

Analüütide sisalduse määramine lahuses neeldumise kaudu

ORIGIN := 1

Ühikud

$$M := \frac{\text{mol}}{L}$$

$$\text{mM} := 10^{-3} \cdot M$$

$$\mu M := 10^{-6} \cdot M$$

Analüüdid



Olgu meil 3 erinevat analüüti (lahustunud ainet), mille tõelised molaarsed neeldumistegurid sõltuvana lainepikkusest on simuleeritavad funktsioonidega $\epsilon_1(\lambda)$, $\epsilon_2(\lambda)$ ja $\epsilon_3(\lambda)$. Olgu nende ainete tegelikud (mitteteadaolevad) kontsentratsioonid lahuses järgmised:

$$c_1 := 10 \cdot \mu M$$

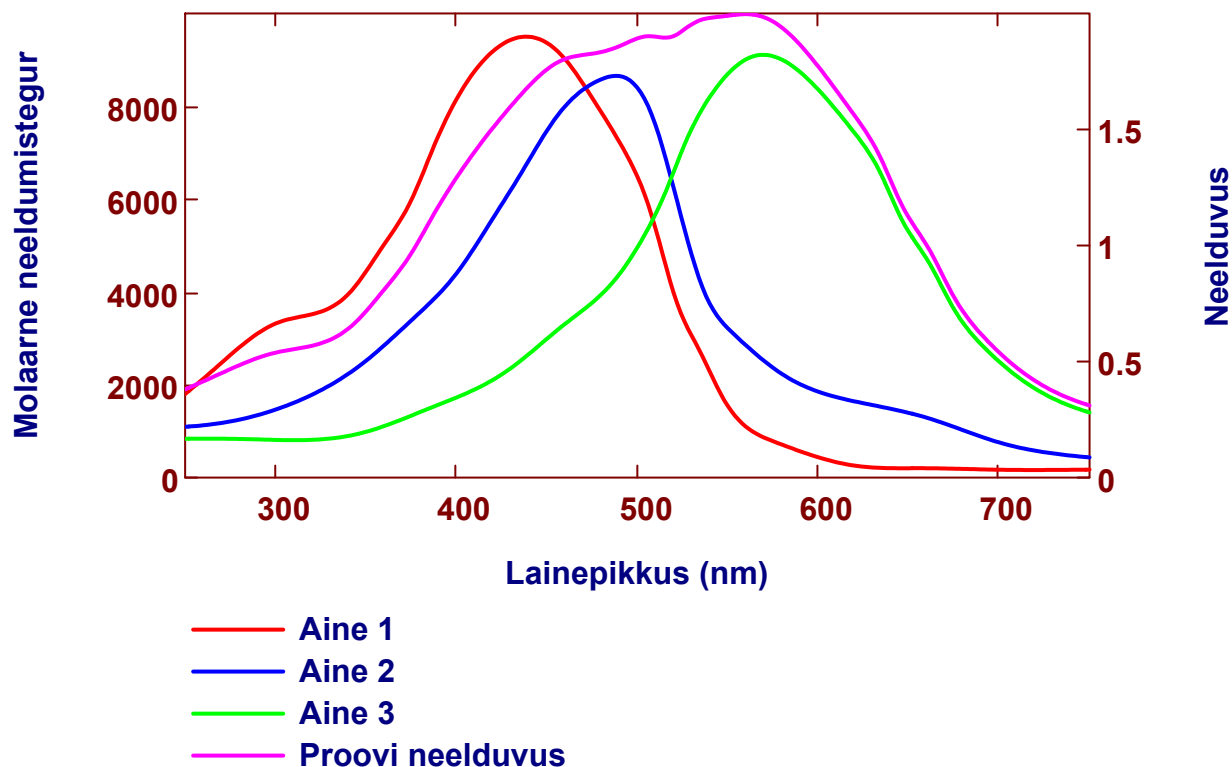
$$c_2 := 3 \cdot \mu M$$

$$c_3 := 20 \cdot \mu M$$

Lahust mõõdame küvetis, milles lahusekihi paksus $b := 10 \cdot \text{mm}$

Sellise lahuse teoreetiline neelduvusspekter on Beer'i seaduse põhjal

$$A(\lambda) := b \cdot c_1 \cdot \epsilon_1(\lambda) + b \cdot c_2 \cdot \epsilon_2(\lambda) + b \cdot c_3 \cdot \epsilon_3(\lambda)$$



