**МИНИСТЕРСТВО СЕЛЬСКОГО ХОЗЯЙСТВА**

**РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования**

**«Казанский государственный аграрный университет»**

**Кафедра агрохимии и почвоведения**

**КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА № 1**

**по дисциплине «Инструментальные методы исследовании»**

Студентка заочной формы обучения по направлению 35.04.03 Агрохимия и агропочвоведение

Профиль: «Экология почв и продовольственная безопасность»

Выполнила: Кашапова Д.Р

Шифр зач.книжки: АМ322572

Проверил: Фасхутдинов Ф.Ш

**Казань 2023**

**1. Биологические методы исследований**

Есть как минимум 6 методов биологических исследований:

**Сравнительно-описательный метод в биологии**

Его задача — описать новые для науки виды живых организмов, явлений или процессов. Также в его задачи входит сравнивать виды, процессы и явления между собой. Важно, что сравнение объектов исследования осуществляется в пределах конкретного уровня организации.

**Экспериментальный метод**

С его помощью исследуют, как устроены объекты, а также ход явлений и процессов. Эксперимент может быть полевым или лабораторным.

Отличие ***полевого*** эксперимента от лабораторного заключается в том, что он проводится в естественных условиях на экспериментальных участках: на них изучают влияние конкретных веществ на рост растений, изучается влияние хозяйственной деятельности человека на природные экосистемы, осуществляются испытания по борьбе с вредителями.

***Лабораторный*** эксперимент осуществляется только в помещении, в котором есть специальное для этого оборудование. Здесь эксперимент проходит на подопытных организмах — их специально разводят для опытов.

**Мониторинг**

Смысл мониторинга заключается в том, чтобы постоянно наблюдать процессы, происходящие в биологических объектах, отдельных экосистемах, популяциях и в биосфере в целом. Мониторинг осуществляется на нескольких уровнях: популяционно-видовом, биогеоценотическом и биосферном.

С его помощью определяют, в каком состоянии находятся объекты, делают прогнозы касательно возможных изменений и анализ их последствий.

Замечание 1

Поэтому благодаря мониторингу выявляют негативные изменения в структурах и функциях отдельных популяций, биогеоценозов и биосферы и прорабатывают меры по их охране.

**Моделирование**

Занимается изучением моделей и процессов, которые не поддаются наблюдению или проведению экспериментов. Особенность моделирования в том, что с его помощью могут быть получены только общие черты и общий ход объектов, явлений и процессов, наблюдение за которыми происходит в естественных условиях. С помощью моделирования ученые могут делать прогноз относительно последствий любых явлений и процессов. Кроме того, они могут их создавать и сравнивать с реально существующими.

Есть 2 варианта моделей:

**Статические**. Они не вмешиваются в структуру с реальными объектами. К примеру, модель строения цветка и различных органов;

**Динамические**. Эти модели уже вмешиваются в структуру реальных объектов. Они могут, например, менять видовой состав организмов, химический состав среды.

Пример 1

Динамическая модель водной экосистемы — аквариум.

**Математическое моделирование в биологии**

Метод основан на использовании компьютерной техники, которая дает возможность сохранять и обрабатывать большие объемы данных — все это при помощи специальных программ. С помощью математического моделирования ученые наблюдают как развиваются события, выделяют и комбинируют отдельные связи и т. д.

Пример 2

С помощью моделирования изучается модель пищевых связей в экосистеме, описываются связи между отдельными видами.

**Статистический метод**

Этот метод занимается тем, что обрабатывает накопленный материал. Статистически закономерность в биологии — правило или научный закон. Таким образом биологические законы представляют собой статистически выверенные закономерности — без исключений и определенным способом объясненные.  
Сбор биологических исследований важно осуществлять с учетом отдельных моментов:

* перед началом сбора нужно изучить аспекты и законы природопользования района, в котором планируется проведение исследования;
* сбор возможен только при наличии разрешения на его проведение, полученного от владельца территории;
* до начала исследования необходимо проконсультироваться в местном краеведческом сообществе либо учебном заведении относительно того, что и где будет собираться;
* исследуемые организмы запрещается выносить за пределы места их обитания, а также уничтожать их;
* при необходимости отбора организмов, берут минимальное количество экземпляров;
* важно фиксировать информацию в процессе проведения эксперимента, топографию местообитания, климатические условия и др.

