

## Correção de linha base e normalização de espectros LIBS de amostras de solo: estimativa do teor de cobre

Marco Aurélio de Menezes Franco<sup>1</sup>; Renan Arnon Romano<sup>2</sup>; Débora M. B. P. Milori<sup>3</sup>;  
Paulino Ribeiro Villas Boas<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Aluno de graduação em bacharelado em Física, Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, SP, mac27\_91@hotmail.com.

<sup>2</sup> Aluno de graduação em Física, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo.

<sup>3</sup> Pesquisadora, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

<sup>4</sup> Pesquisador, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

O estudo da composição química dos solos é de extrema importância para o desenvolvimento sustentável da agricultura e para a preservação do meio ambiente por ser o principal substrato utilizado pelas plantas para o seu crescimento e disseminação, fornecendo água e nutrientes. No entanto, ainda não existem técnicas ou equipamentos capazes de avaliar de forma ampla, rápida e eficaz vários elementos de uma só vez. Para resolver esse problema, o grupo de Ótica e Fotônica da Embrapa Instrumentação tem trabalhado com a espectroscopia de emissão de plasma induzido por laser (LIBS) – uma técnica fotônica multi-elementar que emprega pulso de laser muito energético para ablação de uma pequena quantidade de material da amostra, gerando instantaneamente um plasma à altíssimas temperaturas, da ordem de 10.000 K, que desassocia todas moléculas em íons e átomos excitados. Ao voltarem aos seus estados fundamentais, os elétrons excitados emitem luz característica do elemento de origem, que é decomposta no espectrômetro do equipamento LIBS. A partir das linhas de emissão do espectro LIBS coletado é possível então determinar os elementos que compõem a amostra e, se devidamente calibrado, é também possível estimar a concentração desses elementos. A grande vantagem dessa técnica espectroscópica é depender de pouco preparo das amostras, ser rápida e necessitar de poucos microgramas de material para análise. Entretanto, devido à baixa resolução do espectrômetro e, principalmente, pela alta temperatura no momento em que os espectros são obtidos, a linha base é pronunciada e atrapalha consideravelmente a análise quantitativa da concentração dos elementos das amostras. Este trabalho visa, portanto, comparar diferentes métodos de correção da linha base para estimar a concentração de cobre de 59 amostras de solos provenientes de diversas regiões produtoras do país. Foram considerados os métodos: SNIP, TopHat, Median e Golay para encontrar a linha base e o método de regressão de mínimos quadrados parciais (PLSR) para estimar o teor de cobre a partir do espectro LIBS corrigido. Cada método para encontrar a linha base foi otimizado para refletir a melhor correlação entre os espectros LIBS e o teor de cobre de cada amostra. A comparação entre os métodos foi realizada pela validação cruzada deixando um de fora (“leave-one-out”), e o melhor resultado, correlação de 0,96 e erro relativo médio de 30%, foi obtido para o método Golay, indicando forte correlação entre a técnica LIBS com o método computacional e o método de referência. Isso indica que a técnica LIBS com o modelo Golay é promissora para a determinação de outros elementos químicos em solos e, possivelmente, para o estudo de doenças de plantas, com base na carência deles.

**Apoio financeiro:** Embrapa.

**Área:** Instrumentação Agropecuária.