

Меры и стандартные образцы для метрологического обеспечения спектроскопии комбинационного рассеяния

Юшина А. А.¹, Асеев В. А.², Левин А. Д.¹

¹ ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт оптико-физических измерений», г. Москва, Россия, e-mail: yushina@vniiofi.ru

² ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО», г. Санкт-Петербург, Россия

Аннотация: Разработаны меры на основе неорганических стекол, активированных ионами переходных металлов, предназначенные для калибровки спектрометров и микроскопов комбинационного рассеяния (КР) по относительным интенсивностям. При возбуждении на заданной длине волны мера воспроизводит относительные интенсивности флуоресценции. Для калибруемого прибора с помощью аттестованных мер будет находиться функция спектральной коррекции, позволяющая определять спектры КР, прослеживаемые к усовершенствованному эталону ГЭТ 196-15.

Ключевые слова: стандартный образец, спектроскопия комбинационного рассеяния, калибровка по относительной интенсивности, метрологическое обеспечение, меры, линия флуоресценции

Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР), или рамановская, является одной из разновидностей колебательной спектроскопии и в последние годы получает все большее распространение благодаря совершенствованию оборудования, появлению достаточно компактных и недорогих устройств и возрастающему интересу к экспрессному определению веществ [1]. Однако спектры КР, измеренные с помощью разных приборов, могут демонстрировать значительные различия в относительных интенсивностях пиков исследуемых соединений, что объясняется преимущественно особенностями конструкции приборов. На регистрируемую интенсивность спектра в совокупности оказывают влияние функции пропускания оптических элементов, дифракционная эффективность решетки и спектральная чувствительность фотоприемника, и для каждого спектрометра вклад этих элементов будет разным. Кроме того, изменения отклика прибора, влияющие на форму спектров КР, могут также возникать на одном и том же приборе после замены компонента или выполнения работ по обслуживанию [2,3].

В то же время применение спектроскопии КР как для идентификации веществ, так и для количественного анализа требует измерения аппаратно-независимых спектров, что приводит к необходимости разработки специальных средств метрологического обеспечения, а именно стандартных образцов или мер для калибровки КР спектрометров и микроскопов по шкале относительных интенсивностей.

В качестве материала мер Национальным исследовательским университетом ИТМО (Санкт-Петербург) были разработаны экспериментальные образцы специальных стекол на основе фосфатной матрицы с заданными флуоресцентными свойствами. Каждое из стекол активировано ионами переходного металла, подобранного для возбуждения широкой линии флуоресценции излучением заданной длины волны 532 нм (ионами марганца), 633 нм (ионами хрома) и 785 нм (ионами титана). Меры, изготовленные из этих стекол, воспроизводят относительные интенсивности флуоресценции в диапазоне частотных сдвигов от 150 до 4500 см⁻¹.

Аттестация мер будет производиться на рамановском модуле первичного эталона ГЭТ 196-15, который войдет в состав эталона по завершении его совершенствования. Путем сравнения относительных интенсивностей флуоресценции, измеренных для меры на эталоне и на калибруемом приборе, будет определяться функция спектральной коррекции для этого прибора. Таким образом, будет обеспечена возможность измерять на калибруемом приборе рамановские спектры, прослеживаемые к эталону, т.е. аппаратно-независимые.

ЛИТЕРАТУРА

1. Das R.S., Agrawal Y.K. Raman spectroscopy: recent advancements, techniques and applications // *Vibrational spectroscopy*. 2011. Vol. 57. no. 2. P. 163-176. <https://doi.org/10.1016/J.VIBSPEC.2011.08.003>
2. ASTM International. Standard guide for relative intensity correction of Raman spectrometers, 2013. P. 12.
3. Spectral standards based on glasses activated with rare-earth element ions for the calibration of fluorescence and Raman spectrometers / A.Yu. Sadagov [et al.] // *Optics and spectroscopy*. 2020. Vol. 128. no. 10. P. 1658-1666. <https://doi.org/10.1134/S0030400X20100215>