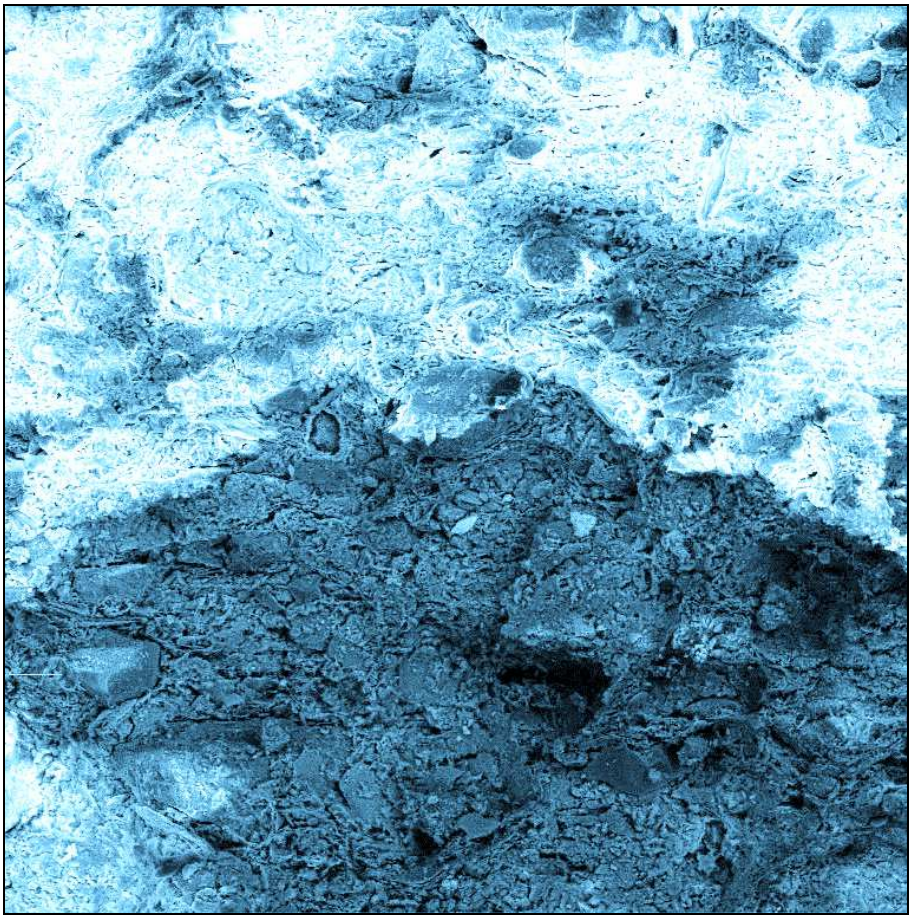
Daniela Domnişoru, Mirela Praisler, Leonard Domnişoru

METODE CHEMOMETRICE INTEGRATE PENTRU ANALIZA SI IDENTIFICAREA PROBELOR CERAMICE



Editura Fundaţiei Universitare „Dunărea de Jos”
Galaţi - 2014

Daniela Domnişoru, Mirela Praisler, Leonard Domnişoru

METODE CHEMOMETRICE INTEGRATE

PENTRU ANALIZA ŞI IDENTIFICAREA

PROBELOR CERAMICE

Editura Fundaţiei Universitare „Dunărea de Jos”
Galaţi - 2014

Copyright © 2014, Editura Fundaţiei Universitare „Dunărea de Jos” Galaţi
Inclusă în baza de date a editurilor aprobate CNCSIS Bucureşti (Cod 147)

Director: Prof.univ.dr.fiz. Cosma Tudose
Adresă: Universitatea „Dunărea de Jos” din Galaţi
Str. Domnească 47, Cod RO-800008
Tel.: 0236-414112
Fax.: 0236-461353
Web: www.editura.ugal.ro
E-mail: editura@ugal.ro

Referenţi ştiinţifici:

Prof.univ.dr.ing. Gheorghe Nagîţ

Prof.univ.dr.ing. Remus Zăgan

Prof.univ.dr.fiz. Luminiţa Moraru

Prof.univ.dr.fiz. Constantin Gheorghieş

ISBN: 978 - 973 - 627 - 512 - 8

CUPRINS

Pag.

