# Использование многомерной градуировки при определении фтора, натрия и хлора в почвах и минералах методом лазерно-искровой эмиссионной спектрометрии

***Чиликин Б.С.***

*Студент, 2 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* [qeqe92@yandex.ru](mailto:qeqe92@yandex.ru)

При проведении полевых геологических работ необходимо получение данных об элементном составе отобранных проб непосредственно на месте проведения работ. Для определения средних и многих тяжелых элементов широкое распространение получили портативные рентгенфлуоресцентные (РФА) приборы, однако определение элементов легче магния с их использованием невозможно. Также при использовании этих приборов часто наблюдаются существенные систематические погрешности при определении ряда элементов, в частности хлора в почвах, вследствие матричных эффектов. С другой стороны, при геохимических поисках важно определять содержание натрия и хлора в почвах поскольку их высокое содержание может кардинально изменять физико-химические характеристики, ухудшать показатель биопродуктивности и в целом приводить к деградации почв. Фтор является токсичным элементом, и оценка его содержания в почвах является важной задачей. Для решения подобных задач в последние годы появились портативные приборы для лазерно-искровой эмиссионной спектрометрии (ЛИЭС), в которой мощное лазерное излучение используется для отбора пробы, а образующаяся плазма является как источником возбуждения, так и источником аналитического сигнала для определения элементов от водорода до урана. Однако, серьезной проблемой эмиссионного атомного анализа и, в частности, ЛИЭС является наличие спектральных помех мешающих элементов, что не позволяет достичь необходимой чувствительности и правильности анализа.

Для увеличения чувствительности определения галогенов предложено использовать молекулярную эмиссию двухатомных молекул в плазме, а для уменьшения влияния спектральных помех – математические алгоритмы для разделения перекрывающихся сигналов. Наиболее ценным представляется, что предложенные подходы не требуют каких-либо модификаций прибора. Соответственно, целью данной работы являлась оценка возможности экспресс определения натрия и хлора в почвах, а также фтора в апатитах с использованием многомерной регрессии на главных компонентах (МГК) для количественного анализа. Для построения многомерных градуировок предложено использовать диапазоны: 590-610 нм, содержащий полосы CaCl; спектр вблизи 330 нм для определения натрия и 529-540 нм для определения фтора по молекулярным полосам CaF. Для проверки правильности многомерной модели использовали метод leave one out кросс-валидации. Проведено сравнение результатов МГК регрессии с результатами одномерной классической регрессии (определение по градуировочному графику). Показано, что использование молекулярной эмиссии в сочетании с МГК позволяет определять Cl и F на уровне их среднего содержания в исследуемых образцах почв и апатитов. Выбор линии натрия, мало подверженной самопоглощению, позволил устранить систематическую погрешность при его определении по резонансным линиям вблизи 589 нм.