Спосіб визначення істинної величини оптичної густини інтенсивно забарвлених розчинів, що містять колоїдні частинки: пат. 66577 Україна: МПК F23C 5/00. № 2003077056; заявл. 28.07.2003; опубл. 17.05.2004, Бюл. № 5. 2 с.

Винахід відноситься до аналітичної хімії, а саме до способів аналізу розчинів. що містять колоїдні частинки (КЧ).

Світло, що проходить через такий розчин, розсіюється на КЧ, внаслідок чого залежність оптичної густини розчину з концентрацією цільового компонент (ЦК) не відображується прямою лінією, що проходила б через початок координат. Це приводить до похибки у визначенні концентрації одного ЦК загальновідомими методами (Булатов М.И., Калинкин И.П. Практическое руководство по фотометрическим методам анализа. -5-е изд., перераб. - Л.:Химия, 1986. -432с.) і робить зовсім непрацездатними сучасні методи визначення концентрацій багатьох ЦК без їх розділення при одночасній присутності (Федин А.В. Журн. аналит. химии. -1994. -Т.49. -№2. -С.209).

Удосконалення способу спектрофотометричного аналізу складу розчинів, що містять КЧ, обумовлено необхідністю подальшого зменшення похибок при визначенні ЦК як класичними, так і сучасними хемометричними методами.

Відомо спосіб кількісного аналізу розчинів ЦК, що містять КЧ. шляхом виготовлення великої кількості стандартних розчинів, з концентраціями ЦК, що близькі тим, що одержані звичайним способом, ігноруючи присутність КЧ (Макулов Н.А. Заводск. лаборатория. -1976. -Т.12. -С.1457). Виміряну оптичну густину цих розчинів використовують для знаходження уточнених концентрацій ЦК і знову готовлять розчини ЦК для наступного наближення.

Але цей спосіб вельми трудомісткий і придатний для використання в дуже обмеженій ділянці концентрацій ЦК, за межами якої похибка в визначенні кількості ЦК настільки велика, що перевищує навіть саму величину концентрації ЦК.

Найбільш близьким по технічній суті і результату, що досягається шляхом планування повного факторного експерименту (Шахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. - М.:Высшая школа, 1985. -268с.). У цьому способі теж готується сукупність розчинів ЦК, але вже по спеціальному плану, який записується у вигляді матриці планування факторного експерименту.

Недоліком цього способу є те, що кількість факторів, m, що контролюються, невідома. Тому повне число експериментів, N (число стандартних розчинів ЦК) зростає у кількості показнової функції $N=2^m$. Тоді вже для звичайної кількості факторів, що контролюються, біля десятка, для забезпечення похибки декілька відсотків від концентрації ЦК число необхідних експериментів зростає до тисячі, що практично нереально.

Технічною задачею, яку вирішує винахід, що заявляється, є зменшення величини похибки визначення ЦК розчинів шляхом використання істинної величини оптичної густини.

Суть винаходу полягає у тому, що через розчин, який містить КЧ, пропускають монохроматичне світло, оптичну густину вимірюють у кюветах із різною товщиною шару рідини, причому світло використовують з довжиною хвилі, що відповідає максимуму поглинання розчину, а істину величину оптичної густини розчину визначають із системи рівнянь:

$$l\frac{1}{A'} = a + A'_{max} l \qquad (1)$$

$$A = A' + \lg\frac{1-\exp_{10}\left(-A'_{max}\right)}{1-\exp_{10}\left(A' - A'_{max}\right)}, \qquad (2)$$

де l - товщина шару рідини; А і А' - відповідно істинна оптична густина і та, що вимірюється; A'_{max} - граничне значення оптичної густини розчину ЦК, при вимірюванні у кюветі з великою товщиною шару рідини; a параметр, що вираховується, лінійної залежності. Приведені залежності обумовлені тим, що КЧ розсіюють світло, яке на них падає. Тоді при проведенні спектрофотометричних вимірювань у тій області спектру, де поглинання речовини, що досліджується. велике, можна прийняти, що розсіяне світло з довжиною хвилі, яка відрізняється від довжини хвилі монохроматичного світла, не поглинається даною речовиною (Felder B. Helv. chim, acta. -1964. -Vol.47, -P.488). В цьому разі маємо отримане нами співвідношення, що зв'язує істинну оптичну густину А і ту, що вимірюється (А'):

