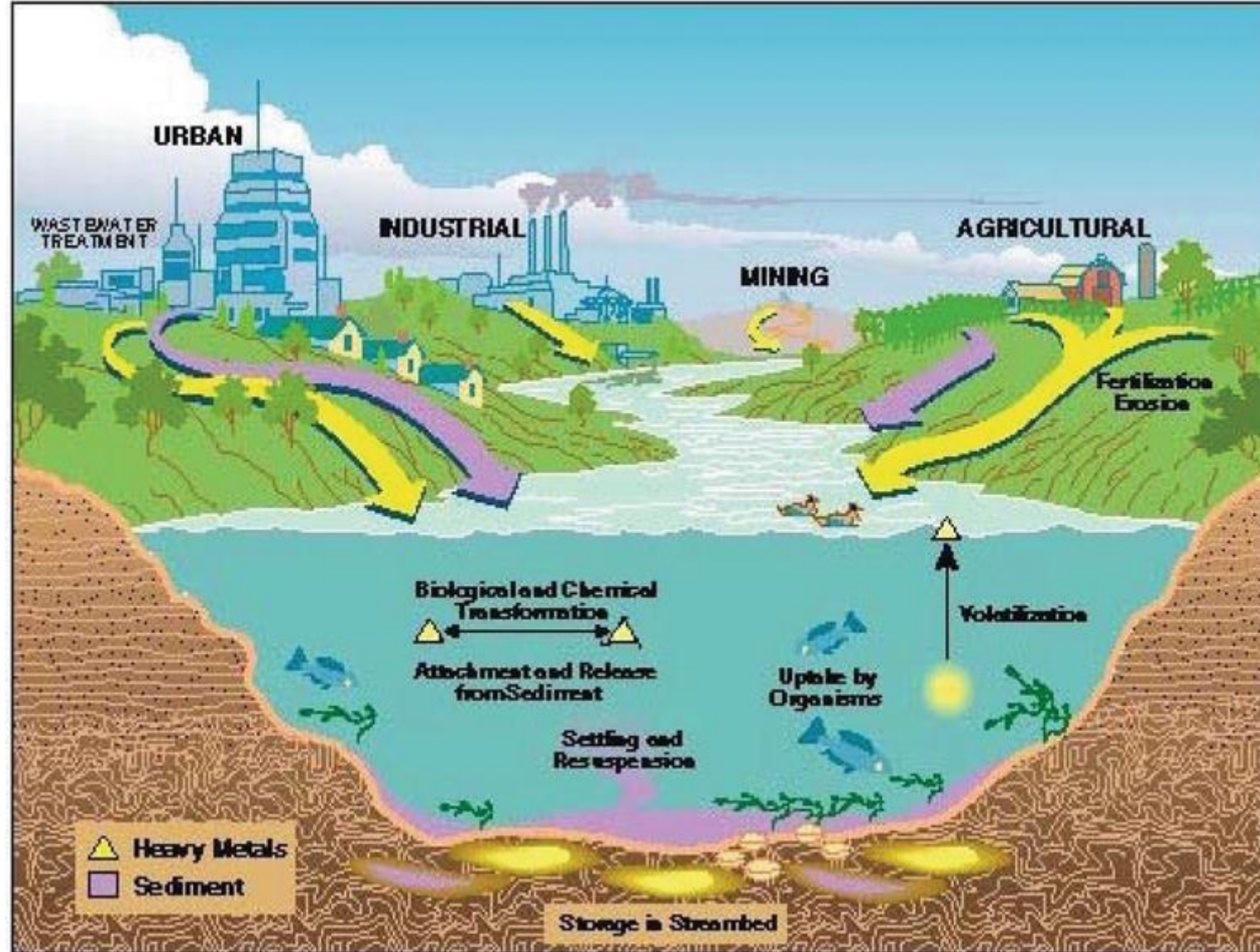


# Забруднення ґрунту важкими металами

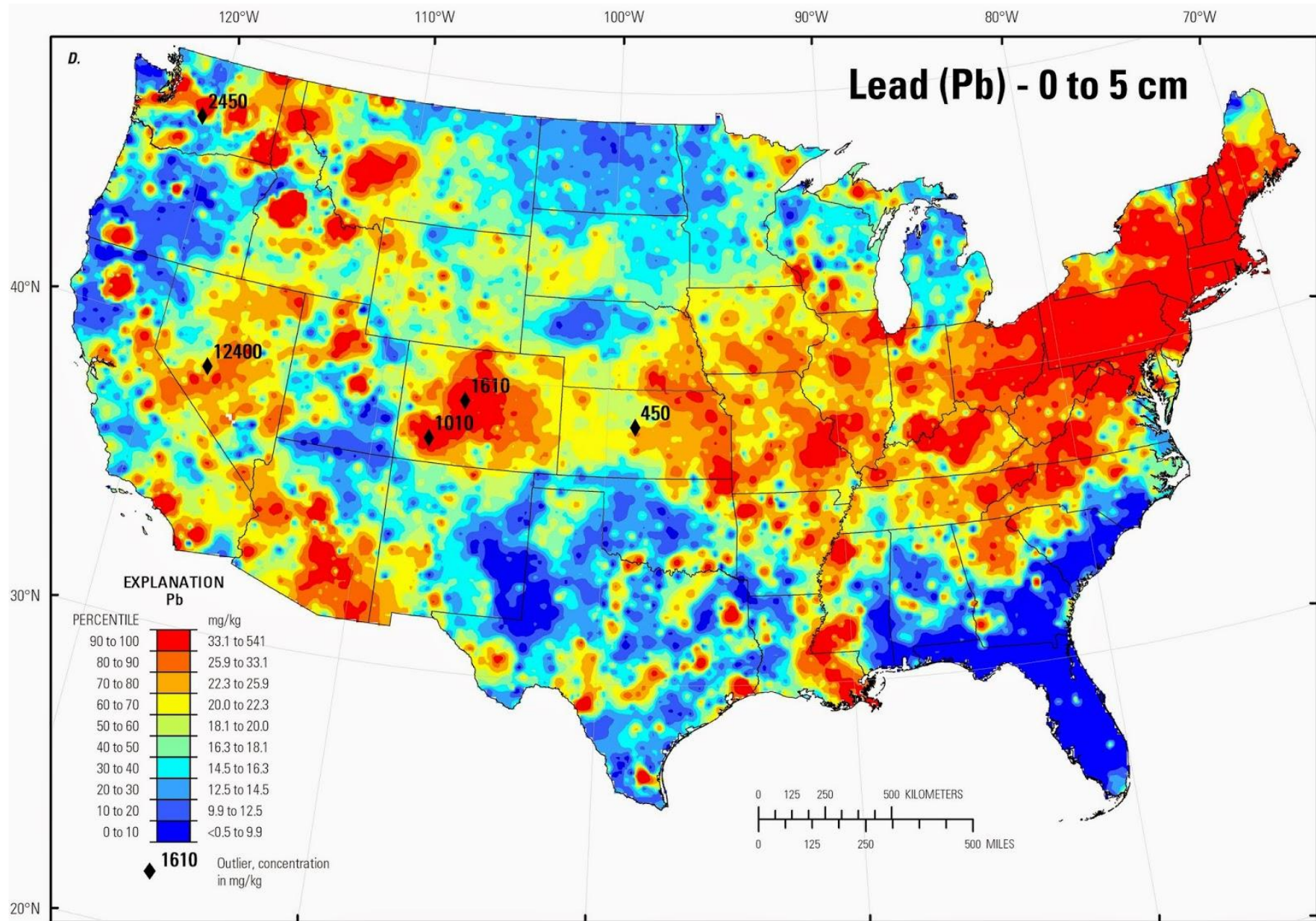


- Важкі метали в ґрунтах є одними з найнебезпечніших забруднювачів навколишнього середовища завдяки своїй токсичності, стійкості, легкому поглинанню рослинами та тривалому біологічному періоду напіврозпаду.
- Вони можуть зруйнувати нормальне функціонування ґрунтів, спричинити стрес для культур, ускладнити їх ріст.
- При поглинанні сільськогосподарськими культурами вони також можуть потрапити в харчовий ланцюжок і завдати шкоди здоров'ю людини. Точного визначення, що таке важкий метал, не існує.
- Прийнято вважати, що важкі метали є екологічно небезпечними речовинами, відкладення яких у ґрунтах і поглинання рослинністю впливають на родючість ґрунту, розвиток і продуктивність рослин. Загальноприйнятими є Pb, Cd, Cu, Zn, As, Mn і Cr.

