики

Учреждение образования «Гродненский государственный университет имени Янки Купалы», Гродно, Беларусь

e-mail: rudikowa@gmail.com

Аннотация — Рассматриваются некоторые задачи экспрессной экспертизы химического состава твердотельных материалов. Выявлены основные требования к созданию специализированного программного обеспечения для мобильного лазерного спектрометра, который применяется при проведении материаловедческой экспертизы

Ключевые слова: экспрессная экспертиза, лазерный метод, спектральный анализ, цифровые базы данных, специализированное программное обеспечение.

I. ОСНОВНЫЕ ЗАДАЧИ ЭКСПРЕССНОЙ ЭКСПЕРТИЗЫ

В настоящее время активно развиваются лазерные методы анализа состава почвы, руд, минералов и родственных материалов. Общее рассмотрение этих объектов выявляет близость технологии выполнения аналитической процедуры, техническое оснащение, подходы к обработке результатов. Применяемые методы базируются на эмиссионной спектроскопии, флуоресценции, комбинационном рассеянии, отражении ИК-излучения от объекта исследования и др. При этом на передний план выдвигается лазерная искровая спектроскопия (в англоязычной литературе – LIBS). Этот метод имеет более раннюю историю развития, достаточно апробирован при решении разнообразных практических задач: контроле качества промышленной продукции, технологических процессов, состоянии окружающей среды, водных ресурсов, исследовании состава руд и минералов и т.д. (см., например, [1-3]).

Задача экспрессной экспертизы химсостава любых твердотельных материалов без пробоподготовки, непосредственно в полевых, производственных условиях, в историко-культурных, экологических, криминалистических и др. центрах становится все более актуальной и охватывает постоянно расширяющийся круг проблем.

В стационарных условиях такой анализ может осуществляться химическими методами с механическим отбором пробы и последующими время- и трудоемкими процедурами пробоподготовки и анализа. Применяются и другие методы, в частности, спектральные, в целом, требующие такой же пробоподготовки. Во многих практических случаях необходимо проведение измерений с выездом на место экспертизы, что особенно важно при анализе объектов, не подлежащих транспортировке, в частности, при осуществлении антитеррористической деятельности, при текущем обследовании сооружений и конструкций, экологическом мониторинге в зонах повышенного риска и т.д.

На современном этапе доминирующее место занимают рентгенофлуоресцентный и лазерный спектральный анализ.

Рентгенофлуоресцентный метод ограничен в своих возможностях. Интерес к лазерному спектральному анализу стал наблюдаться в связи с внедрением в аналитическую практику современных вариантов двухимпульсных лазеров и многоканальных оптических анализаторов спектров. Важным шагом в этом направлении явилось и разработка метода безэталонного анализа, реализуемого пока только с лазерным пробоотбором и атомизацией материала.

II. ОБ ОСОБЕННОСТЯХ ЛАЗЕРНОГО МЕТОДА СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА

Важнейшими особенностями лазерного метода спектрального анализа являются: (а) экспрессный анализ в режимах практически неразрушающего контроля, только оптического контакта, реального времени, in situ; (б) высокая локальность и возможность определения элементного состава микроколичеств вещества (микроанализ); (в) стехиометрическое (практически беззбирательное) испарение образца; (г) исключение изменения первоначального элементного состава пробы; (д) проведение одновременного многоэлементного анализа, а также определение макро-, микро- и следовых содержаний элементов. С помощью лазерных источников возбуждения можно решать задачи локального, поверхностного, послойного, динамического анализа, изучать однородность материалов и распределение элементов. Мобильные лазерные спектрометры серийно не выпускаются, разработаны единичные прототипы специального назначения в США, Германии, Италии, Испании, Беларуси.

Отметим, что лазерный спектральный анализ является современной разновидностью классического эмиссионного атомного спектрального анализа.

Эмиссионный атомный спектральный анализ состоит из следующих основных процессов: (1) отбор представительной пробы, отражающей средний состав анализируемого материала или местное распределение определяемых элементов в материале; (2) введение пробы в источник излучения, в котором происходят испарение твердых и жидких материалов, диссоциация соединений и возбуждение атомов и ионов; (3) регистрация спектра (либо визуальное наблюдение) с помощью спектрального прибора; (4) расшифровка полученных спектров с помощью таблиц и атласов спектральных линий химических элементов. Обычно испарение пробы и возбуждение спектра ее паров происходит в одном и том же источнике света для спектрального анализа, например, в пламени, в электрических дуге или искре.