**Как правильно вести дневник исследования**

В процессе описания эксперимента в специальном дневнике важно придерживаться определенного плана. Вот из каких пунктов состоит план:

* **название**. В нем важно сформулировать суть проблемы, которая исследуется. К примеру, вот так: изучение влияния кислотности почвы на развитие личинок многоножек;
* **цель или гипотеза**. Цель должна непосредственно затрагивать изучаемый объект. Если брать все тех же многоножек, то целью такого исследования может быть изучение влияния кислотности почвы на размеры личинок и определение оптимальной кислотности для каждой из фаз их развития;
* **методика и организация эксперимента**. Они представляют собой список последовательных действий, которые проводятся в ходе эксперимента. Проводимые действия кратко записываются. Важно указывать точки и места, где насекомые (личинки) были собраны;
* **результаты и наблюдения**. Их можно записывать в свободной форме. Для этого можно использовать графики, таблицы, карты, диаграммы и прочее. Иногда достаточно описать все словами;
* **обсуждение**. Под ними понимают короткие ответы на различные вопросы, но важно не повторять результаты. В ответах должна прослеживаться связь теории и полученных результатов;
* **заключение**. Оно необходимо для описания выводов по сформулированным ранее целям и задачам.

Если вы будете придерживаться плана, то сможете грамотно оформить исследование в дневнике.

**2. Теоретические основы метода атомно-эмиссионной спектрометрии**

Атомно-эмиссионная спектрометрия – метод качественного и количественного элементного анализа, основанный на получении и детектировании линейчатых спектров, возникающих в результате перехода внешних электронов атомов в возбужденное состояние и последующего самопроизвольного перехода этих электронов на более низкие и основные уровни с испусканием (эмиссией) избыточной энергии в виде квантов электромагнитного излучения.

Линейчатый спектр специфичен для данного элемента, поэтому надлежащий выбор данной линии и ее выделение с помощью диспергирующей системы позволяет аналитику проверить присут­ствие этого элемента и определить его концентрацию.

Каждый элемент периодической системы имеет определенное число элек­тронов, равное его атомному номеру. Электроны с определенной вероятностью расположены на уровнях и подуровнях вокруг ядра в соответствии с квантовой теорией. Квантовая теория была создана Планком, который предположил, что электромагнитная энергия поглощается или испускается дискретно; это озна­чает, что энергия не непрерывна. Энергетическое состояние каждого электрона в свободном атоме характеризуется четырьмя квантовыми числами:

* главное квантовое число *п*(*n* принимает значения от 1 до 7 для атомов в основном состоянии).
* орбитальное квантовое число *l*(*l* *=*0,1,2,...*,n-*1) соответствует подуровням *s,* *р, d, f.*
* магнитное квантовое число *m* (любое целое, удовлетворяющее условию *–l < m <*­ *+l* ).
* спиновое квантовое число *s*(*s* = ±1/2).

Полный угловой момент количества движения электрона как от орбитального, так и от спинового квантового числа. Для характеристики полного углового момента количества движения электрона вводится еще одно квантовое число – полное или внутреннее квантовое число *j*. Для атома, имеющего один валентный электрон *j = l + s = l* ± ½. Если орбитальное квантовое число больше нуля, то внутренне квантовое число имеет два значения, что соответствует двум различным энергетическим состояниям.

Если заряд ядра атома невелик (меньше 35), а число валентных электронов — два или более, то для совокупности этих валентных электронов вводят­ся новые квантовые числа, которые определяются как суммы соответст­вующих квантовых чисел отдельных электронов:

**L**= Σ*li*; **S**= Σ*si*; **J**= **L**+ **S**

Группа энергетических состояний, характеризующихся одними и теми же величинами **L**и**S,**имеет близкую энергию и образует один терм.

При записи символа терма прежде всего указывают его основную характеристику: квантовое число суммарного орбитального момента **L**. Если **L**= 0, то в символе терма записывают прописную букву *S*, если **L**= 1, то пишут *Р*. **L**, равные 2 и 3, обозначают буквами *D*и *F* соответственно. Слева в виде верхнего индекса указывают число близких по энергии состояний, которые образует данный терм, то есть его мультиплетность. Мультиплетность равна 2**S**+ 1, где **S –**суммарный спин атома. Таким образом, мультиплетность на единицу больше, чем число неспаренных электронов в атоме. Если мультиплетность терма равна 1, то его называют одиночным или синглетным термом. Терм с мультиплетностью, равной 2, называют двойным или дублетным. Справа внизу от буквенного обозначения **L**в виде индекса записывают значения *j*. Перед обозначением терма указывают значение главного квантового числа *n*. Для полностью заполненных электронных подуровней (*s*2, *p*6, *d*10) **L**+ **S**равно 0.

