

СОРБЦИОННО-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ ТОКСИЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ХЕМОМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА PLS

Калинина О.В., Лакиза Н.В., Расин О.В.
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Загрязнение биосферы токсичными металлами представляет собой серьезную проблему, обусловленную тем, что металлы в природной среде не разлагаются и способны концентрироваться в объектах экосистемы. Именно поэтому, в настоящее время очень остро стоит проблема не только очистки воды от ионов токсичных металлов, но и мониторинга загрязнения ими природных вод.

Целью настоящей работы является оценка возможности применения метода ИК-спектроскопии диффузного отражения (ИКДО) для одновременного определения металлов в фазе сорбента.

Объектом исследования данной работы является выпускаемый промышленностью универсальный катионит КУ-1, одновременно извлекающий из азотнокислых растворов ионы Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} и Pb^{2+} в диапазоне кислотности 2.0–6.5. При этом степень извлечения всех ионов металлов практически не зависит от кислотности раствора и для ионов меди (II) составляет 93–95 %, для остальных исследованных металлов более 97 %. Установлено, что равновесие в системе «ионит – раствор солей металлов» достигается за 30 минут.

Полученные ИК-спектры диффузного отражения КУ-1, содержащего разные ионы металлов, свидетельствуют о невозможности выделения такого волнового числа, при котором будет наблюдаться поглощение только одного компонента. В такой ситуации не представляется возможным применение простых математических методов одномерной калибровки, основанных на законе Бугера–Ламберта–Бера, для количественной оценки содержания аналита в исследуемой пробе. Для решения подобных задач в последнее время успешно применяется такой хемометрический метод многомерной калибровки как метод проекции на латентные структуры (PLS).

Калибровочные модели для определения ионов токсичных металлов в фазе катионита были построены в интервале волновых чисел 7400–400 cm^{-1} с использованием обучающего и проверочного набора, состоящих из 61 и 16 образцов соответственно. Оптимальными параметрами для определения ионов токсичных металлов методом ИКДО является предварительная обработка спектров по методу Савицкого–Голея со значением степени полинома равным 3. Анализ полученных данных показывает, что для всех металлов получены удовлетворительные модели, для которых значения коэффициентов корреляции высоки, а стандартные погрешности предсказания низки.

Таким образом, метод ИКДО в сочетании с регрессией ПЛС может быть использован для одновременного определения ионов токсичных металлов непосредственно в фазе сорбента.