

we applied a small modification on the sample tray block of the CHS unit. The modified sample tray block was able to handle 40 ml septa sealed glass vials, the proper size for 20 ml water samples (Septa-Co.).

After the small mechanical modification of the tray block, the AGE-CHS system became capable to handle water samples for DIC-14 preparation, using its original sampling and sample preparation system and software, provided by the IonPlus AG manufacturer. In AGE-CHS unit, the sample processing steps are tuneable in the driving software, according the desired applications. Comparing the regular carbonate preparation protocol of AGE-CHS unit, we have applied a bit longer He flushing time (5 mins) before acid addition and a bit longer sample transport/focusing time (5 mins) when the liberated CO₂ is transferred from the reaction vial to the zeolite trap of the AGE system. In this study we have tested the ultimate performance of the AGE-CHS for water DIC-14 analyses, including: C yield, different sample sizes, memory effect, cross contamination, process blank level and repeatability using multiple, parallel real water DIC samples and IAEA-C1 and -C2 standard reference material. The performance of the AGE-CHS unit was rather same (or even better) than the off-line, manual sample processing we routinely apply for water DIC-14 analyses at HEKAL.

The research was supported by the European Union and the State of Hungary, co-financed by the European Regional Development Fund in the project of GINOP-2.3.4-15-2020-00007 "INTERACT".

Talajszelvények vizsgálata sokváltozós adatelemzéssel segített Vis-NIR, FT-NIR és ATR FT-IR spektroszkópiai technikákkal

Nagy Livia Valentina¹, Slezsák János¹, Salgó András¹, Csizmadia Anna Mária², Bodóczy Iliana Dimitrula², Kővágó Ákos^{2,7}, Király Csilla³, Lange Thomas Pieter^{2,4,5,6}, Gelencsér Orsolya^{2,6}, Zacháry Dóra³, Jakab Gergely^{3,8}, Silye Kata Andrea², Szalai Zoltán^{3,8}, Szabó Csaba^{2,5}, Kovács István János^{4,5}, Gergely Szilveszter^{1*}

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék; ²ELTE TTK Földrajz- és Földtudományi Intézet, Kőzettan-Geokémia Tanszék, Litoszféra Fluidum Kutató Laboratórium; ³ELKH Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont, Földrajztudományi Intézet; ⁴MTA FI Lendület Pannon LiH₂Oscope Kutatócsoport, ⁵ELKH Földfizikai és Űrtudományi Kutatóintézet; ⁶ELTE TTK Környezettudományi Doktori Iskola; ⁷ELTE TTK Földtudományi Doktori Iskola; ⁸ELTE TTK Földrajz- és Földtudományi Intézet, Környezet- és Tájföldrajzi Tanszék

*gergely.szilveszter@edu.bme.hu

Az elektromágneses hullámok infravörös tartománya a kis energiájának köszönhetően roncsolásmentes vizsgálatokat tesz lehetővé. A közeli infravörös (near-infrared, NIR) és a közép- (vagy analitikai) infravörös (mid-infrared, (M)IR) régiók fény-anyag kölcsönhatásai a molekulák rezgési állapotáról adnak egyfajta kémiai ujjlenyomatot. Ilyenfajta ujjlenyomatokat kaphatunk a talajok vizsgálata esetén is, amely során a különböző alkotók spektrumainak összessége megmutathatja nekünk a különböző

talajok összetételbeli különbségeit. Ennek fényében méréseinket – a látható (visible, Vis) tartománnyal kiegészítve – diszperziós és Fourier-transzformációs (Fourier transform, FT) spektrofotométerekkel végeztük el a Badacsonytördemecen található Integrált Geodinamikai Állomás környezetéből származó talaj mintákon. Míg a Vis-NIR és FT-NIR spektrumok felvétele során diffúz reflexiók, addig az FT-IR mérések esetén csillapított teljes reflexiók (attenuated total reflection, ATR) mérés technikát alkalmaztunk. Az általunk vizsgált talajminták anyagi tulajdonságairól részle-tesebb leírás Csizmadia et al. (2023; jelen absztraktkötetben található) összefoglalójában olvasható. Munkánk a sokváltozós adatelemzéssel (multivariate data analysis, MVDA) kiemelt spektroszkópiai – így kémiai, olykor fizikai – változékonyságok, mintázatok feltérképezésére fókuszál a spektrumok matematikai előkeze-lései (például normalizációk, simítással kombinált deriváltak), majd klaszterelemzése (cluster analysis, CA) és főkomponens-elemzése (principal component analysis, PCA) segítségével, ezzel hozzájárulva a talajban le-játszó-dó folyamatok pontosabb értelmezéséhez.

Examination of soil profiles with multivariate data analysis supported Vis-NIR, FT-NIR and ATR FT-IR spectroscopic techniques

Due to its low energy, the infrared range of electromagnetic waves enables non-destructive analysis. The in-teractions between light and matter in the near-infrared (NIR) and mid- (or analytical) infrared ((M)IR) re-gions give a kind of chemical fingerprint of the vibrational state of molecules. This type of fingerprints can al-so be obtained when testing soils, during which the totality of the spectra of the various components can show us the differences in the composition of different soils. In light of this, our measurements were per-formed with spectrophotometers with dispersive and Fourier transform (FT) optical constructions, in addi-tion to the visible (Vis) range on soil samples from the surroundings of the Integrated Geodynamic Station located in Badacsonytördemic. While the Vis-NIR and FT-NIR spectra were recorded by diffuse reflection, the attenuated total reflection (ATR) measurement technique was used in the case of FT-IR measurements. A more detailed description of the material properties of the soil samples examined by us is provided by Csiz-madia et al. (2023; found in this abstract book) can be read in its summary. Our work focuses on the map-ping of spectroscopic (thus chemical, sometimes physical) variabilities and patterns highlighted by multivar-iate data analysis (MVDA), mathematical pretreatments of the spectra (e.g. normalization, derivatives com-bined with smoothing), followed by cluster analysis (CA) and principal component analysis (PCA), thereby contributing to a more accurate interpretation of the processes taking place in the soil.
