

Zárt ablációs mintakamrák fejlesztése halogéntartalmú peszticidek kimutatására

Lakatos Laura Vivien^{1,*}, Fernando Alexander Casian-Plaza², Palásti Dávid Jenő², Galbács Gábor²

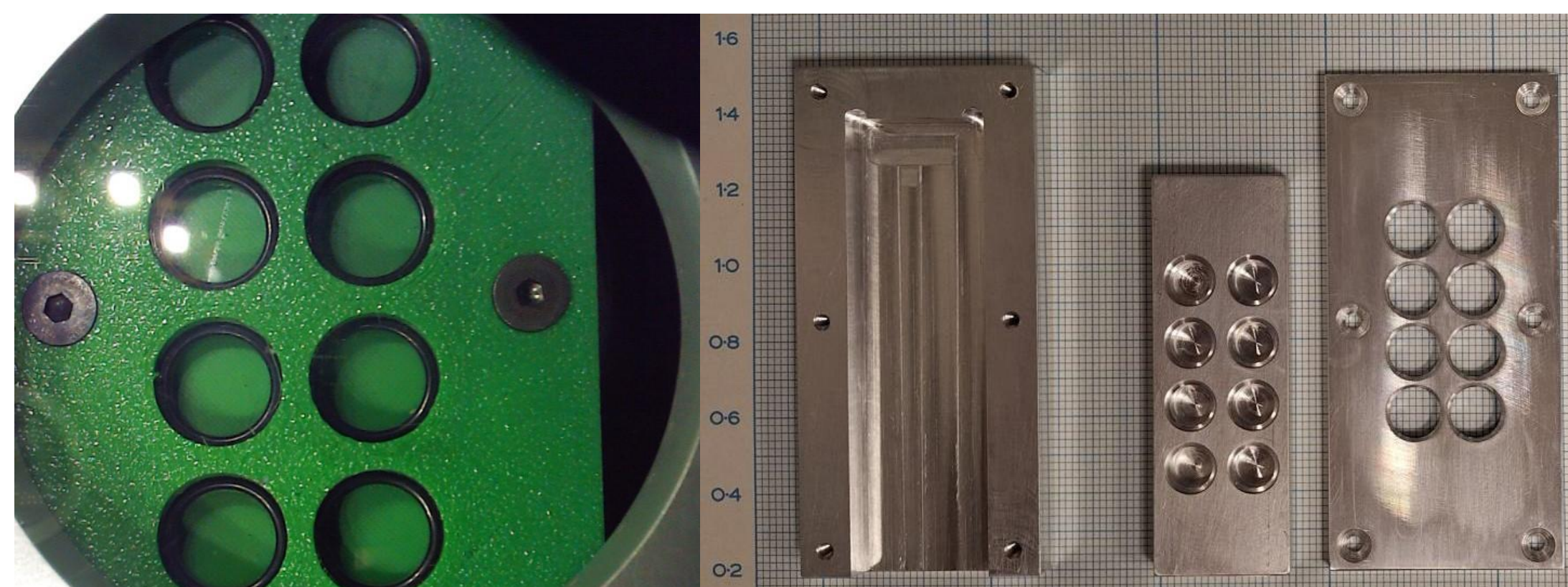
¹ Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Rerrich Béla tér 1, Szeged, HU-6720; *Email: lara.lakatos@gmail.com

² Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, Dóm tér 7-8, Szeged, HU-6720

