

Quantificação elementar do Cl por linhas e bandas de emissão molecular em LIBS, com potencial aplicação para detecção de S, F e Br

Lucas Lanceni Galli¹; Paulino Ribeiro Villas Boas²

¹Aluno de graduação em Engenharia Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP. Bolsista PIBIC/CNPq, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP; lucasgalli@estudante.ufscar.br.

²Pesquisador da Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

Enxofre (S), Cloro (Cl), Flúor (F) e Bromo (Br) têm impacto direto na saúde de humanos, animais e plantas, desempenhando um papel essencial em atividades vitais para esses seres vivos. Normalmente, o monitoramento busca preservar a integridade dos ecossistemas ou aumentar a produtividade em atividades agrícolas, e para isso, é preciso fazer o uso de técnicas apropriadas, capazes de quantificá-los em diversos tipos de amostras com concentrações traço. A técnica de espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser (LIBS) é um método analítico multi-elementar que se baseia na análise das emissões nos espectros do plasma gerado por um laser de alta intensidade focado numa amostra. Esta técnica é notável pela sua eficácia na análise *in situ*, sendo atraente por requerer pouca preparação de amostra, não produzir resíduos e ser um método rápido, eficiente e de baixo custo. Contudo, a técnica tem limitações para a detecção dos elementos mencionados por emissões atômicas em ar atmosférico, resultando num alto limite de detecção (LOD), o que pode afetar sua eficácia em algumas aplicações. Portanto, neste trabalho, procuramos identificar e detectar esses elementos, baseando-nos na emissão molecular em LIBS por recombinação molecular no plasma, medindo a intensidade emitida por bandas moleculares. O sistema utilizado foi o DP-LIBS, que inclui um laser de Nd:YAG operando em 1064 nm (infravermelho) e um laser de Nd:YAG acoplado a um gerador de segundo harmônico operando em 532 nm (verde), juntamente com um espectrômetro Aryelle com faixa espectral de 175–760 nm e uma câmera iCCD. Usamos amostras sintéticas e obtivemos 200 espectros para cada uma. Para a detecção do cloro, a molécula analisada foi a de *CaCl* que emite na faixa espectral de 592–595 nm. Realizamos análises sobre a recombinação molecular da molécula no plasma, otimização de parâmetros do sistema e outros aspectos da amostra e do plasma para melhorar a detecção molecular. Para estimar o LOD, realizamos curvas de calibração, obtendo um LOD para o Cloro de 0,31% m/m (massa por massa) em condições ambiente. Esses resultados demonstram o potencial da técnica LIBS e dos métodos de recombinação molecular para a quantificação de S, Cl, F e Br em diferentes conjuntos de amostras. Com ajustes mínimos, as descobertas deste estudo podem ser aplicadas a outras amostras e os elementos mencionados, ampliando a aplicabilidade e eficácia da técnica LIBS na quantificação elementar.

Apoio financeiro: Embrapa; CNPq.

Área: Ciências Exatas e da Terra.

Palavras-chave: LIBS, molecular, cloro.

Número Cadastro SisGen: Não se aplica.

Comitê de Ética: Não se aplica.

N. do Processo PIBIC/PIBIT: 138572/2023-2.