Например, в атоме натрия первый и второй энергетические уровни заполнены полностью, поэтому термы этого атома определяются его единственным валентным электроном. В основном состоянии этот электрон находится на 3*s*-подуровне. В этом случае терм атома натрия обозначается так:

32*S1/2*. Следует обратить внимание на левый верхний индекс 2, который свидетельствует о формальной мультиплетности этого терма. На самом же деле все термы *S* являются синглетными (одиночными). При возбуждении атома натрия электрон с подуровня 3*s* переходит на более высокие подуровни. Первое возбужденное состояние соответствует переходу электрона на подуровень 3*р*. В этом случае терм атома натрия записывают как 32*Р*3/2, 1/2. Такая запись соответствует следующим значениям квантовых чисел: *n*= 3, *l*= 1, *j*=3/2 или ½. Этот терм – дублет.

Существуют правила отбора, указывающие, между какими энергетическими уровнями переходы возможны, а между какими – нет. Возможные переходы называют разрешенными, а невозможные – запрещенными. Перечислим основные правила отбора:

1. Разрешены переходы, при которых терм меняется на единицу. Согласно этому правилу возможны переходы *P-S, D-P*, но невозможны переходы *P-P, D-D*или*D-S*.

2. Внутренне квантовое число при переходе может меняться только на ±1 или совсем не меняться. Запрещены переходы, при которых Δ*J*= ±2.

3. Разрешены переходы без изменения мультиплетности.

Например, в атоме натрия разрешен переход с подуровня 3*р*(дублетный терм 32*Р*3/2,1/2)на подуровень 3*s* (синглетный терм 32*S*1/2). Этот переход вызывает появление в спектре натрия двойной желтой линии (дублета). Этот переход полностью соответствует правилам отбора. В соответствии с первым правилом разрешены переходы *Р –S*. Согласно второму правилу Δ*J* может равняться ±1, как при переходе 32*Р*3/2- 32*S*1/2, или 0, как при переходе 32*Р*1/2- 32*S*1/2. Не нарушается и третье правило, так как формальная мультиплетность терма 32*S*1/2равна 2.

Наиболее яркой линией в спектре является линия, вызванная переходом с первого возбужденного уровня на основной. Такую линию называют резонансной.

Спектр атома любого элемента существенно отличается от спектра его иона в связи с изменением числа оптических электронов в результате ионизации. В таблицах спектральных линий рядом с символом химического элемента приводят римскую цифру, по которой можно судить о кратности ионизации. Цифра **I**относится к нейтральному атому, цифра **II**– к однократно ионизированному атому, т.е. катиону с зарядом +1.

В соответствии с правилами отбора и возможными возбужденными уровнями каждый элемент периодической системы может проявлять набор линий (спектр), специфичный для этого элемента. Это объясняет, почему комбинации линий элемента позволяет провести качественный анализ.

Частицы А1 **I** и А1 **II** испускают относительно про­стые спектры, т. е. с ограниченным числом линий. В таком же диапазоне длин волн уран может испускать несколько десятков тысяч линий, что приводит, вероятно, к наиболее сложному из наблюдаемых спектров. Однако, если ре­зонансные линии можно наблюдать в любом источнике излучения, то линии, возникающие из высоковозбужденных состояний, можно наблюдать только с высокотемпературными источниками излучения или при специальных условиях возбуждения.

Излучение, испускаемое пробой, в которой имеются все компоненты за ис­ключением определяемого, называют фоновым излучением*.*Оно состоит из линий, испускаемых другими (сопутствующими) элементами и континуума, возникающего из неквантуемых переходов.

2.1.3. Интенсивность спектральных линий.

Количественный анализ возможен, если интенсивность линии можно свя­зать с концентрацией испускающих частиц. Интенсивность линии пропорци­ональна:

1) разности энергий верхнего *(Em )*и нижнего *(Еk)*уровней перехода;

2) электронной заселенности (*nm*) верхнего уровня *(Ет)*;

3) числу возможных переходов между *Ет*н *Еk*в единицу времени. Эта ве­личина выражается вероятностью перехода *А;*ее определение дано Эйн­штейном.