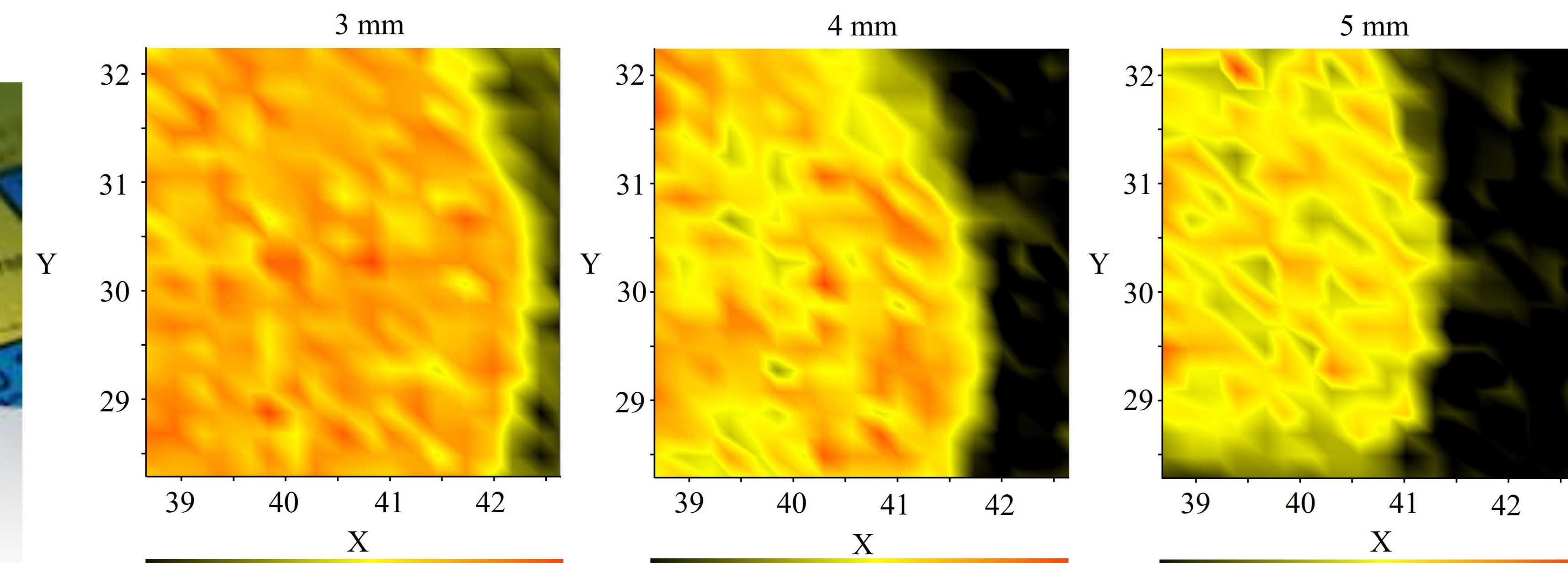
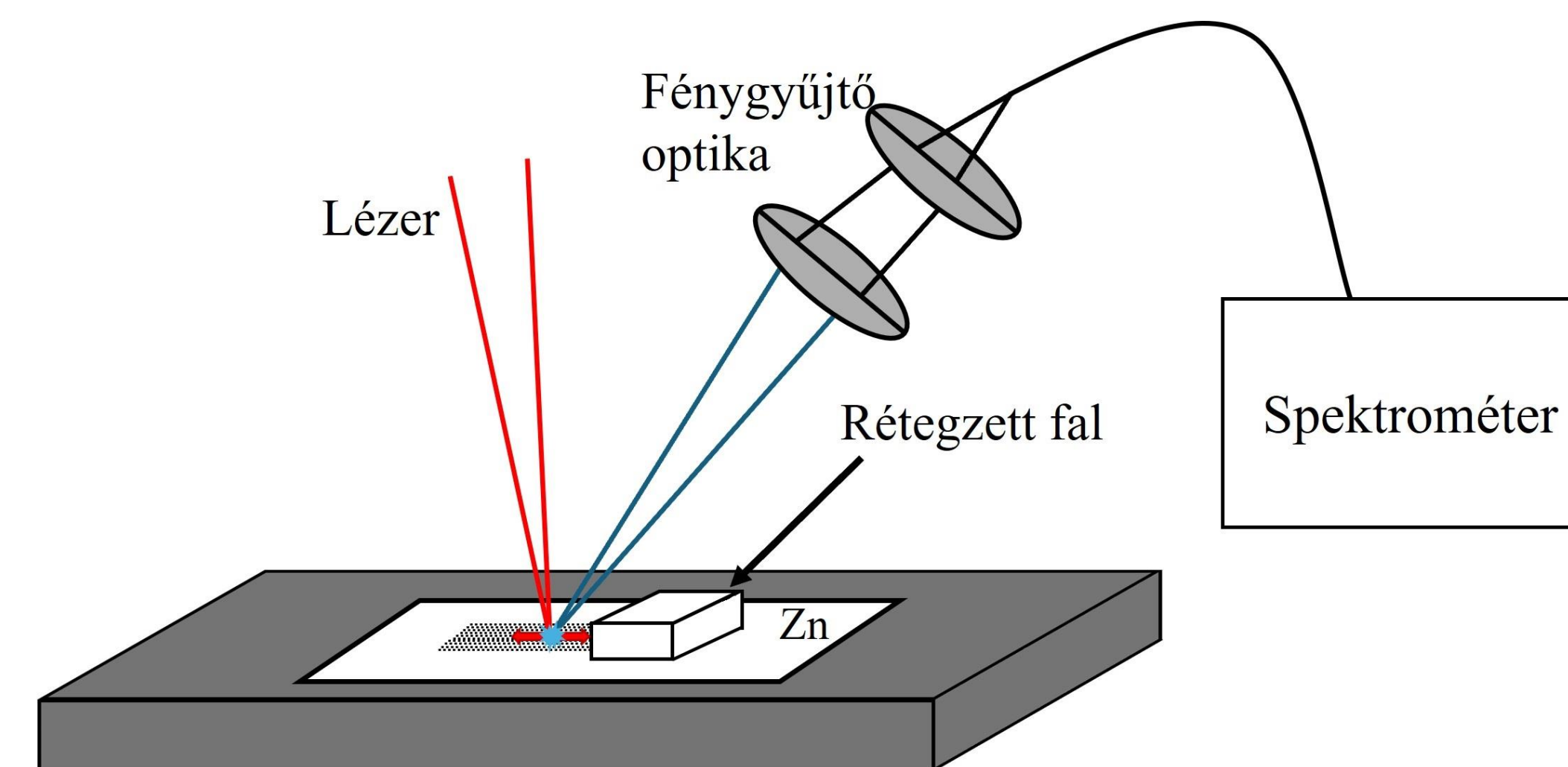
