

# ТВЕРДОФАЗНО - СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СМЕСЕЙ КОБАЛЬТА, МЕДИ И НИКЕЛЯ В СОЧЕТАНИИ С ХЕМОМЕТРИЧЕСКИМИ АЛГОРИТМАМИ

*А.С. Шелпакова<sup>1</sup>, Н.А. Гавриленко<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 644077 г. Омск, пр. Мира 55а

<sup>2</sup>Томский государственный университет, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36  
[shelik85@mail.ru](mailto:shelik85@mail.ru)

Оптические чувствительные элементы могут быть использованы в качестве готовой аналитической формы для твердофазно-спектрофотометрического определения. Стандартный способ изготовления таких элементов – иммобилизация аналитического реагента на подходящем твердом носителе. Использование прозрачной полиметакрилатной матрицы в качестве носителя для иммобилизации реагентов позволило создать оптические чувствительные элементы, работающих на измерении светопоглощения. Однако создание индивидуальных химических оптических сенсоров высокой селективности является слишком трудной задачей, которая вряд ли будет решена в ближайшее время. Другой путь - использование массива малоселективных сенсоров с последующей обработкой данных известными хемометрическими методами, которые позволяют устранить основной недостаток спектрофотометрии – низкую селективность, связанную с наложением спектров и взаимодействием компонентов.

Цель данной работы – использование многомерных методов хемометрики (множественной линейной регрессии (МЛР) и проекции на латентные структуры (ПЛС)) для твердофазно - спектрофотометрического определения смесей тяжелых металлов без разделения компонентов с использованием полиметакрилатной матрицы с иммобилизованным 1-(2-пиридилазо)-2-нафтолом (ПММ-ПАН).

Объектами анализа были трехкомпонентные модельные смеси 2-х валентных катионов кобальта (Co), никеля (Ni) и меди (Cu). Полиметакрилатную матрицу с иммобилизованным реагентом (0,04 – 0,05 г) помещали в 50,0 мл раствора смеси металлов с различными концентрациями и перемешивали 10 мин. Каждая смесь была приготовлена не менее 3-х раз. Часть смесей использовали в качестве стандартных для создания обучающих выборок и вычисления по ним регрессионных коэффициентов методом МЛР и построения многомерных градуировок методом ПЛС. Остальные модельные смеси использовали в качестве тестовых для проверки результатов анализа. Программу «Optic-MLR», специально написанную в пакете MATLAB использовали для реализации метода МЛР, а программу Unscrambler для реализации метода ПЛС.

Спектры поглощения растворов и полиметакрилатной матрицы регистрировали на спектрофотометре Unico 2800 UV/VIS. При измерении оптических характеристик ПММ – ПАН до контакта и после контакта с раствором металла в качестве образца сравнения использовали немодифицированную полиметакрилатную матрицу. Для расчета концентраций металлов в смесях методом МЛР использовали спектральный диапазон 510-650 нм, в котором поглощение реагента отсутствует. При построении всех многомерных градуировок использовали один и тот же спектральный диапазон (350-650 нм), без дополнительной оптимизации, поскольку по методу ПЛС поглощение реагента не мешает определению основных аналитов.

Результаты анализа смесей с разным соотношением катионов 2-х валентных металлов методами МЛР и ПЛС показали, что все три компонента в тестовых смесях можно определять с погрешностями менее 10% отн., и относительными стандартными отклонениями не более 0,02.