Таким образом, интенсивность линии *I*можно выразить соотношением

*1~*(*Ет-Еk*)⋅*А⋅пт*

Связь между заселенностями различных уровней была описана Больцма-ном. Если рассматривать заселенности *пт*и *пk*уровней *Ет*и *Ek*соответствен­но, то их отношение определяется уравнением Больцмана:

https://studfile.net/html/2706/152/html_EzinTdpPpM.kDzg/img-inmNWV.pnghttps://studfile.net/html/2706/152/html_EzinTdpPpM.kDzg/img-wybcAA.png

где *k* — константа Больцмана (*k* = 1,380⋅10-23 Дж/К = 0,695см-1⋅ К-1 = 0,8617⋅ 10-4эВ/К), *Т* — температура источника излучения и *g —*статистиче­ский вес (2*J* + 1), *J* — квантовое число полного электронного углового момен­та.

Так как заселенность возбужденных уровней пропорциональна экспоненте величины (— *Е),*то при увеличении *Е*заселенность очень быстро уменьшает­ся. Возможный путь преодоления этого ограничения заключается в исполь­зовании высокотемпературных источников излучения, например плазмы. Для основного состояния *Е =*0 и:

https://studfile.net/html/2706/152/html_EzinTdpPpM.kDzg/img-PuU0uv.png

Чтобы получить отношение *пт*кобщей заселенности уровней атома (или иона) *N*

*N*= *n*0*+ n*1*+ ... + n*m*+ ...*

можно просуммировать члены типа *gт*ехр*(—Ет/kТ}*для всех возможных уровней и определить статистическую сумму по состояниям *(Z)*в следующем виде:

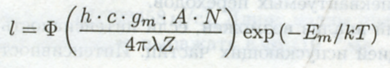
Z = *g*0 + *g*1exp(-*E*1*/kT*) + …+ *g*mexp(-*E*m*/kT* ) + …

Уравнение Больцмана принимает вид:

https://studfile.net/html/2706/152/html_EzinTdpPpM.kDzg/img-1_Qf11.png

Статистическая сумма по состояниям есть, следовательно, функция темпера­туры. Однако в диапазоне температур большинства источников излучения, используемых в аналитических приложениях, т. е, 2000-7000 К, эти изменения малы или даже ничтожны.

Значит, интенсивность линии может быть записана в виде:



где Ф – коэффициент пересчета с учетом изотропности по телесному углу 4π стерадиан.

Из этого уравнения видно, что интенсивность линии *l* пропорциональная числу атомов *N*.

Когда источник излучения достаточно стабилен и сохраняет постоянную температуру, статистическая сумма по состояниям *Z*будет оставаться посто­янной и число атомов (ионов) *N*будет пропорционально концентрации *с*. Для данной линии определяемого элемента *g*m, *А,*λ и *Ет*постоянны. Следова­тельно, интенсивность линии *l* пропорциональна *с*, что позволяет проводить количественное определение, В относительном количественном анализе ис­пользуют ряд образцов сравнения для построения градуировочного графика, т. *е.*зависимости интенсивности от концентрации определяемого элемента. Ин­тенсивность линии определяемого элемента в неизвестной пробе используют для нахождения его концентрации по градуировочпому графику. Теоретически возможно выполнить также абсолютныйколичественный анализ, т. е. анализ без использования процедуры градуировки. Однако абсолютный количествен­ный анализ требует знания температуры, телесного угла испускания и т. д. Эти измерения в рутинном анализе осуществить нелегко.

Следует отметить, что в случае постоянной концентрации определяемого элемента, любые малые изменения характеристик источника излучения могут приводить к изменениям температуры и последующим изменениям интенсив­ности линии из-за изменения заселенности возбужденного уровня. При рас­смотрении резонансной линии Аl **I** 396,15им *(Ет =*25347см"1) увеличение температуры источника излучения на 100 К соответствует увеличению экспо­ненциального члена *(—Ет/kТ)*примерно на 50% и 5% при 3000 К и 6000 К соответственно. Это объясняет, почему для получения хорошей воспроизводи­мости и сходимости, а также во избежание дрейфа аналитического сигнала, требуется высокая стабильность источника.

В атомно-эмиссионной спектрометрии источник фактически играет двоя­кую роль: первый этап состоит в атомизации анализируемой пробы с целью получить свободные атомы, обычно в основном состоянии; второй — в возбуж­дении атомов в более высоколежащие энергетические состояния. Идеальный источник для эмиссионной спектрометрии должен проявлять отличные анали­тические и инструментальные характеристики. Аналитические характеристи­ки включают число элементов, которые могут быть определены, правильность и воспроизводимость, селективность, отсутствие физических и химических по­мех, долговременную стабильность, концентрационный динамический диапа­зон и пределы обнаружения. Более того, эмиссионная система должна быть способна работать с пробами любого типа, независимо от их формы (жидкой, твердой или газообразной), с возможностью использовать ограниченное коли­чество пробы. Инструментальные характеристики, представляющие интерес, включают простоту работы и обслуживания, автоматизацию, производитель­ность, надежность и размеры системы. Следуеттакже уделить некоторое вни­мание капиталовложениям и стоимости работы.