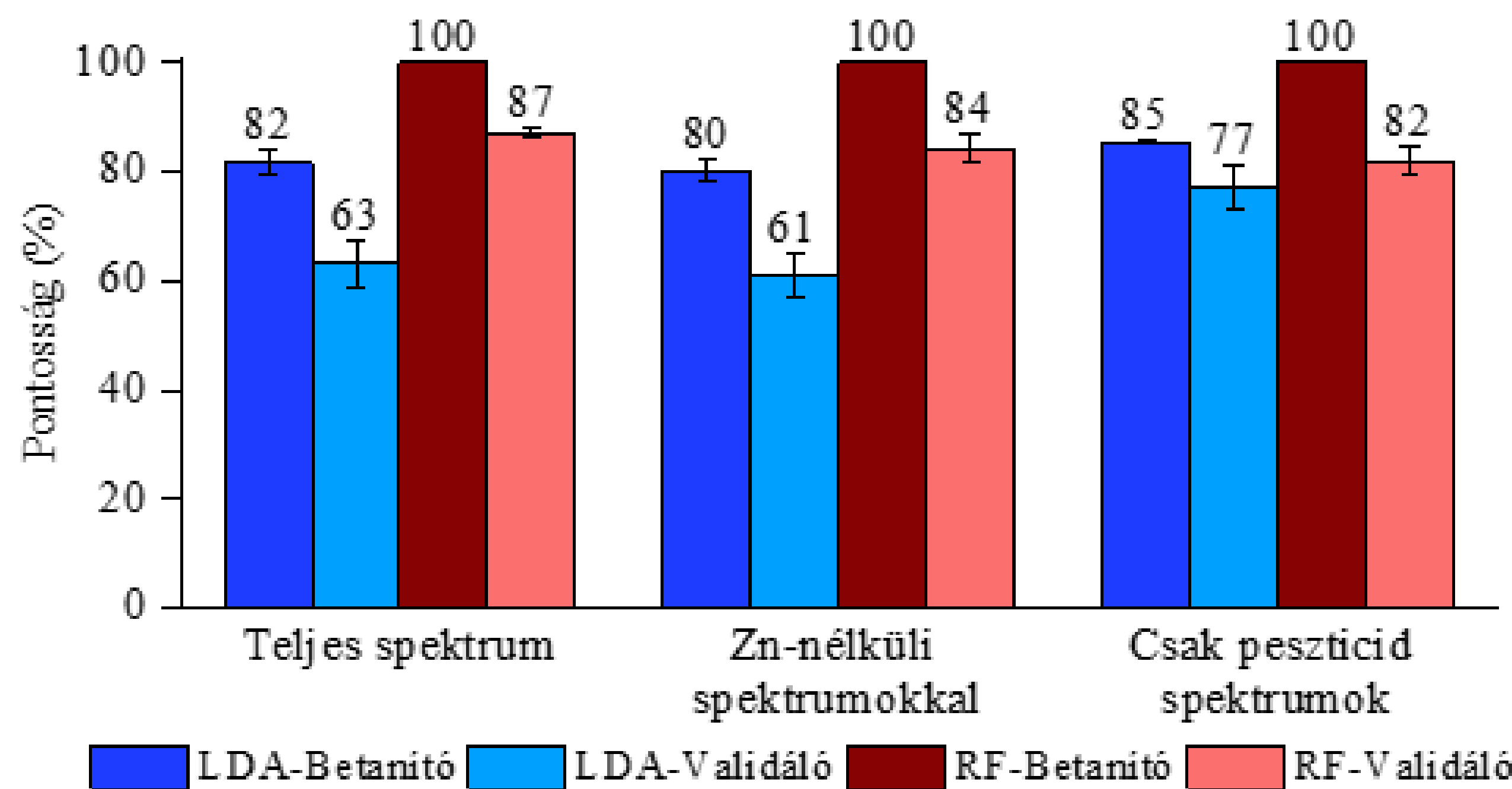