При помощи лазерной техники можно выполнять спектральный анализ как проводящих, так и непроводящих материалов практически без

предварительной подготовки проб (нет надобности в растворении, измельчении, обеспечении электропроводности проб и т.п.).

Эмиссионный спектр регистрируется оптическим многоканальным анализатором на основе ПЗС линейки (Toshiba TCD 1304AP), имеющей 3648 светочувствительных пикселей с размерами 8x200 мкм. Область спектральной чувствительности (по уровню 0,1) составляет 200-1060 нм.

Отработана механическая и оптическая схематехника наведения и фокусировки лазерного излучения на выбранный участок анализируемого образца и отбора полезного сигнала (XYZ позиционер).

III. ОСНОВНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ К СОЗДАНИЮ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

В настоящее время накоплен достаточно обширный материал по спектрам, о чем свидетельствуют соответствующие таблицы и атласы спектральных линий химических элементов. Однако непосредственная автоматизация процесса обработки результатов спектрограмм, получаемых с использованием мобильного лазерного спектрометра, применяемого при проведении материаловедческой экспертизы и исследованиях технологических изделий, историко-художественных ценностей, объектов окружающей среды, биоструктур, отсутствует. Это, естественно, замедляет получение итоговых результатов экспертизы и не позволяет осуществлять быстрый, направленный и расширенный поиск в базе накопленных экспертиз.

Таким образом, основным требованием к программному обеспечению для лазерных спектрометров различных типов являются следующие аспекты. Прежде всего, поддержка цифровых баз данных основных химических элементов, визуализация основных линий частотных спектров, а также обработка данных связанных с проведением материаловедческой экспертизы и исследований технологических изделий, историко-художественных ценностей, объектов окружающей среды, биоструктур.

В рамках проводимых исследований проделана следующая работа: собран и проанализирован материал, касающийся таблиц и атласов спектральных линий химических элементов; проведен анализ предметной области, связанной с цифровыми базами

данных основных спектральных линий химических элементов; проанализирована основная структура спектрограмм и выявлены требования по обработке отдельного контура спектральной линии; разработаны общие программные требования к обработке спектрограмм, получаемых с использованием мобильного лазерного спектрометра, применяемого при проведении материаловедческой экспертизы и исследованиях технологических изделий, историко-художественных ценностей, объектов окружающей среды, биоструктур; подготовлен документ аналитического обзора, связанный с предметной областью материаловедческой экспертизы; выявлены основные функции разрабатываемого программного обеспечения; предложена модель данных для основных спектральных линий и данных, получаемых в результате проведения материаловедческой экспертизы; разработана общая архитектура специализированного программного обеспечения.

Автоматизация процесса обработки спектральных линий позволит получать быстрые и точные результаты экспертизы, собирать полученные результаты в базу данных для их дальнейшей обработки, а также визуализировать и масштабировать полученные спектры. Несомненно, все это будет способствовать широкому использованию мобильного лазерного спектрометра и повысит его конкурентоспособность на мировом рынке соответствующих экспертных устройств.

[1] I.B. Gornushkin, A.Y. Kazakov, N. Omenetto, B.W. Smith, J.D. Winefordner, «Spectrochim», Acta Part B., vol. 5, pp. 401-418, 2004.

[2] A.W. Miziolek, V. Palleschi, I. Schechter, Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS): Fundamentals and Applications, Cambridge University Press: New York, 2006.

[3] L.C. Trevizan, D. Santos, R.E. Samad, N.D. Vieira, C.S. Nomura, L.C. Nunes, I.A. Rufini, F.J. Krug, Spectrochim, Acta Part, vol. 63, pp. 11-51, 2008.

Результаты работы получены в процессе выполнения ГПНИ «Разработать мобильный лазерный спектрометр, развить экспрессные методы элементного анализа, ИК-спектроскопии, люминесцентного зондирования для материаловедческой экспертизы и исследования технологических изделий, историко-художественных ценностей, объектов окружающей среды, биоструктур».