CAPITOLUL 1 Introducere……. 4

CAPITOLUL 2 Fundamentele teoretice ale principalelor metode experimentale avansate de analiză fizico-chimică a materialelor ceramice şi de procesare multivariată a datelor…… 7
2.1 Stadiul actual în analiza arheometrică a materialelor ceramice…… 7
2.2 Caracterizare microstructurală a materialelor ceramice…… 11
2.3 Microscopie electronică de scanare şi analiza prin dispersia energiei radiaţiei X (SEM-EDX)……..... 15
2.3.1 Microscopie prin scanare cu electroni (SEM)…… 15
2.3.2 Microscopia electronică de scanare cu detector EDX (Energy Dispersive X-Ray)..….. 24
2.4 Spectroscopie în infraroşu cu Transformare Fourier prin metoda reflexiei total atenuate (ATR-FTIR)……..... 27
2.5 Spectroscopie Raman…… 44
2.6 Analiză chemometrică prin metoda analizei componentelor principale (PCA)…… 61

CAPITOLUL 3 Prezentarea materialelor ceramice supuse analizelor chemometrice……..... 65

CAPITOLUL 4 Analiza experimentală a materialelor ceramice prin microscopie electronică de scanare (SEM, SEM-EDX)……... 74
4.1. Descrierea echipamentului experimental de achiziţie şi de prelucrare a probelor ceramice prin microscopie electronică SEM-EDX……..... 74
4.2 Date experimentale ale probelor ceramice obţinute prin microscopie electronică de scanare cu analiza energiei de dispersie a radiaţiei X (SEM-EDX)……..... 75
4.3.Concluzii privind identificarea componentelor pe baza spectrelor SEM-EDX…… 84
4.4. Descrierea echipamentului experimental de achiziţie şi de prelucrare a probelor ceramice privind dimensiunea porilor prin microscopie electronică SEM…….. 85
4.5 Date experimentale ale probelor ceramice obţinute prin microscopie electronică de scanare (SEM) privind dimensiunea porilor superficiali……..... 85
4.6.Concluzii privind dimensiunea porilor superficiali rezultaţi din analiza SEM……. 92

CAPITOLUL 5 Studiul experimental al probelor ceramice prin spectroscopie în infraroşu cu transformare Fourier (FTIR-ATR)……... 93
5.1. Descrierea echipamentului experimental de achiziţie şi de prelucrare a spectrelor de absorbţie ATR-FTIR……..... 93
5.2 Date experimentale obţinute prin analiza probelor ceramice prin spectroscopie FTIR-ATR…… 97
5.3.Concluzii privind identificarea componentelor pe baza spectrelor ATR-FTIR…..... 133

CAPITOLUL 6 Achiziţia şi prelucrarea datelor experimentale ale probelor ceramice prin spectroscopie Raman……...……. 134
6.1. Descrierea echipamentului experimental de achiziţie şi de prelucrare a spectrelor Raman……...……... 134
6.2 Date experimentale ale probelor ceramice obţinute prin spectroscopie Raman…… 136
6.3.Concluzii privind identificarea componentelor pe baza spectrelor RAMAN……... 178

CAPITOLUL 7 Prelucrarea chemometrică a datelor experimentale ale probelor ceramice prin metoda analizei componentelor principale (PCA)……. 179
7.1. Prelucrarea datelor experimentale obţinute prin spectroscopie ATR-FTIR cu metoda chemometrică PCA……. 179
7.2. Concluzii la analiza statistică PCA a spectrelor ATR-FTIR…… 190
7.3. Prelucrarea datelor experimentale obţinute prin spectroscopie RAMAN cu metoda chemometrică PCA……. 192
7.4. Concluzii la analiza statistică PCA a spectrelor RAMAN……... 209

CAPITOLUL 8 Concluzii finale ……..... 213

ANEXE…….. 216
Anexa 1 - Analiza statistică a compoziţiei chimice elementală de masă determinată prin tehnica experimentală SEM-EDX a probelor ceramicilor autentice A1,3..38,40..41, 43,45,58..62 şi „false” A46,48..57,63..70……..... 217
Anexa 2 - Analiza statistică a distribuţiei dimensiunii porilor pentru datele experimentale obţinute prin microscopie electronică cu scanare SEM a probelor ceramice autentice A1..28 şi „false” A53..57,63..68……..... 246
Anexa 3 - Analiza spectrelor ATR-FTIR ale probelor ceramice autentice A1..45,58..62 şi „false”A46..57,63..70…… 254
Anexa 4 - Analiza spectrelor RAMAN ale probelor ceramice autentice A1..45,58..62 şi „false”A46..57,63..70……. 326

BIBLIOGRAFIE……...……... 377