Bevezetés

- A lézer-indukált plazma spektroszkópia (LIBS) gyors, mintaelőkészítést nem igénylő, kis mintaigényű nyomelemanalitikai módszer, sok alkalmazási lehetőséggel.
- Veszélyes minták LIBS műszerrel való vizsgálatához zárt, henger alakú mintatartó konstrukció tervezése (optimális mélység-átmérő meghatározása, a LIBS műszer elrendezése miatt).
- A tervezéshez vizsgált peszticidek kiválasztása halogéntartalmuk miatt valósult meg, mivel a LIBS érzékenysége ezen elemekre csekély.
- Kemometriai módszerekkel (lineáris diszkriminancia analízis, LDA; véletlen erdő, RF) LIBS-spektrumok alapján a peszticidek azonosítása és megkülönböztethetőségük vizsgálata, valamint „virtuális” hígítással a RF modell pontosságának tanulmányozása.



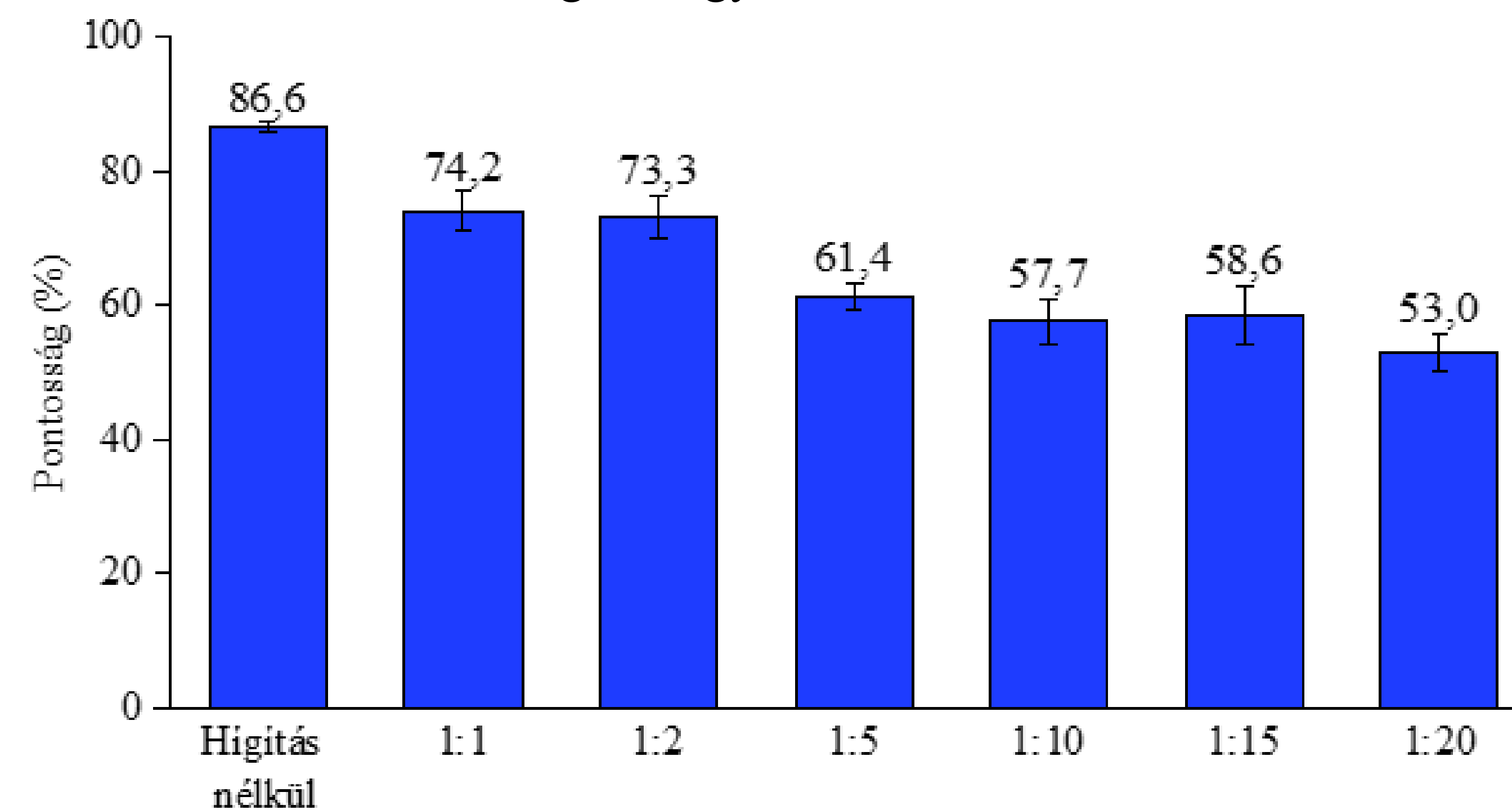
Az analízisek pontossága a LIBS spektrumok azonosítása során, a C atom 247, nm-es hullámhosszán mért jelintenzitásra elvégzett normalálás után



Az ablációs cellák térképezhető területe különböző cellamélységek esetén a CN-sáv 388 nm-en mért intenzitása alapján (piros szín felé nő).