# Шлях забруднювача важкими металами



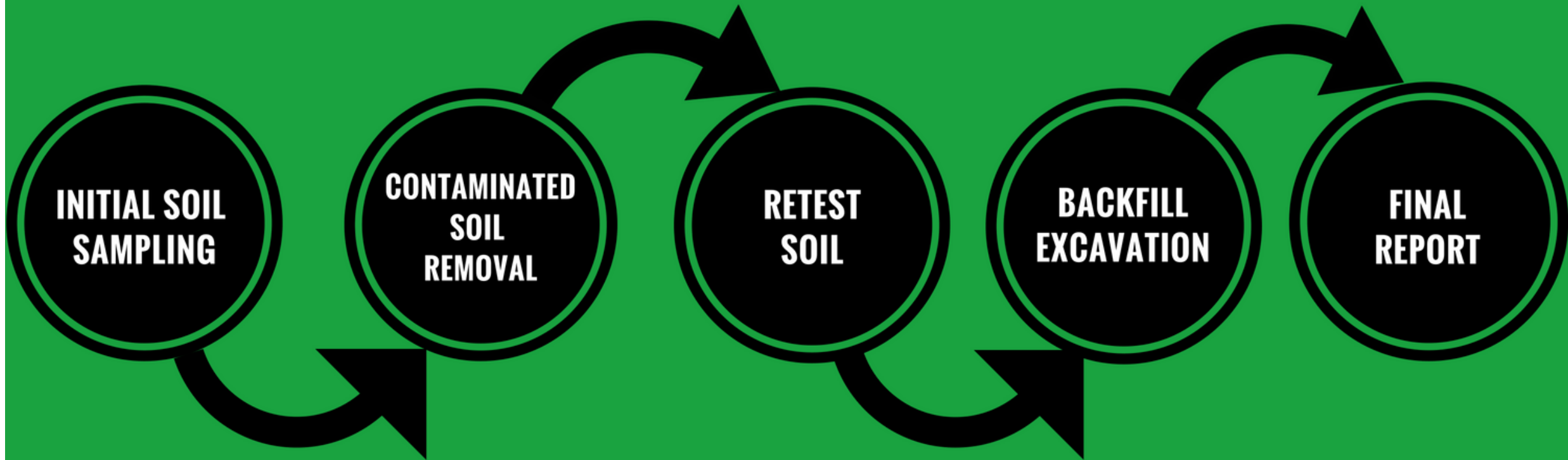
# Забруднення ґрунту важкими металами – геопросторовий аналіз



# Кількісна оцінка рівнів забруднення ґрунтів та забруднюючих речовин

5 BASIC STAGES FOR:

# CONTAMINATED SOIL REMOVAL



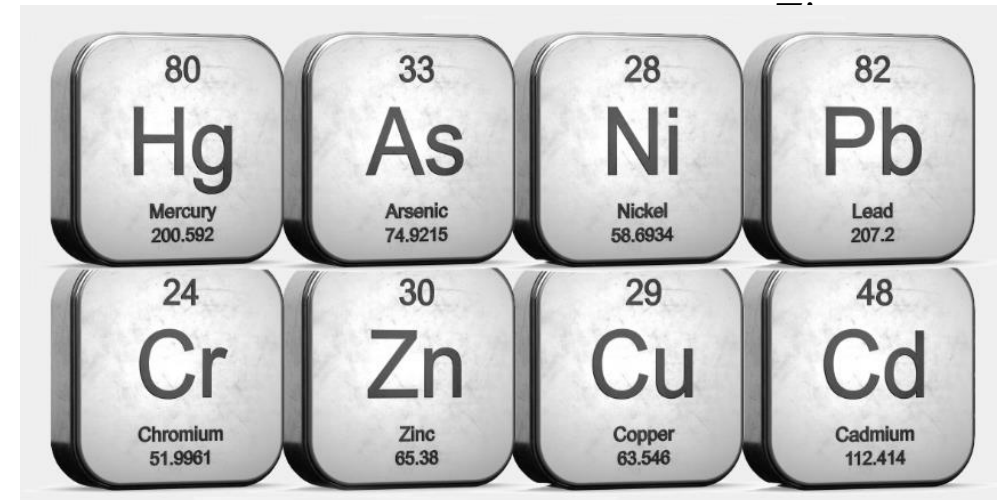
# Поширені забруднювачі важких металів



Antimony  
 Arsenic  
 Barium  
 Beryllium  
 Cadmium  
 Chromium  
 Cobalt  
 Copper  
 Lead  
 Nickel  
 Selenium



Hb Conc	Hb Error	Sr Comp	Sr Comp	Sr Comp	Sr Conc
43	1				223
1	0				15
22	1				493
361	2				15
39	1				184
5	0				99
24	1				189
12	1				96
17	0				104
3	0				864
<LOD	3				291
32	1				1088
13	1				294
3	0				434
3	0				273
67	1				27
4	1				320
24	1				221
18	1				239
86	1				21
37	1				166
54	1				112
34	1				99
62	1				181
55	1				177



# Виявлення забруднення важкими металами раманівськими спектральними методами



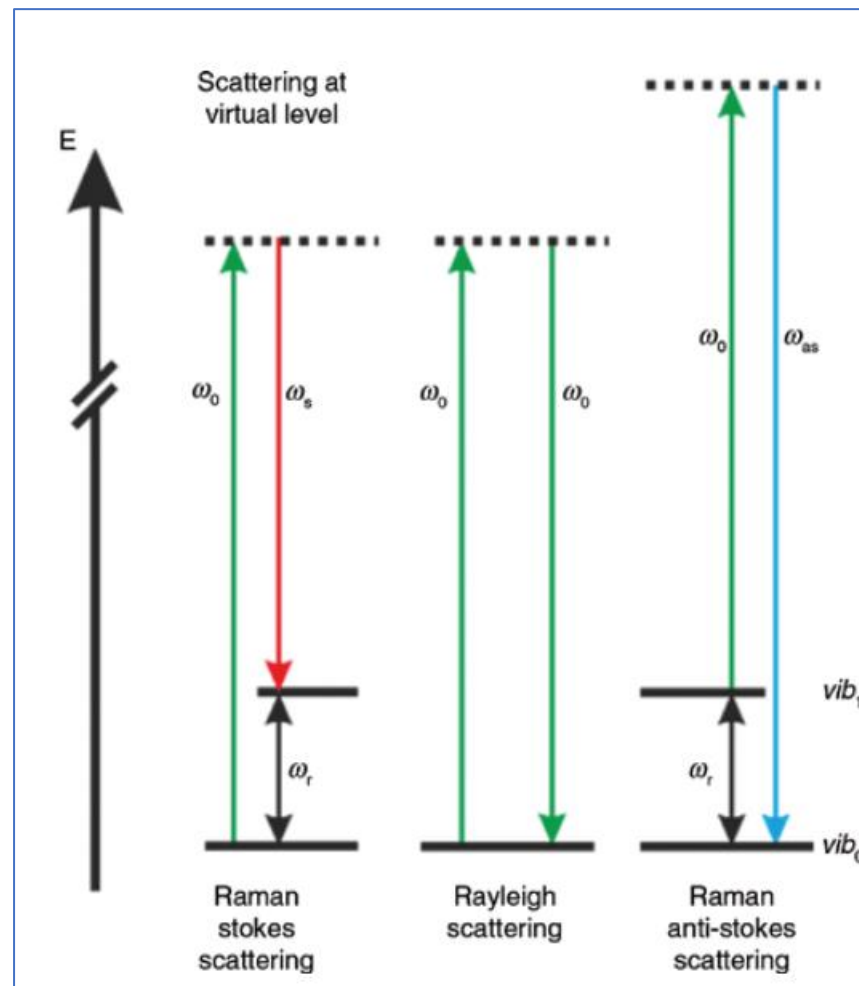
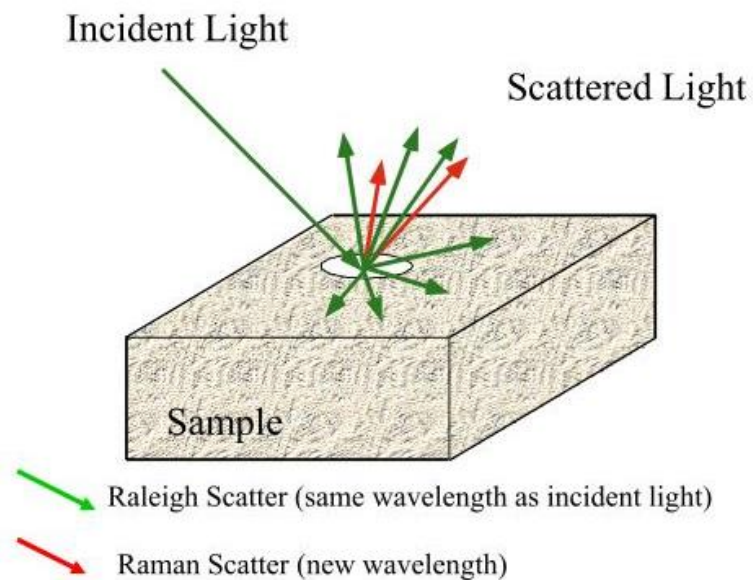
# Комбінаційне розсіювання або «комбіноване розсіювання» або «комбінаторне розсіювання»



1923 р. – Смекал передбачив непружне розсіювання.  
1928 – Раман і Крішнан спостерігають вторинне випромінювання від чистих розчинників.

У 1998 році ефект Рамана був визнаний Американським хімічним товариством Національною історичною хімічною пам'яткою на знак визнання його важливості як інструменту для аналізу складу рідин, газів і твердих тіл.