**3. Анализ воды методом атомно-абсорбционной спектрометрии**

[Метод атомно-абсорбционной спектроскопии](https://www.chem21.info/info/1760470), обладающий высокой экспрессностью и хорошей точностью, с з спехом применяют для [анализа природных](https://www.chem21.info/info/656586) и сточных вод [170, 309—313]. Преимущество [метода атомной абсорбции](https://www.chem21.info/info/18477) перед [многими методами](https://www.chem21.info/info/1385890) анализа вод состоит в его [высокой селективности](https://www.chem21.info/info/875848), низких [пределах обнаружения элементов](https://www.chem21.info/info/583498), в простоте [подготовки проб](https://www.chem21.info/info/40268) к анализу, поскольку в большинстве случаев отпадает [необходимость проведения](https://www.chem21.info/info/1055817) операций, связанных с отделением мешающих элементов, а также в [универсальности конечной](https://www.chem21.info/info/1463450) [продукции анализа](https://www.chem21.info/info/642470), т. е. возможности [определения нескольких элементов](https://www.chem21.info/info/1256583)-примесей из одного раствора по единой методике с получением [конечных результатов](https://www.chem21.info/info/1829514) в [единицах концентрации](https://www.chem21.info/info/17663). Это обеспечило ему [широкое применение](https://www.chem21.info/info/1524291) в самых [различных областях науки](https://www.chem21.info/info/1845354) промышленности, [сельского хозяйства](https://www.chem21.info/info/72275). И тем не менее [метод атомно-абсорбционного анализа](https://www.chem21.info/info/337220) при всех его достоинствах не следует считать универсальным, способным заменить все остальные, ранее [известные методы анализа](https://www.chem21.info/info/1465204). Так, при [анализе больших партий](https://www.chem21.info/info/1896767) однотипных проб, когда возможно [прямое определение](https://www.chem21.info/info/130550) какого-либо [химического элемента](https://www.chem21.info/info/2336), [метод пламенной атомно-абсорбционной](https://www.chem21.info/info/1554202) спектроскопии по производительности обычно превосходит титриметрические и [спектрофотометрические методы](https://www.chem21.info/info/169774). Он может быть также успешно применен при [анализе проб](https://www.chem21.info/info/76144) нестандартного состава в случае [относительно больших концентраций](https://www.chem21.info/info/1634227) определяемых элементов.

Наиболее перспективно [определение тяжелых металлов](https://www.chem21.info/info/519234) в морской воде атомно-абсорбционным методом. В СССР этот метод для [анализа морской воды](https://www.chem21.info/info/195974) не применялся, но использовался для [определения некоторых металлов](https://www.chem21.info/info/392669) в [водах суши](https://www.chem21.info/info/1616347). За рубежом предложено [несколько вариантов](https://www.chem21.info/info/1838115) [атомно-абсорбционного определения металлов](https://www.chem21.info/info/1755578) в [морской воде](https://www.chem21.info/info/69623). Остановимся на некоторых из нпх.    
    Для [определения содержания меди](https://www.chem21.info/info/1585463) в руде воспользовались атомно-абсорбционным методом анализа. [Навески руды](https://www.chem21.info/info/1790224) 1 г растворили в [царской водке](https://www.chem21.info/info/1588) и [полученный раствор](https://www.chem21.info/info/17739) разбавили водой до 100 сиЛ   
    Предложен [атомно-абсорбционный метод определения](https://www.chem21.info/info/220600) ртути с использованием [метода холодного пара](https://www.chem21.info/info/1434076) [после предварительного](https://www.chem21.info/info/724069) концентрирования ее [полимерным тиоэфиром](https://www.chem21.info/info/556155). [Метод применим](https://www.chem21.info/info/774412) для [анализа природных](https://www.chem21.info/info/656586) и сточных вод.    
    [Большое количество](https://www.chem21.info/info/472531) работ австралийских аналитиков посвящено разработке и применению атомно-абсорбционных методов анализа сельскохозяйственных материалов (почв, [золы растений](https://www.chem21.info/info/1419375), воды) и [биологических препаратов](https://www.chem21.info/info/784586) ([сыворотки крови](https://www.chem21.info/info/91064), мочи, слюны, мышечных тканей и т. д.).