RF analízis eredményei a besorolásra	Besorolási csoport					
	Acetamidrid	Klórpirifosz	Cihalotrin	Tebukonazol	Teflutrin	
Eredeti csoport	Acetamidrid	89 ± 7	0	2 ± 3	6 ± 4	2 ± 3
	Klórpirifosz	0	98 ± 0	0	2 ± 3	0
	Cihalotrin	0	0	88 ± 13	3 ± 3	10 ± 8
	Tebukonazol	7 ± 7	0	2 ± 3	84 ± 4	7 ± 6
	Teflutrin	0	0	13 ± 12	0	87 ± 9

A RF modell validáló készletre kapott analízis pontossága a hígítás figyelembevételével



Összefoglalás

- Állandó cellaátmérő (8 mm) mellett három cellamélységet tanulmányoztunk (3, 4 és 5 mm).
- A műszer által térképezhető területek nagysága függ a cella pozíciójától a műszerben.
- Tisztítási protokoll is kidolgozásra került.
- Peszticidek LIBS-spektrumai alapján a kemometriai módszerek közül a RF analízis pontosabbnak bizonyult az LDA-nál.
- Az RF analízis által alkalmazott leggyakoribb szelektor elemek: C, F, C₂-sáv, CN-sáv.
- Tanulmányoztuk a hígítás hatását is a RF-analízisre. Ehhez virtuális hígítást használtunk. Harmadára hígítva még pontosabb eredményeket kaptunk a LIBS spektrumok azonosítására, amely pontosság 1:5-öd hígítási aránytól jelentősen romlott.