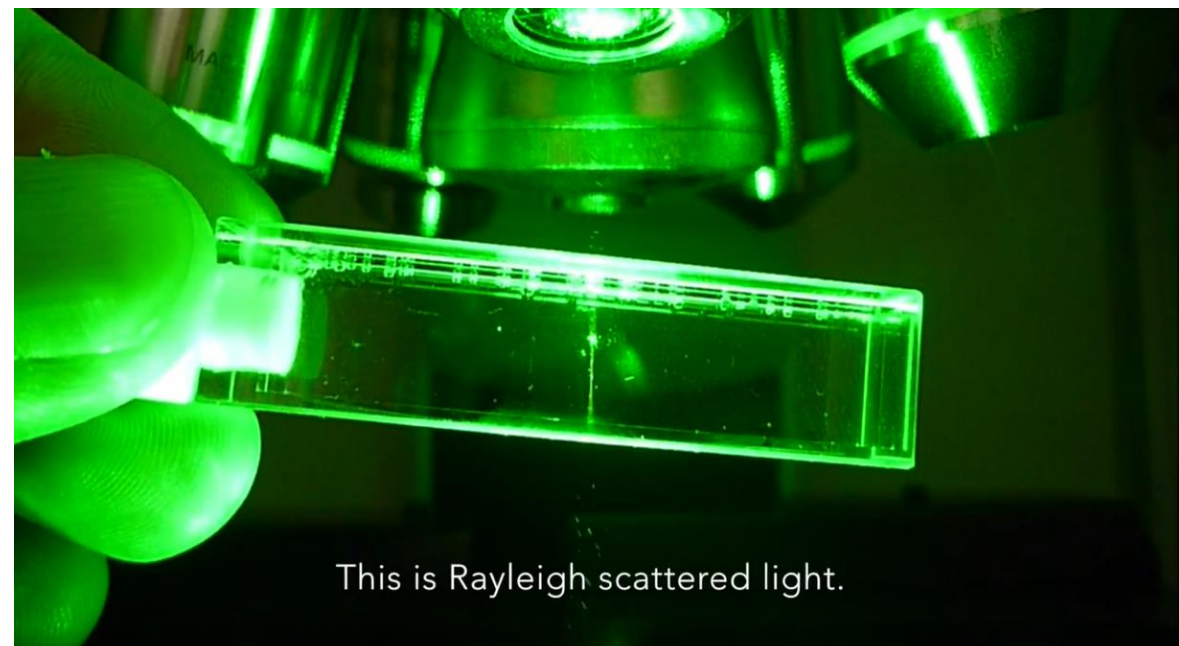
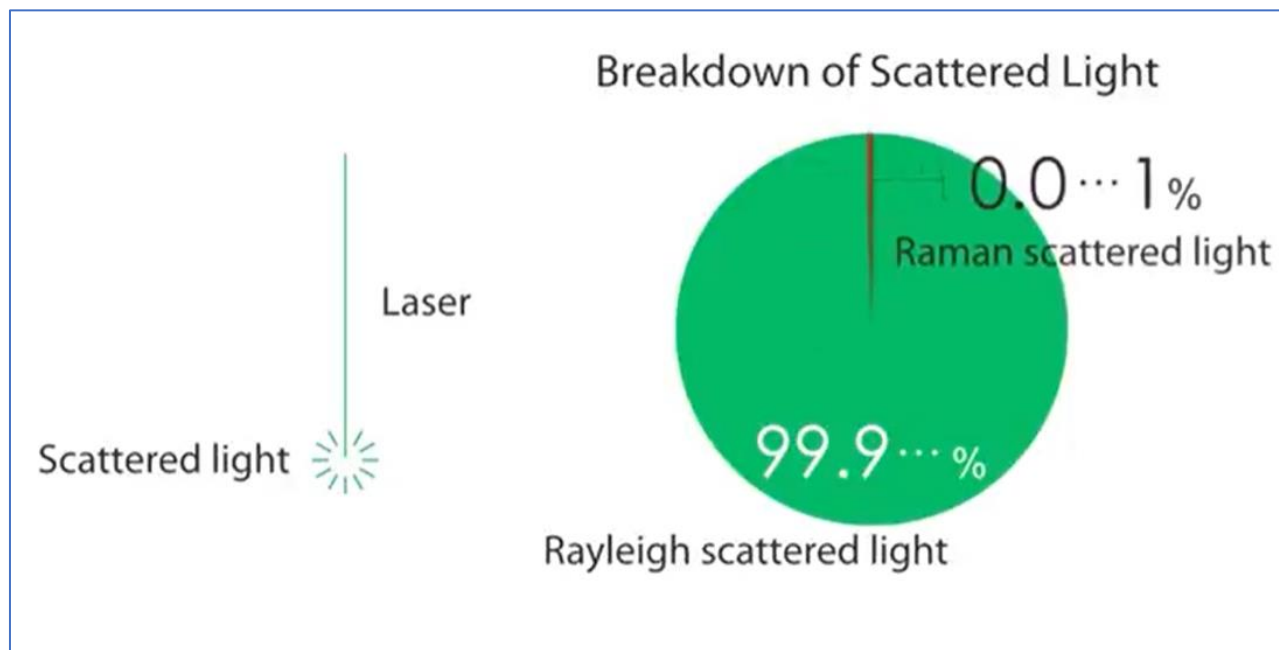
# Принципи



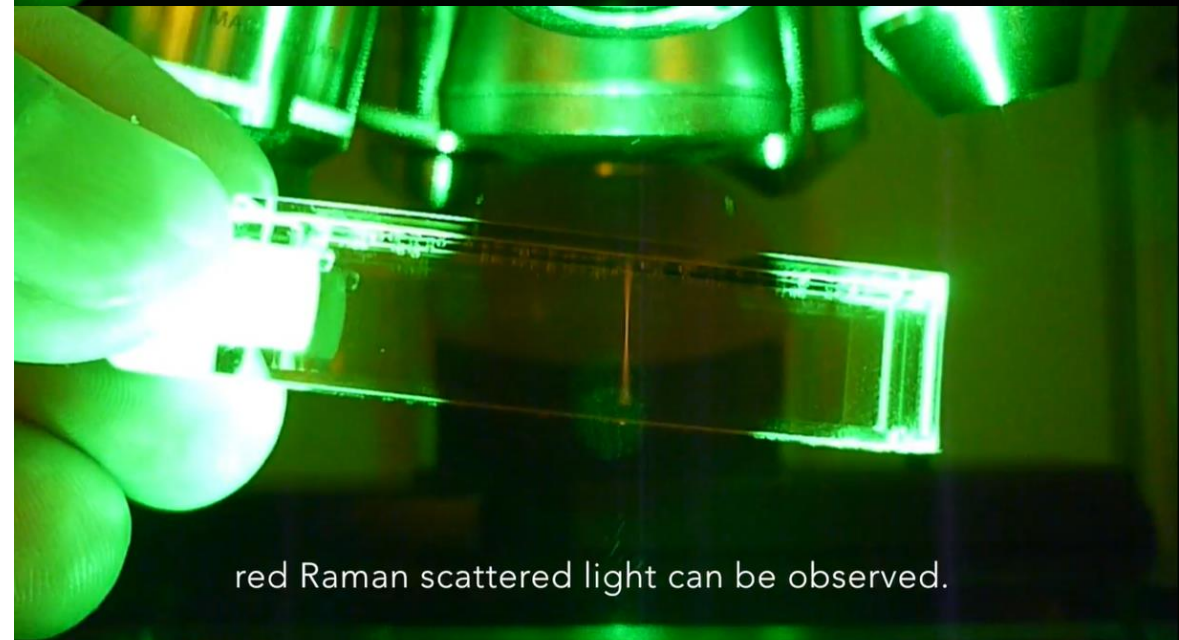
Діаграма енергетичних рівнів, що відображає принцип ефекту Рамана: монохроматичне світло, що надходить з частотою  $\omega_0$ , розсіюється або пружно (Релея;  $\omega_0$ ), або непружно з передачею енергії (розсіювання Рамана Стокса;  $\omega_s$ ) або від (раманівське антистоксівське розсіювання;  $\omega_{as}$ ) молекули. Отже, розсіяний фотон має зменшену частоту  $\omega_s = \omega_0 - \omega_r$  або збільшену частоту  $\omega_{as} = \omega_0 + \omega_r$ .  $\omega_r$  - різниця енергій між двома коливальними рівнями  $vib_0$  і  $vib_1$  і відповідними рівнями обертання.



# Принципи

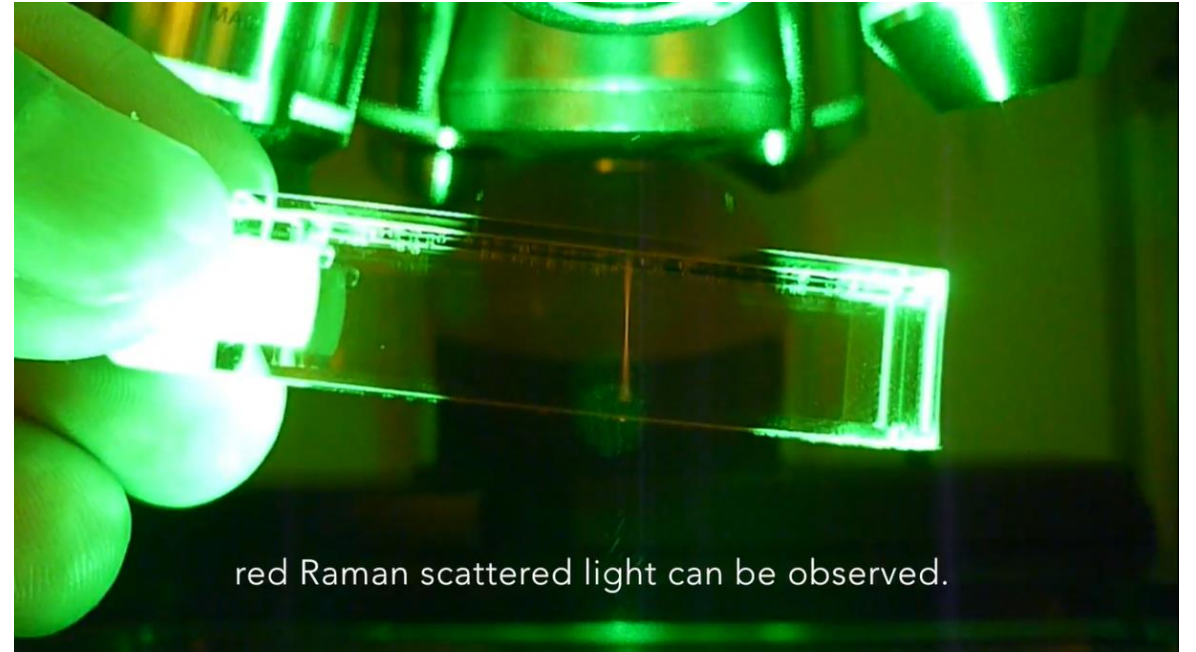
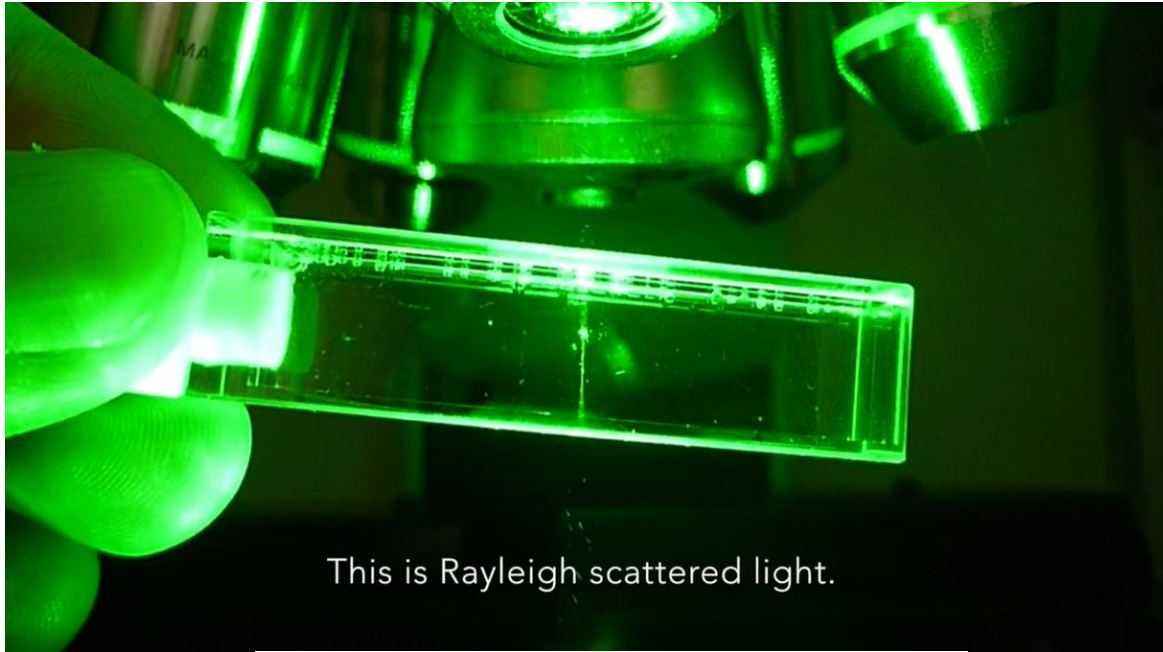