$$A' - A + \lg\left[1-\beta\left(1-10^{A}\right)\right] = 0 \qquad (3)$$

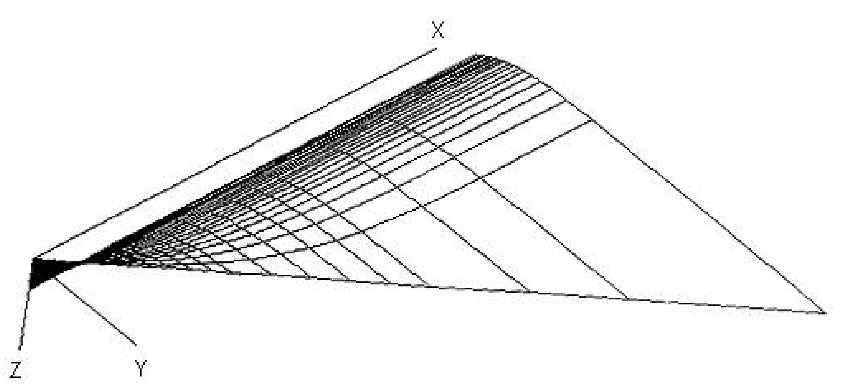
де β рівень розсіяного світла у долях одиниці $(0 \le \beta \le 1)$.

На кресленні приведено графік поверхні, який описується рівнянням $A' - f(l,\beta) = 0$ (l - товщина слою рідини, через який проходить світло). На цьому кресленні по осі X відкладені довжини кювет, що використовуються, з рідиною, яка містить ЦК і КЧ; по осі Y величини оптичної густини розчину, що вимірюється і аналізується; по осі Z - значення рівня розсіяного світла. З креслення видно, що, дійсно, при наявності у розчині КЧ оптична густина, що вимірюється, менша за істинну (при $\beta = 0$), і тим менша, чим більший рівень розсіяного світла β. Відсутність пропорційності між оптичною густиною і концентрацією ЦК приведе до помилкових результатів оцінки кількості останнього. Тим більшою помилкою будуть обтяжені результати вимірювання концентрацій сумішей декількох компонентів хемометричними методами. Але з іншого боку, величина третього члену суми у рівнянні (1) може вважатися поправкою до оптичної густини розчину з КЧ, що досліджується, A', для одержання істиної величини оптичної густини А. Остання вже прямо пропорційно зв'язана з концентраціями як одного, так і багатьох ЦК при їх одночасній присутності. Тоді рівняння (1) можна подати у вигляді (2), із якого виходить, що для одержання правильної (істинної) величини оптичної густини розчину ЦК, що містить КЧ, необхідно попередньо визначити для нього величину A'_{max}. Для цього треба виміряти оптичну густину розчину ЦК (A') у кюветах з різною товщиною шару рідини (l) при довжині хвилі, що відповідає максимуму поглинання розчину, і розв'язати систему рівнянь (2) і (4):

$$l\frac{1}{A'} = a + A'_{max}l \qquad (4)$$

Для прикладу у таблиці приведені результати вимірювання оптичної густини розчинів n-нітрофенілфлуоронату плюмбуму A', при різних рівнях розсіяння світла розчином останнього β, і розраховане на їх основі істинне значення оптичної густини розчину. Ці величини оптичної густини мають бути у розчині ЦК з урахуванням світла, розсіяного КЧ.

Таблиця

Отримання істинних величин оптичної густини A по значенням вимірюваної величини оптичної густини A‘ та рівня розсіяного світла β

№п/п	A‘	β	A	№п/п	A‘	β	A
1	0,010	0,1	0,022	21	0,06	0,5	0,286
2	0,010	0,2	0,025	22	0,07	0,1	0,158
3	0,010	0,5	0,041	23	0,07	0,2	0,183
4	0,010	0,9	0,259	24	0,07	0,5	0,347
5	0,010	0,95	1,000	25	0,08	0,1	0,158
6	0,02	0,1	0,045	26	0,08	0,2	0,211
7	0,02	0,2	0,0510	27	0,08	0,5	0,416
8	0,02	0,5	0,084	28	0,09	0,1	0,205
9	0,02	0,9	0,920	29	0,09	0,2	0,239
10	0,03	0,1	0,067	30	0,09	0,5	0,429
11	0,03	0,2	0,076	31	0,1	0,1	0,229
12	0,03	0,5	0,129	32	0,1	0,2	0,268
13	0,04	0,1	0,090	33	0,1	0,5	0,581
14	0,04	0,2	0,102	34	0,0010	0,99	0,267
15	0,04	0,5	0,178	35	0,0015	0,99	0,506
16	0,05	0,1	0,126	36	0,0020	0,99	1,074
17	0,05	0,2	0,129	37	0,011	0,95	1,917
18	0,05	0,5	0,230	38	0,001	0,99	0,267
19	0,06	0,1	0,135	39	0,0015	0,99	0,506
20	0,06	0,2	0,156	40	0,0020	0,99	1,079