

김일범, 황보현

본문에서는 응용프로그램 MATLAB를 리용하여 작성한 자외선대역의 원자발광스펙트럼 해석프로그램 《발광》(2.0)의 알고리즘과 스펙트르화상해석정확도를 높이기 위한 방법에 대하여 서술하였다.

```

graph TD
    Start[시작] --> Input[화상입력]
    Input --> Preprocess[화상의 전처리]
    Preprocess --> Select[기준선선택]
    Select --> DBInput[자료기지입력]
    Select --> Analysis[분석]
    DBInput --> SensDB[감도선 자료기지]
    DBInput --> CalDB[검량선 자료기지]
    Analysis --> Qual[정성분석]
    Analysis --> Quant[정량분석]
    Qual --> Display[감도선현시 및 보간]
    Quant --> Display
    Display --> Modify[자료기지수정]
    Modify --> SensDB
    Modify --> CalDB
    Modify --> Quant
    Quant --> Process[분석결과의 처리]
    Process --> End[끝]
  
```

분광기에서 촬영한 스펙트르화상자료(사진건판 또는 필름)를 평판식화상입력장치로 컴퓨터에 입력한다. 이때 색방식은 RGB방식으로, 분해능은 600dpi로 설정하였다.

② 화상의 전처리

스펙트르화상의 전처리과정에서는 화상의 수평상태보정, 화상처리구역의 최소화, 시료 스펙트르들의 구분, 배경보정작업들이 진행된다.

사진건판자료를 입력할 때 화상입력장치안에 설치한 필름 또는 건판의 놓임새에 따라 수값화된 화상이 수평상태와 일정한 각도를 가지게 되므로 스펙트르가 반드시 수평상태에 놓이도록 보정하여야 한다. 스펙트르화상의 수평상태를 보정하기 위하여 화상회전기능을 추가한다. 미리 수평직선을 그어 매 시료스펙트르선들의 끝점들을 잇는 선이 이 수평직선과 평행이 될 때까지 화상을 회전하게 한다.

또한 사진건판화상의 아래우에는 구멍띠부분이 있는데 이 부분도 수값으로 전환되기때문에 자료의 복잡성이 조성된다. 이로부터 스펙트르화상처리구역을 최소화하고 자료처리속도를 높이기 위하여 필요없는 부분을 잘라내는 기능을 첨부한다.

다음으로 화상에서 시료건별로 스펙트르들을 구분하고 동시에 처리하기 위한 기능을 첨부한다. 지난 시기의 프로그램들에서는 화상처리구역을 미리 정해놓고 그안에 시료건별로 스펙트르를 이동시킨 다음 해석하였다. 따라서 처리공정이 복잡하고 해석속도가 빠르지 못한 문제들이 제기되었다.

스펙트르들을 구분하기 위하여 화상의 흑도세기값을 수평으로 더하고 여기에서 최소값들을 얻으면 이 값들의 위치가 곧 매 시료들의 경계위치로 된다. 화상의 수평정도에 따라 스펙트르구분선들이 추가적으로 나타날수 있는 문제를 고려하여 선택된 점으로부터 가장 가까운 스펙트르구분선을 지우고 추가하는 기능을 입력하여 분석의 정확도를 보장한다.

스펙트르구분과 스펙트르화상은 그림 2와 같다.