This is Rayleigh scattered light.

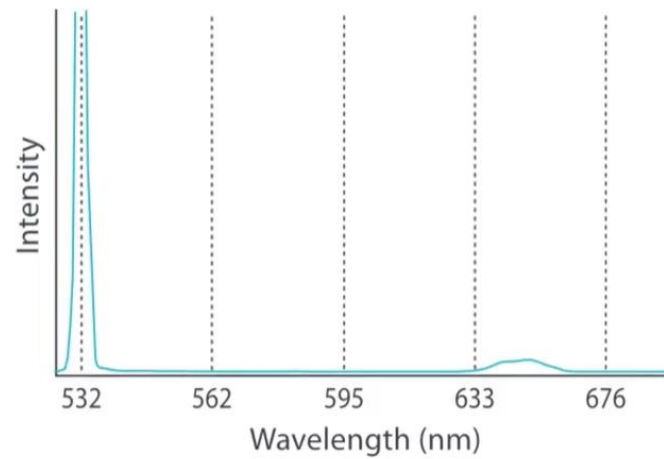


red Raman scattered light can be observed.

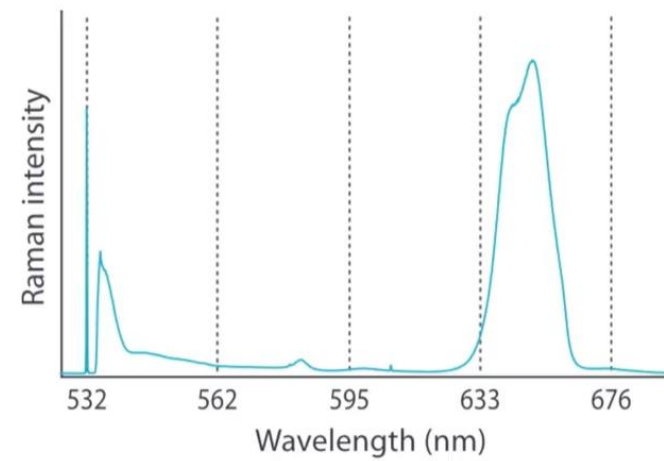
# Принципи



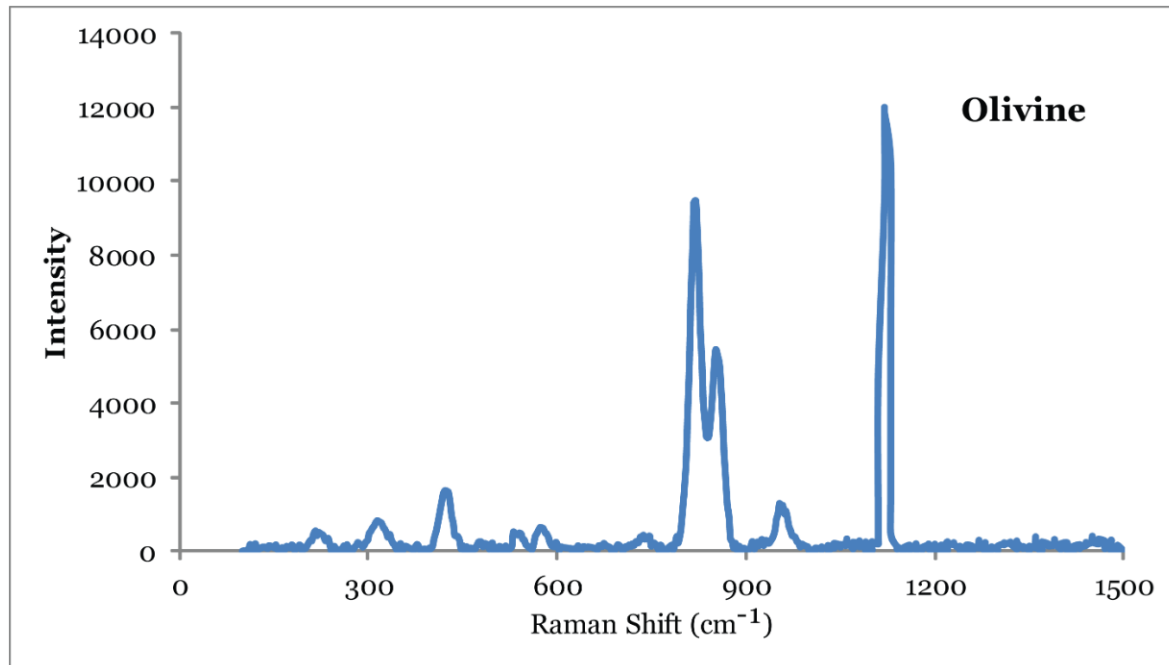
### Spectrum of scattered light



### Raman spectrum of water



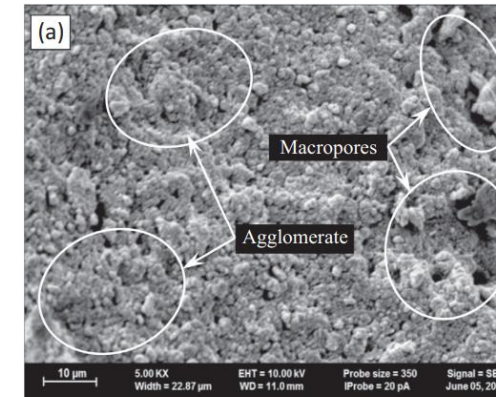
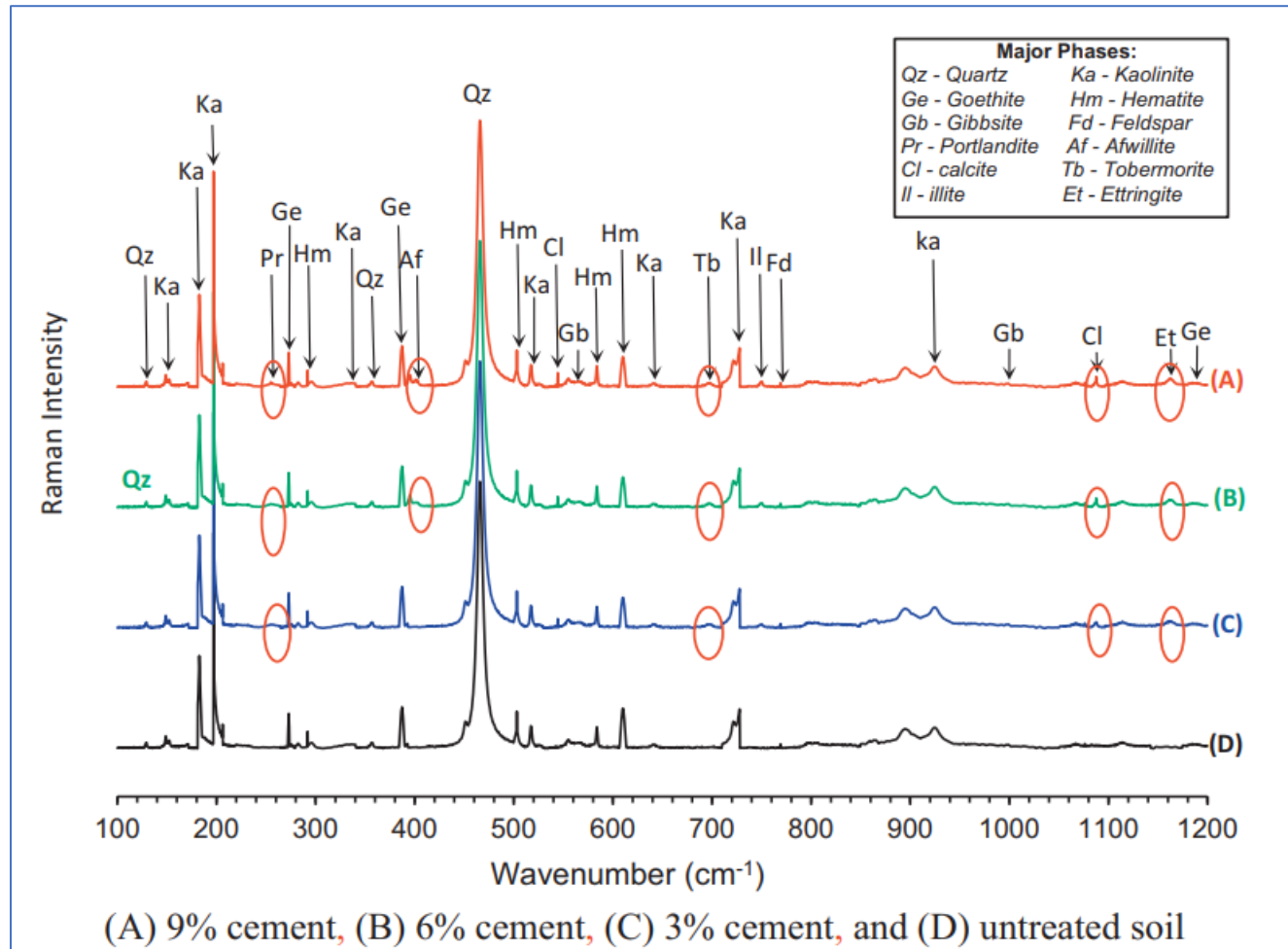
# Принципи