Mõõtmise simulatsioon

Lainepikkuste vahemik ja samm $(\lambda_{\min} \quad \lambda_{\max} \quad \Delta\lambda) := (250 \cdot \text{nm} \quad 750 \cdot \text{nm} \quad 2 \cdot \text{nm})$

Andmepunktide arv $N_\lambda := \frac{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}{\Delta\lambda} + 1 = 251$

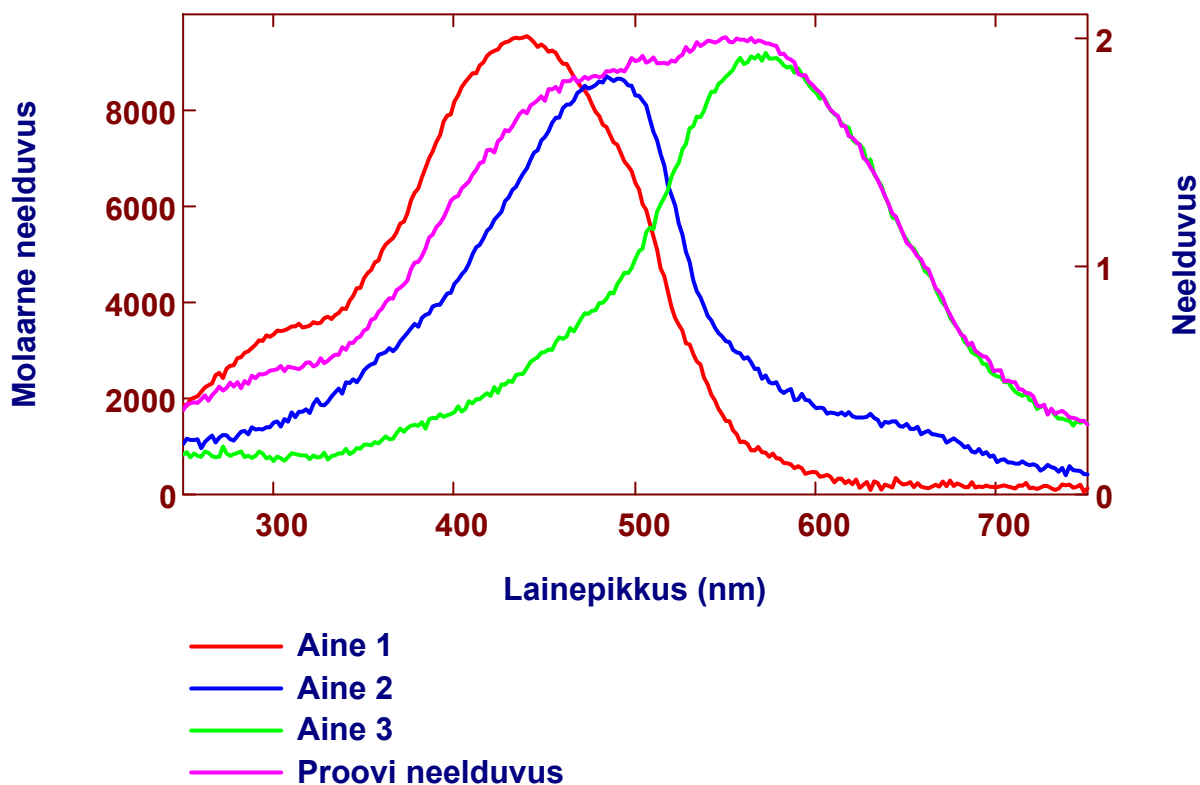
Andmepunktide indeksid $i := 1 \dots N_\lambda$

Andmepunktide lainepikkused $\lambda_i := \lambda_{\min} + (i - 1) \cdot \Delta\lambda$

Simuleerime mõõtmist, lisades signaalile müra amplituudiga $a := 500 \cdot \text{M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$.