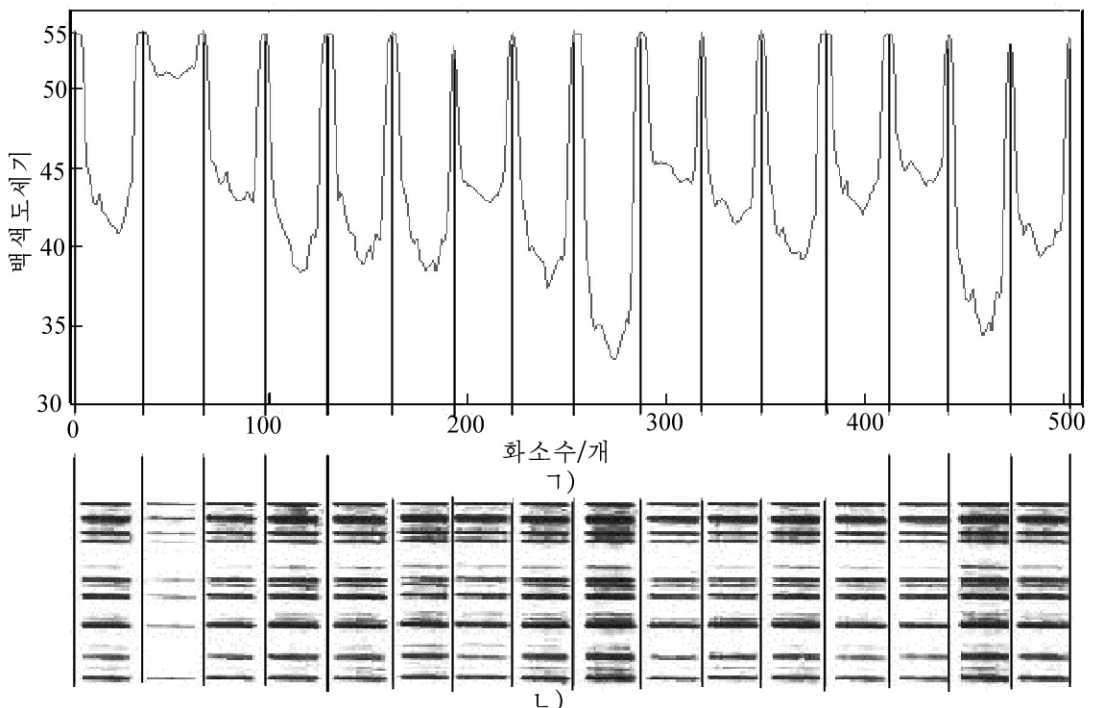


그림 2. 스펙트르구분(Γ)과 스펙트르화상(L)

그림 2에서 스펙트르들은 수직선에 의하여 시료건별로 구분된다.

스펙트르의 정확한 흑도세기값을 얻기 위하여 해당 흑도세기값에서 배경값을 더는 방식으로 배경보정을 진행한다.

해당 시료의 정확한 스펙트르구역은 그림 3과 같다.

③ 기준선선택

사진건편집의 이동은 기계적이동이므로 촬영되는 때 스펙트르선들의 위치는 수직선상에서 약간 차이난다.

이전에는 스펙트르분석을 1개 시료씩 진행하기때문에 매번 기준선을 설정해주어야 하지만 새로 작성한 프로그램에서는 기준선을 한번 설정해준다.

이때 구분된 매 시료스펙트르화상이 분리되고 매 기준선들이 제일 앞선 기준선과 일치된 다음 다시 화상을 합쳐 분석을 동시에 할수 있게 된다. 1개의 사진건판 또는 필름에 있는 스펙트르들은 프로그램의 1회 순환으로 해석된다.

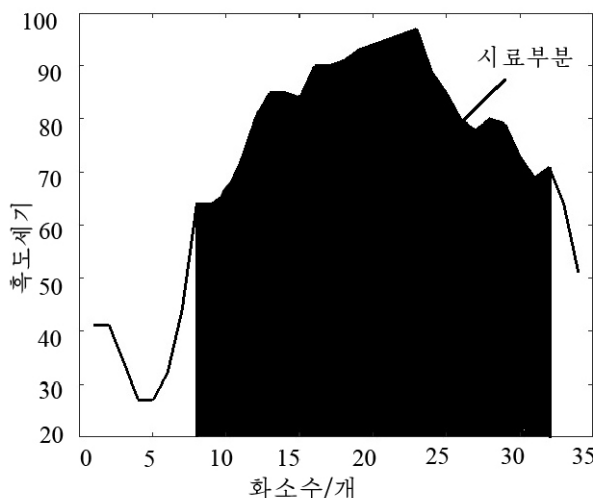


그림 3. 해당 시료의 정확한 스펙트르구역

④ 자료기지입력

해당 분석소들과 연계하여 이미 알고있는 원소들의 위치를 찍어 매 원소들의 감도선 위치를 확정하고 위치와 농도에 따르는 흑도세기값들을 자료기지에 입력한다.