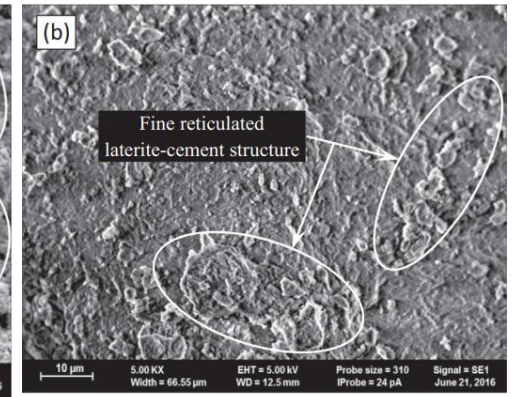
Більша частина розсіяного світла проходить через зразок без взаємодії. Результат – детектор буде отримувати енергію, яка має ту ж частоту, що і джерело збудження; це відоме як Релея або еластичний Розсіювання. Дуже мала кількість розсіяного світла ( $\sim 1$  до  $10^7$ ) зміщується за енергією від лазерної частоти.

Спектри комбінаційного розсіювання світла будуються як комбінаційний зсув. Комбінаційний зсув - це різниця між піковими енергіями і енергією лазера збудження. Це дозволяє порівнювати спектр з іншими спектрами навіть при використанні різних енергій збудження лазера. Вісь  $x$  звичайного спектра комбінаційного розсіювання світла зображується в одиницях хвильового числа (см<sup>-1</sup>), а не в довжині хвилі.

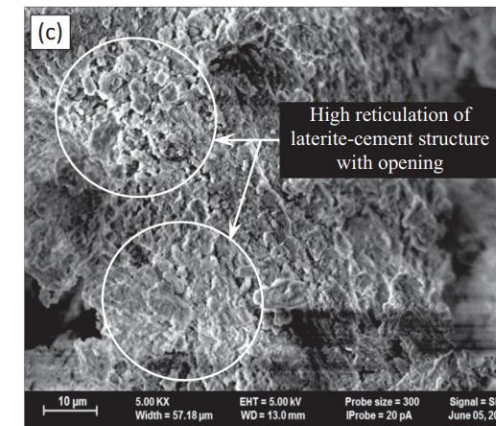
# Методологія - SERDS



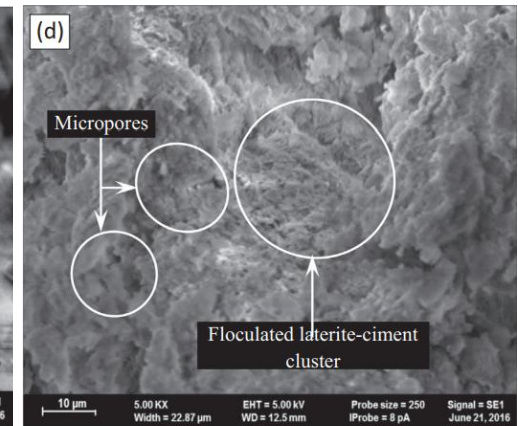
(a). Untreated lateritic soil



(b). 3% cement-treated lateritic soil



(c). 6% cement-treated lateritic soil

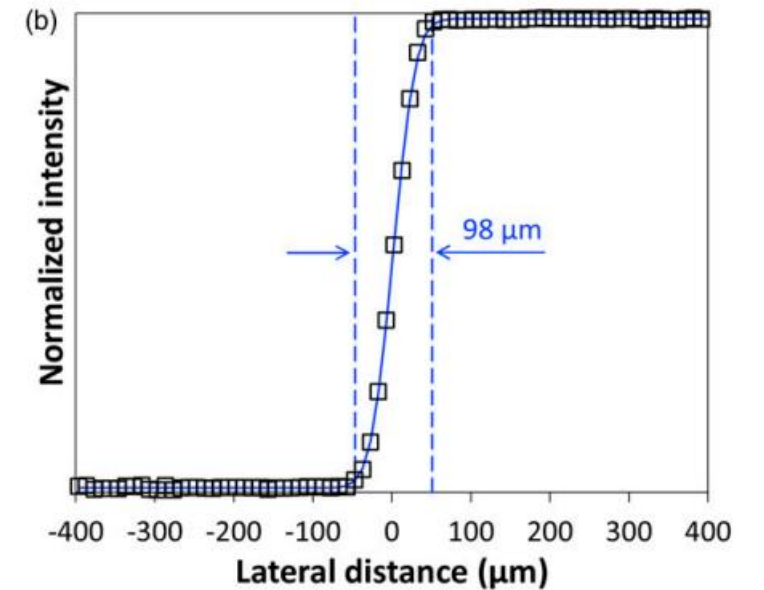
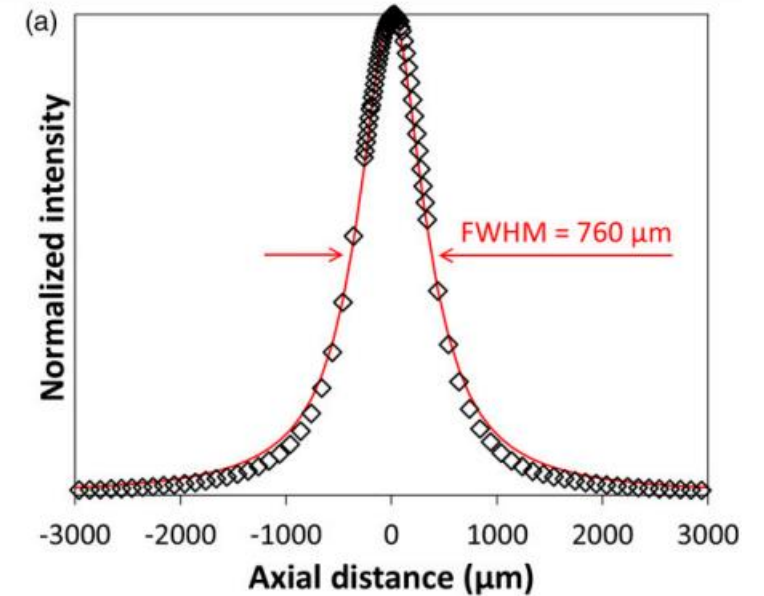


(d). 9% cement-treated lateritic soil

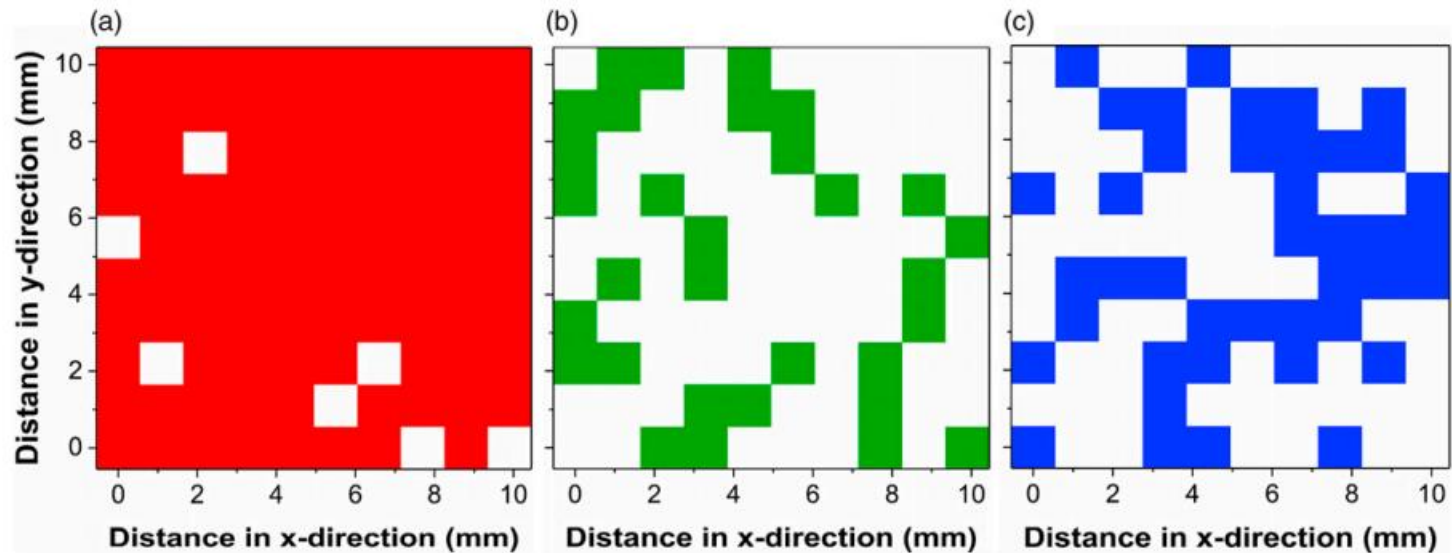
# Методологія - SERDS

Спектральний діапазон від 340–1640 см<sup>-1</sup> був обраний для розрахунку регресійних моделей з частковими найменшими квадратами (PLS) у нашому випадку, оскільки він містить характерні комбінаційні сигнали більшості мінеральних та органічних компонентів ґрунту.