$\epsilon'_1 := \text{Mõõda}(\epsilon_1, \lambda, a)$ $\epsilon'_2 := \text{Mõõda}(\epsilon_2, \lambda, a)$ $\epsilon'_3 := \text{Mõõda}(\epsilon_3, \lambda, a)$

$A' := \text{Mõõda}(A, \lambda, 0.01)$



Kontsentratsiooni arvutamine

Ülesanne on matemaatilise sisu poolest järgmine: leida sellised kordajad c'_1 , c'_2 ja c'_3 , et vektorite ϵ'_1 , ϵ'_2 ja ϵ'_3 lineaarkombinatsioon $b \cdot c'_1 \cdot \epsilon'_1 + b \cdot c'_2 \cdot \epsilon'_2 + b \cdot c'_3 \cdot \epsilon'_3$ oleks vähimruutude mõttes võimalikult sarnane vektoriga A' . Osutub, et sellel ülesandel on ühene vastus, mille saab lineaaralgebra vormis ka lihtsal kujul välja kirjutada. Esmalt konstrueerime matriksi, milles andmevektorid ϵ'_1 , ϵ'_2 ja ϵ'_3 on paigutatud üksteise kõrvale:

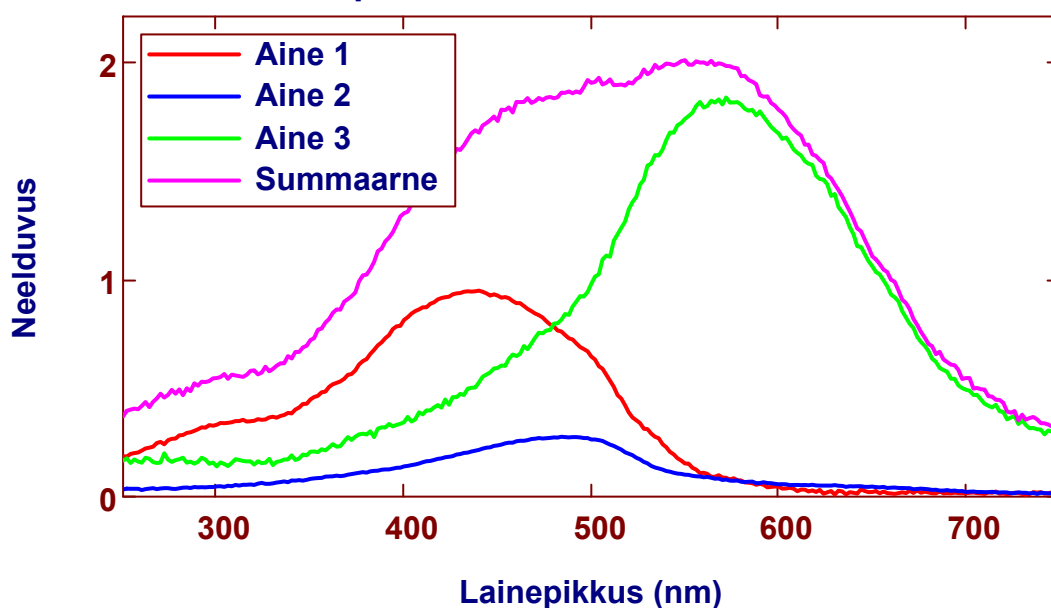
$$Q := \text{augment}(\epsilon'_1, \epsilon'_2, \epsilon'_3) = \begin{array}{c|ccc} & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1 & 18732.5 & 10517.5 & 8325.1 \\ 2 & 18539.5 & 11607.7 & 8775.4 \\ 3 & 19797 & 11368.3 & 7726.6 \\ 4 & 20168.3 & 11348.6 & 8548.3 \\ 5 & 20443.8 & 11493.4 & 8070.2 \\ 6 & 21375.9 & 9642.9 & 7824.1 \\ 7 & 22301.9 & 10922 & \dots \end{array} \cdot M^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$$

Seejärel kontsentratsioonid saab arvutada valemiga:

Võrdluseks "tõelised" kontsentratsioonid:

$$c' := \frac{1}{b} \cdot (Q^T \cdot Q)^{-1} \cdot Q^T A' = \begin{pmatrix} 9.907 \\ 3.159 \\ 19.928 \end{pmatrix} \cdot \mu\text{M} \quad c = \begin{pmatrix} 10 \\ 3 \\ 20 \end{pmatrix} \cdot \mu\text{M}$$

Erinevate analüütide panused summaarsesse neelduvusse:



===== TÖÖLEHE LÕPP =====