



Международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых учёных

ЛОМОНОСОВ – 2025

Секция «Химия»

11–25 апреля 2025

Материалы конференции



lomonosov2025.chem.msu.ru





**Перенос многомерных градуировочных зависимостей между спектрометрами,
работающими на различных физических принципах**

Гапонова А.Г., Кирсанов Д.О.

Студент, 4 курс бакалавриата

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии,

Санкт-Петербург, Россия

E-mail: st097838@student.spbu.ru

При использовании современных методов аналитической химии, дающих большое количество сигналов, часто применяются методы многомерной обработки данных. Для построения многомерных градуировочных зависимостей в количественном анализе необходимо большое количество градуировочных образцов. Такие образцы зачастую труднодоступны и имеют высокую стоимость. Также на получаемые спектры влияет множество факторов: условия регистрации спектров, характеристики каждого отдельного спектрометра, квалификация исполнителя анализа и т.д., поэтому получаемые спектры могут отличаться по форме и интенсивности, что влечет за собой необходимость частого повторного построения многомерных градуировочных моделей. Для того чтобы снизить расходы на перестроение многомерных градуировок, в литературе предложены методы переноса таких моделей.

В литературе широко описаны методы переноса многомерных градуировочных зависимостей для БИК-спектрометрии, в том числе между БИК-спектрометрами и ИК-Фурье спектрометрами, работающими на схожих физических принципах [1]. Однако, отдельный интерес представляет возможность переноса многомерных градуировок между приборами, функционирующими на различных физических принципах, что открыло бы возможность создания «универсальных» градуировок под конкретную аналитическую задачу, применимых для разного аналитического оборудования и требующих лишь небольшого количества стандартных образцов для переноса моделей. Теоретическая возможность такого переноса многомерных градуировочных зависимостей между различными физико-химическими методами (УФ-видимая спектрометрия и рентгеновская флуоресцентная спектрометрия) была показана в работе [2]. В последнем случае, однако, использовались простые модельные смеси, и возможность переноса моделей для реальных данных от сложных образцов в настоящее время не ясна.

В данной работе изучается возможность переноса многомерных градуировочных моделей между спектрометрами, работающими на различных физических принципах, на примере ИК, БИК и ЯМР-спектрометров, при определении физико-химических характеристик образцов лигнина.

Литература

1. Greensill C.V., Wolfs P.J., Spiegelman C.H., Walsh K.B. Calibration Transfer between PDA-Based NIR Spectrometers in the NIR Assessment of Melon Soluble Solids Content // Applied spectroscopy. 2001. Vol. 55(5), P. 647–653.
2. Panchuk V., Kirsanov D., Oleneva E., Semenov V., Legin A. Calibration transfer between different analytical methods // Talanta. 2017. Vol. 170. P. 457–463.