Нормалізовані чисті інтенсивності кремнієвого комбінаційного сигналу SERDS на 520 см<sup>-1</sup>. Залежність положення осьової вибірки (чорний діамант) з апроксимованою функцією Лоренца (червона крива) (a) і залежність латерального положення вибірки (чорні квадрати) з підігнаним Функція помилки Гауса (синя крива), сині пунктирні лінії вказують на Ширину переходу (B).

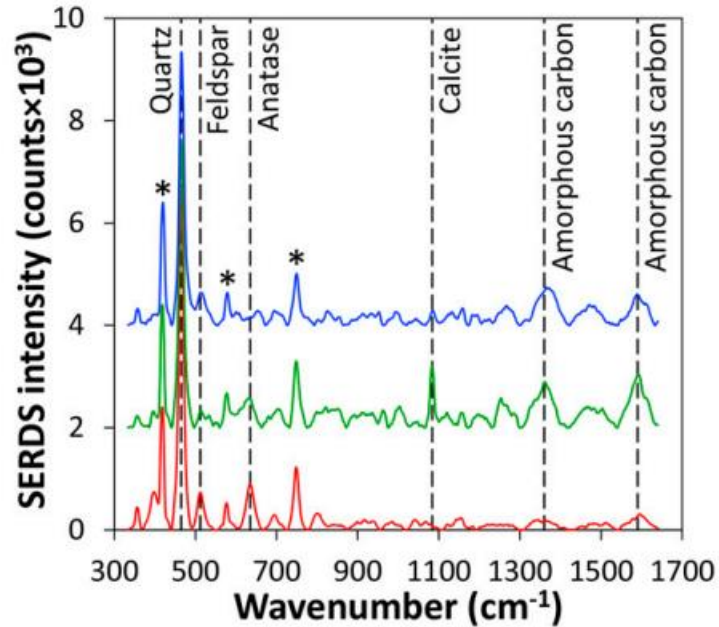


# Методологія - SERDS



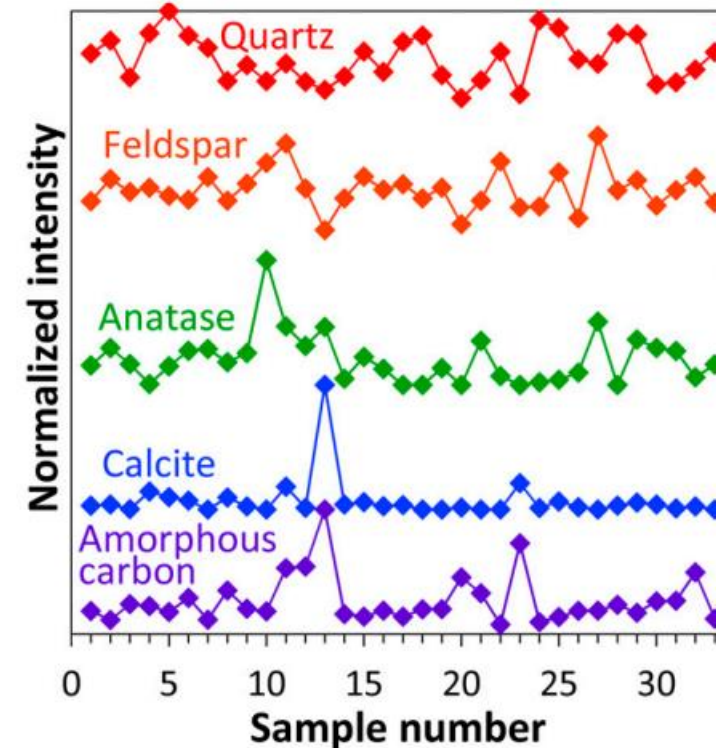
Графіки, що показують просторовий розподіл складових ґрунту (а) кварц, (б) кальцит і (в) аморфний вуглець для одного обраного ґрунту Зразка. Кольорові квадрати (червоний, зелений і синій) вказують на місця вимірювання, де відповідна речовина була ідентифікована шляхом візуального огляду спектрів SERDS і порівняння з характерними сигналами комбінаційного розсіювання, зазначеними в спектрі SERDS.

# Методологія - SERDS



Усереднені спектри SERDS трьох відібраних зразків ґрунту. Вертикальні пунктирні лінії виділяють раманівські сигнальні позиції визначених компонентів ґрунту, а зірочки вказують на раманівські сигнали сапфірового вікна. Спектри нормалізуються до інтенсивності сапфірового сигналу в  $418 \text{ cm}^{-1}$  і зсуваються по вертикалі для наочності.

Зсунуті інтенсивності сигналів комбінаційної різницевої спектроскопії кварцу (при  $465 \text{ cm}^{-1}$ ), польового шпату (при  $512 \text{ cm}^{-1}$ ), анатазу (при  $634 \text{ cm}^{-1}$ ), кальциту (при  $1083 \text{ cm}^{-1}$ ) і аморфного вуглецю (при  $1360 \text{ cm}^{-1}$ ) нанесені в порівнянні з номером зразка. Значення нормалізуються до відповідного максимуму та зсуваються по вертикалі для наочності.



# Описова статистика для Al, Cu, Cr

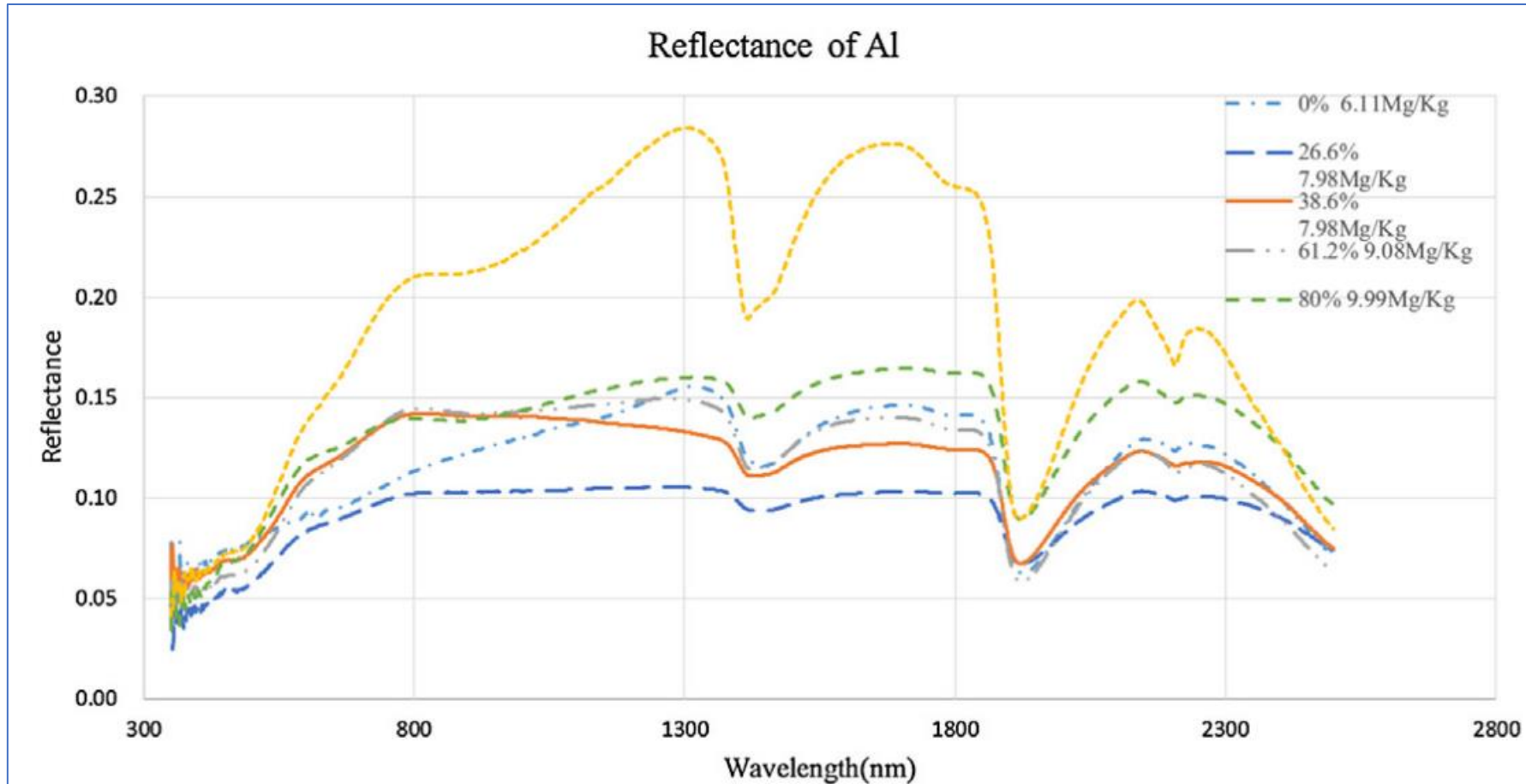
Descriptive statistics for heavy metal content in soil and water samples.