자료기지에는 원소별감도선위치와 표준시료의 농도, 흑도세기가 구축된다.

⑤ 분석

정성분석에서는 스펙트르의 수값화된 자료를 자료기지와 대비하여 자료기지에 있는 흑도세기의 최소값보다 큰 원소들을 제시한다.

정량분석에서는 정성분석결과에 따라 찾은 원소들에 대하여 검량선자료의 회귀식을 찾고 그것에 기초하여 정량분석결과를 제시한다.

⑦ 분석결과의 처리

지구화학탐사망설계자료에 기초하여 등값선도를 작성하고 분석결과가 배경값보다 훨씬 큰 시료들에 대한 분석을 다시 진행하여 분석결과의 정확성을 검증한다.

2. 실험결과 및 해석

실험에서는 종합표준시료(기질물질로 탄산염암석, 22개 원소가 0.006% 들어있는것)에 대한 정성 및 정량분석을 진행한다.

정량분석에서는 Cu, Zn에 대한 분석만을 진행한다. 이것을 위하여 함량이 0.003, 0.006, 0.01%인 Cu, Zn의 표준시료를 각각 제조한다.

자외선발광분석기의 측정조건을 표준으로 설정하고 표준시료의 스펙트르는 1회, 종합표준시료의 스펙트르는 5회 촬영한다.

표 1. 종합표준시료의 정성분석결과

No.	원소	No.	원소	No.	원소
1	Pb	11	W	21	Sr
2	Bi	12	Al	22	Ti
3	Sb	13	Fe	23	Ba
4	Cu	14	Ge	24	Mn
5	Ag	15	Si	25	B
6	Zn	16	Ni	26	Ca
7	Cd	17	P	27	Mg
8	Sn	18	Be	28	Ga
9	Mo	19	Cr	29	In
10	V	20	Co	30	Sc

$$Y = 0.24X + 2.1 \text{ (Cu)}$$

$$Y = 0.15X + 1.9 \text{ (Zn)}$$

종합표준시료에서 Cu와 Zn의 정량분석 결과는 표 2와 같다.

표 2에서 보는바와 같이 분석결과는 표준시료농도에 비하여 0.000 1%만큼 더 큰 값으로서 상대오차는 약 1.7%에 해당된다.

스펙트럼화상을 화상입력기로 컴퓨터에 입력한 다음 새로 작성한 원자발광스펙트럼해석프로그램 《발광》(2.0)으로 스펙트럼을 해석하여 분석결과를 얻는다.

종합표준시료의 정성분석결과는 표 1과 같다. 표 1에서 보는바와 같이 종합표준시료에는 30개의 원소들이 들어있다.

그가운데서 지각평균함량이 높은 8개의 원소들(V, Al, Fe, Si, P, Mn, Ca, Mg)을 고려하면 22개 원소는 표준시료에 지적된 원소들로서 모두 찾은것으로 된다.

Cu, Zn의 표준시료에 대한 회귀방정식은 다음과 같다.

표 2. 종합표준시료에서 Cu와 Zn의 정량분석결과

촬영회수	Cu/%	Zn/%
1	0.006 1	0.006 1
2	0.006 1	0.006 1
3	0.006 2	0.006 0
4	0.006 1	0.006 1
5	0.006 0	0.006 0
평균	0.006 1	0.006 1

맺는 말

원자발광스펙트럼해석프로그램 《발광》(2.0)의 스펙트럼해석속도는 20건을 계산할 때 약 30s정도이며 분석의 정확도는 98.3%이다.

참고 문헌

- [1] 황보현 등; 지질탐사, 1, 9, 주체103(2014).
- [2] 림진옥; 지질 및 지리과학, 4, 13, 주체99(2010).

주체108(2019)년 1월 5일 원고접수

Study on Ultraviolet AES Analytic Program and Character

Kim Il Bom, Hwangbo Hyon

In calculating 20 samples at once, the processing time of AES analytic system “Palgwang” (2.0) is about 30s and its exactitude is about 98.3%.

Key words: atomic emission analysis, spectrum analysis