**Разработка универсальных градуировочных моделей для рентгенофлуоресцентного анализа**

***Селивановс З.,1 Кирсанов Д. О.1, Панчук В. В.1***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*1Санкт-Петербургский государственный университет,*

*институт химии, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: st073551@student.spbu.ru*

В рентгенофлуоресцентном анализе (РФА) для создания градуировочных уравнений, связывающих аналитический сигнал (интенсивность пика) с концентрацией определяемого элемента обычный метод наименьших квадратов часто работает неудовлетворительно. Это связано с тем, что на интенсивность сигнала определяемого элемента могут влиять компоненты матрицы образца. Для того, чтобы скорректировать эти эффекты, были предложены различные методы. Наиболее популярные из них - метод фундаментальных параметров (МФП) и метод коррекции по интенсивности (МКИ) [1]. У обоих методов есть свои минусы: аналитическая точность МФП резко снижается, когда исследуемый образец содержит значительное количество легких элементов, которые не видны на спектрах. Для получения более надежных количественных результатов может применяться МКИ. Он основан на уравнениях регрессии, связывающих аналитические сигналы с концентрациями целевых элементов, где добавляются эмпирические члены, корректирующие влияние конкретных элементов матрицы. Расчет коэффициентов в этой регрессионной модели производится с помощью нелинейного МНК с использованием стандартных образцов. Таким образом, количество влияющих условий, которые могут быть приняты во внимание, ограничено количеством доступных калибровочных образцов. Это ограничение может стать серьезным препятствием для анализа образцов со сложным составом, содержащим много матричных элементов. В качестве альтернативы этим традиционным методам в последние годы было предложено использовать различные хемометрические подходы для количественного анализа данных РФА. Одной из интересных возможностей таких методов является создание единых градуировочных моделей, работающих для образцов с различным матричным составом. Так, в [2] было показано, что методы хемометрики позволяют объединить в одну градуировку образцы руд разных типов. В настоящей работе нами предпринята попытка развить этот подход для создания еще более универсальных градуировок, объединяющих руды и стали. Создание подобной градуировки должно привести к снижению необходимого количества стандартных градуировочных образцов для единичного анализа и, следовательно, снижению стоимости анализа методом РФА вообще и уменьшению количества времени, требуемого на единичный анализ. В докладе будут представлены результаты разработки таких градуировочных моделей с помощью метода, сочетающего проекцию на латентные структуры и коррекцию по интенсивности; а также метода нелинейной многомерной регрессии KRLS (Kernel-Based Regularized Least Squares). Точность определения концентрации ряда элементов в рудах и сталях с помощью универсальной модели сравнивается с результатами применения МФП.

*Исследования выполнены при поддержке гранта РНФ 23-23-00108.*

**Литература**

1. R. M. Rousseau. Corrections for matrix effects in X-ray fluorescence analysis-a tutorial, Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc. 2006 Vol. 61 (7) P. 759–760.

2. S. Aidene et al. Partial least squares assisted influence coefficients concept improves accuracy in X-ray fluorescence analysis // Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc. 2022 Vol. 193 P. 106452.