	Soil (mg/kg)			Water (mg/kg)		
	Al	Cu	Cr	Al	Cu	Cr
Max	1.960	178.000	200.000	0.260	0.008	0.010
Min	4.320	5.100	66.100	0.018	0.001	0.002
Mean	8.818	66.025	130.442	0.082	0.002	0.004
SD	1.350	34.860	31.764	0.070	0.001	0.002

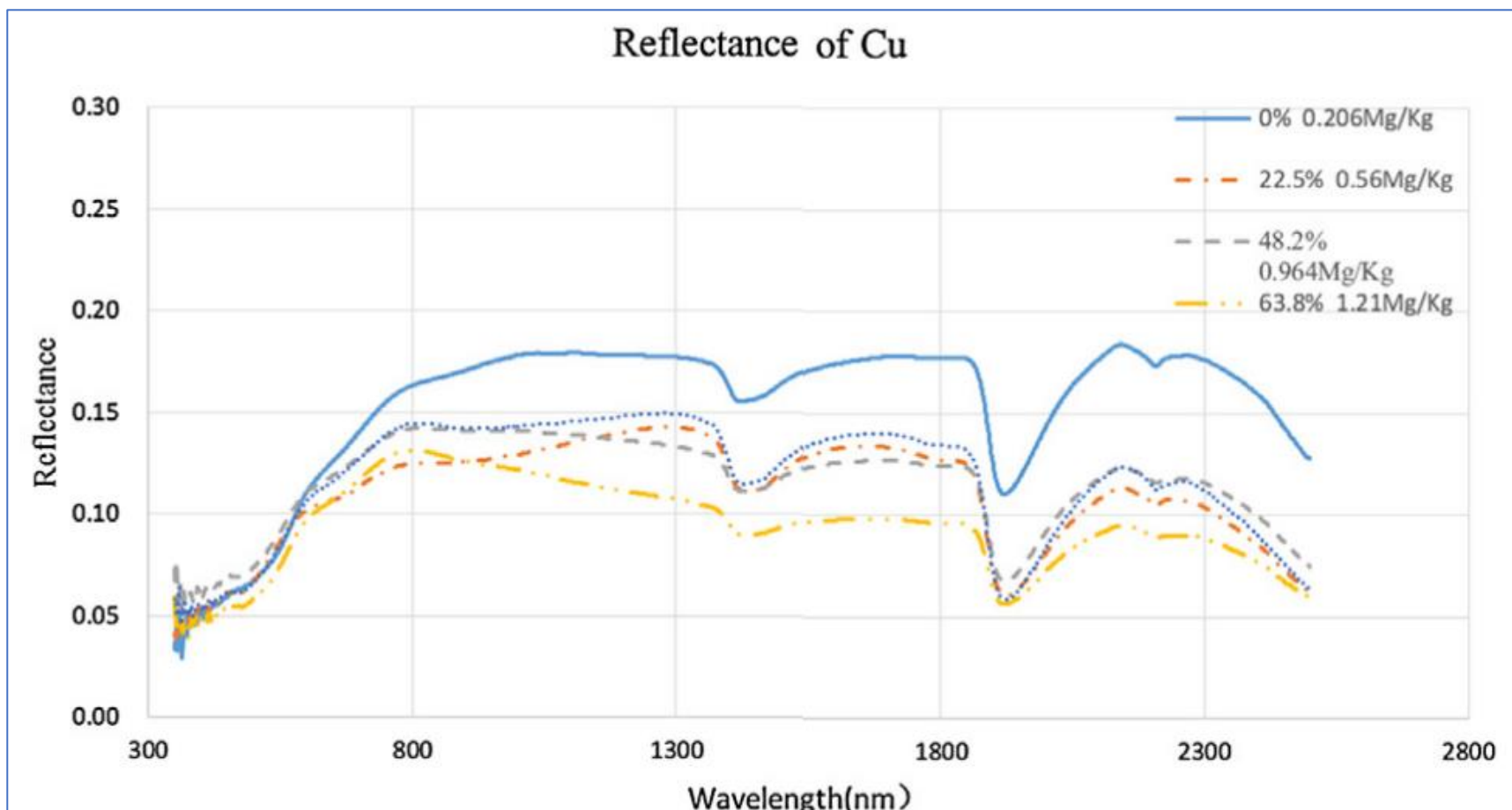




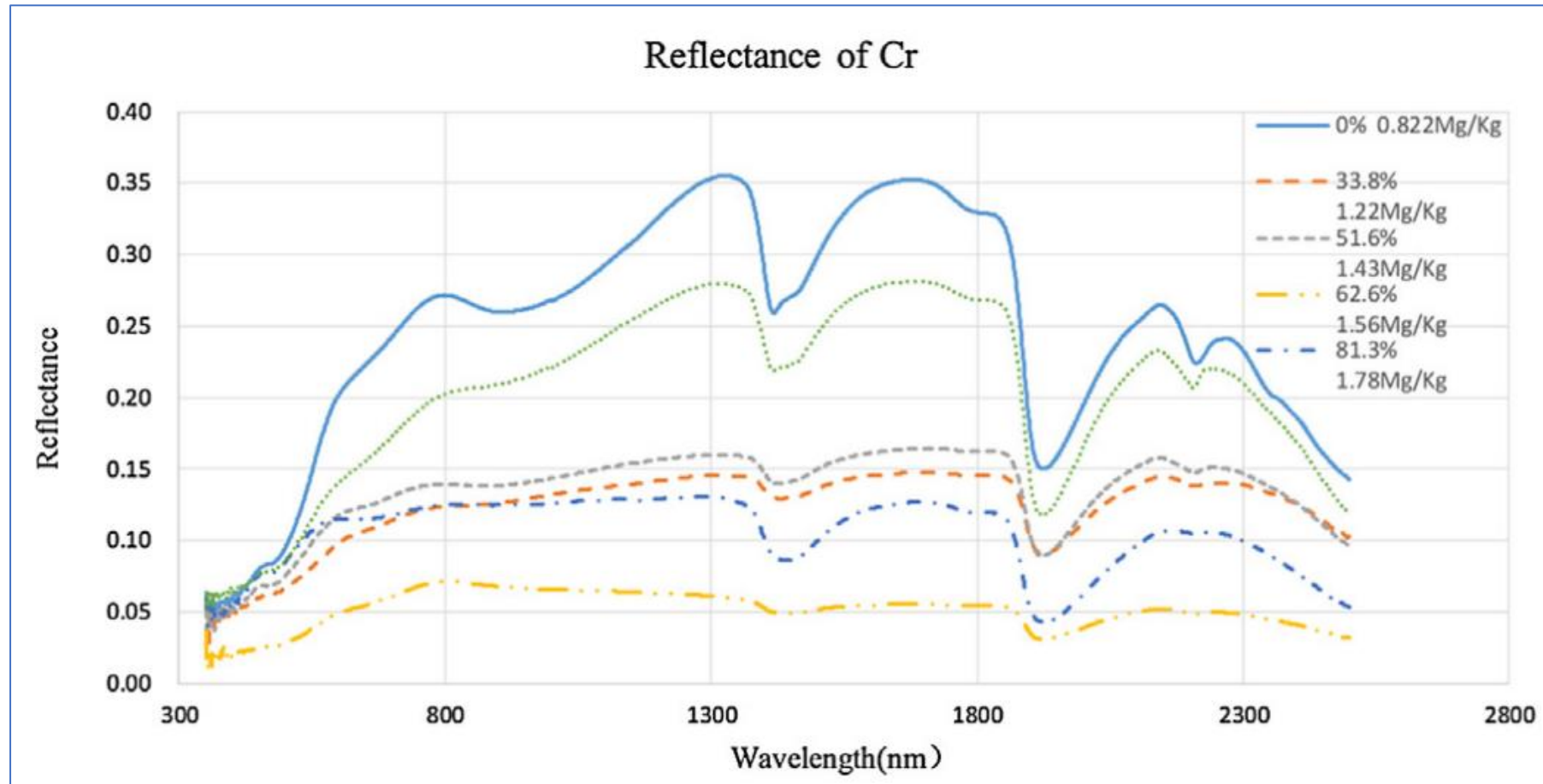
# Коефіцієнт відбиття Al



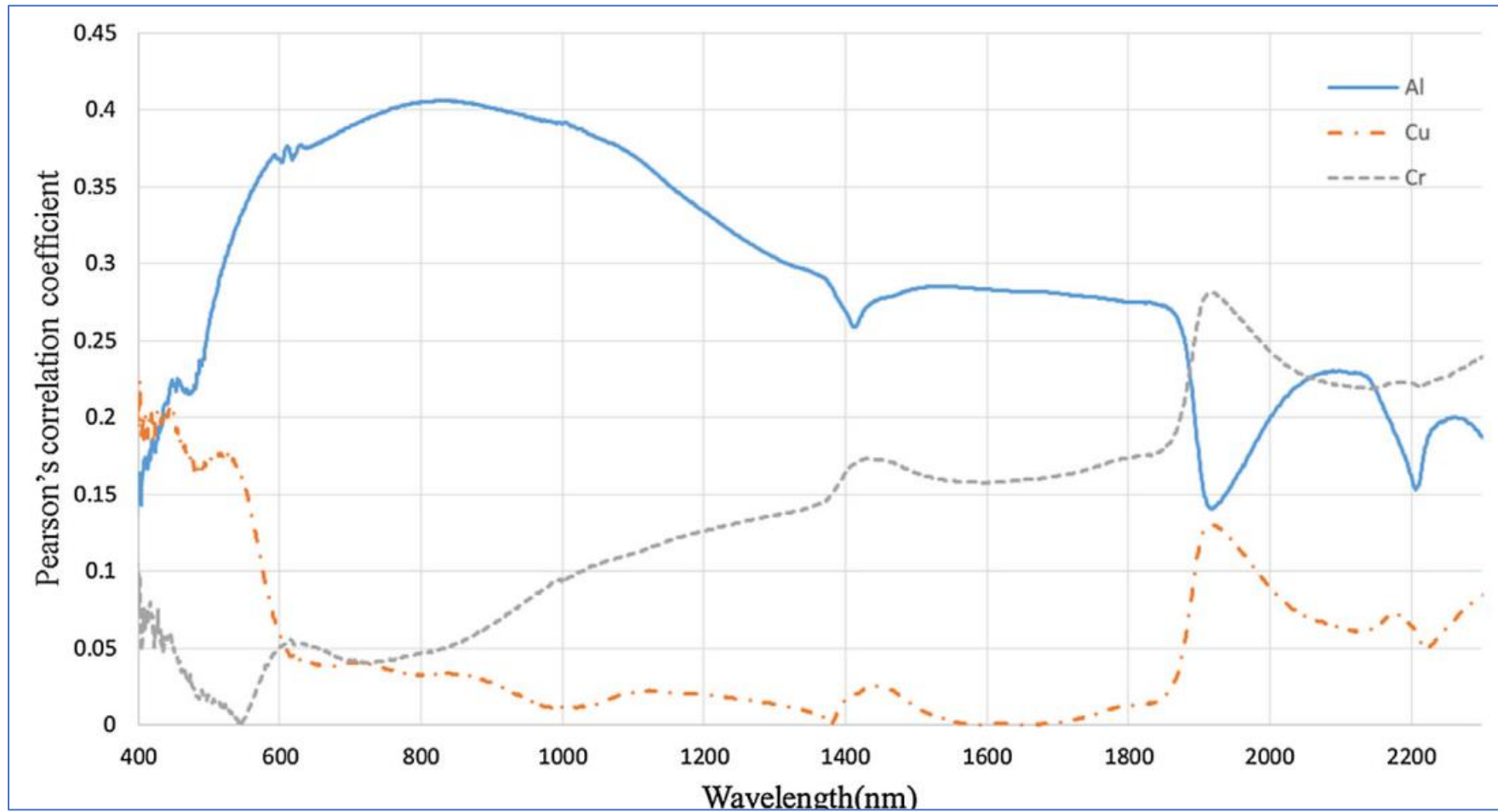
# Коефіцієнт відбиття Cu



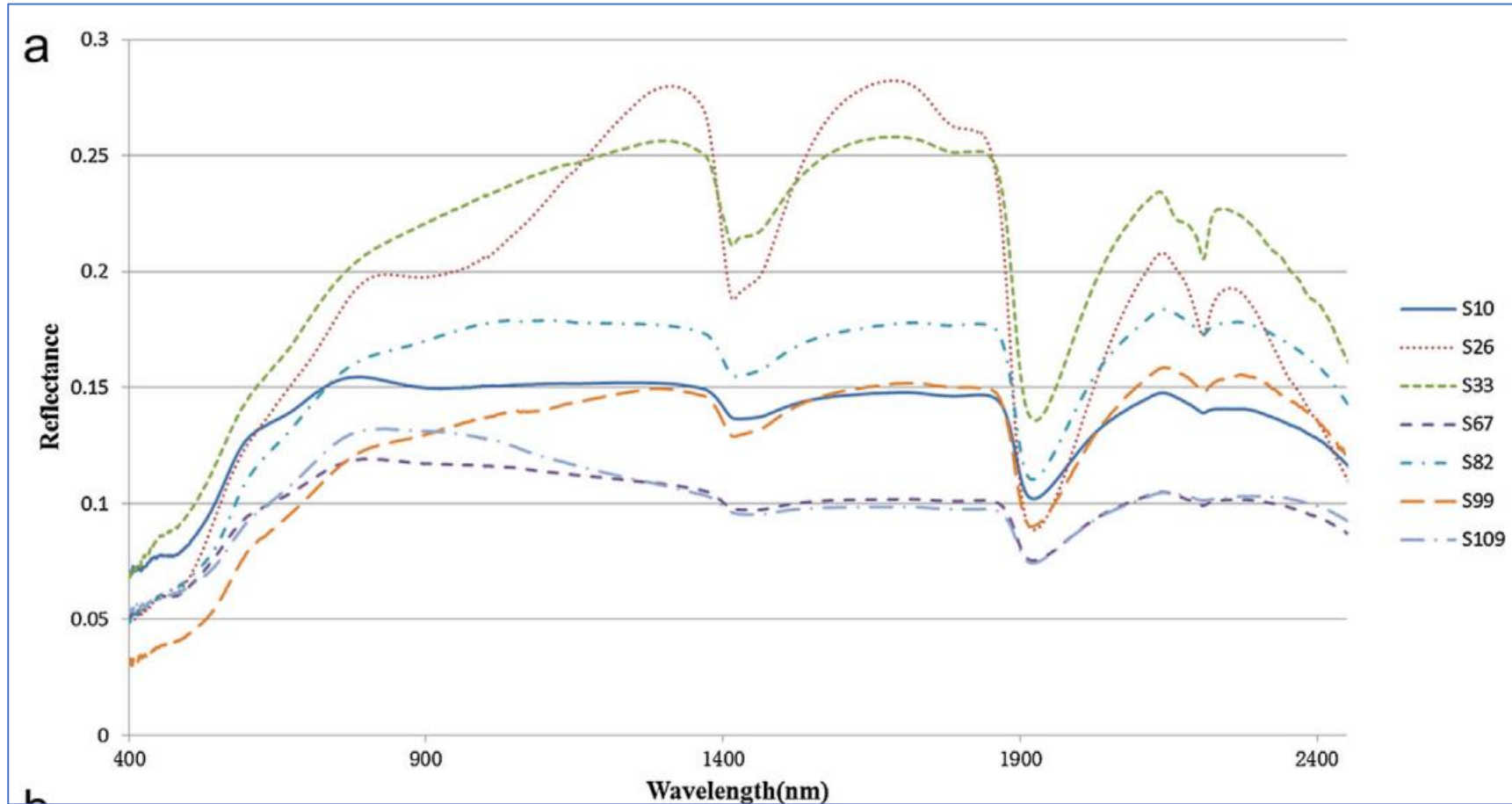
# Коефіцієнт відбиття Cr



# Спектри для Al, Cu і Cr та коефіцієнт Пірсона

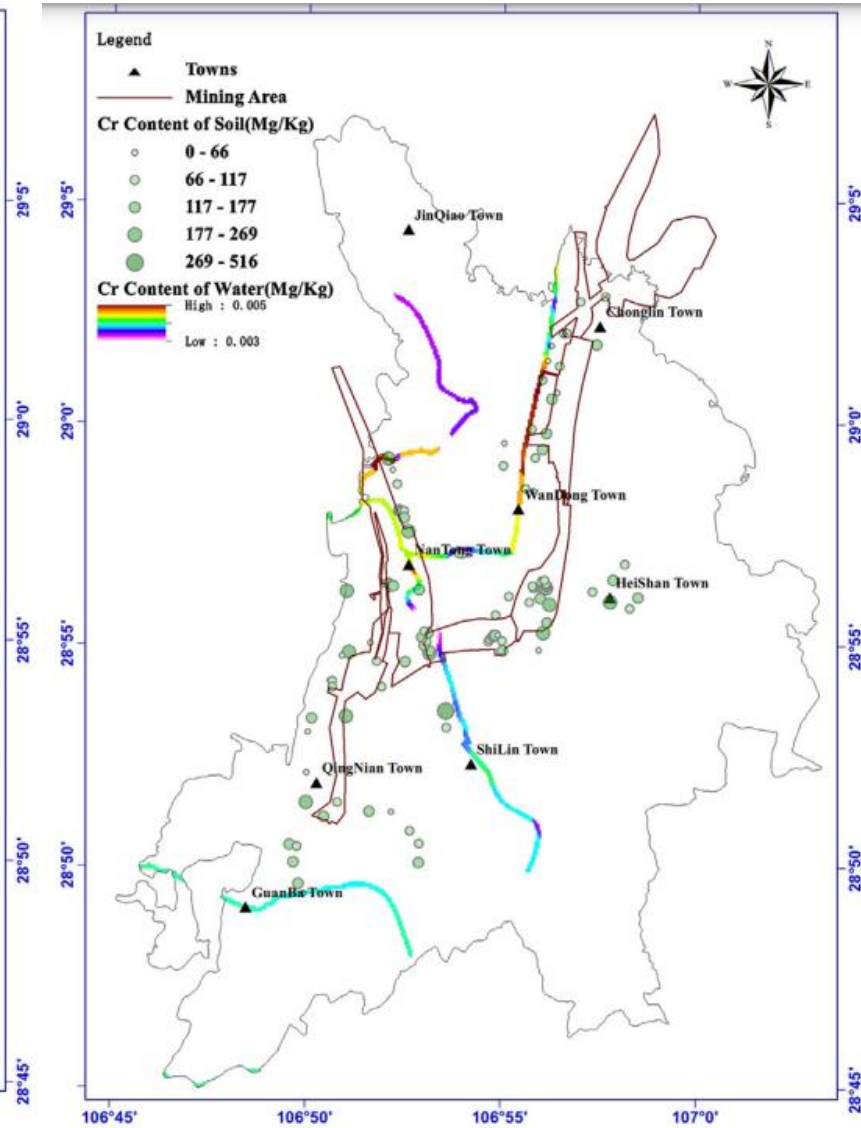
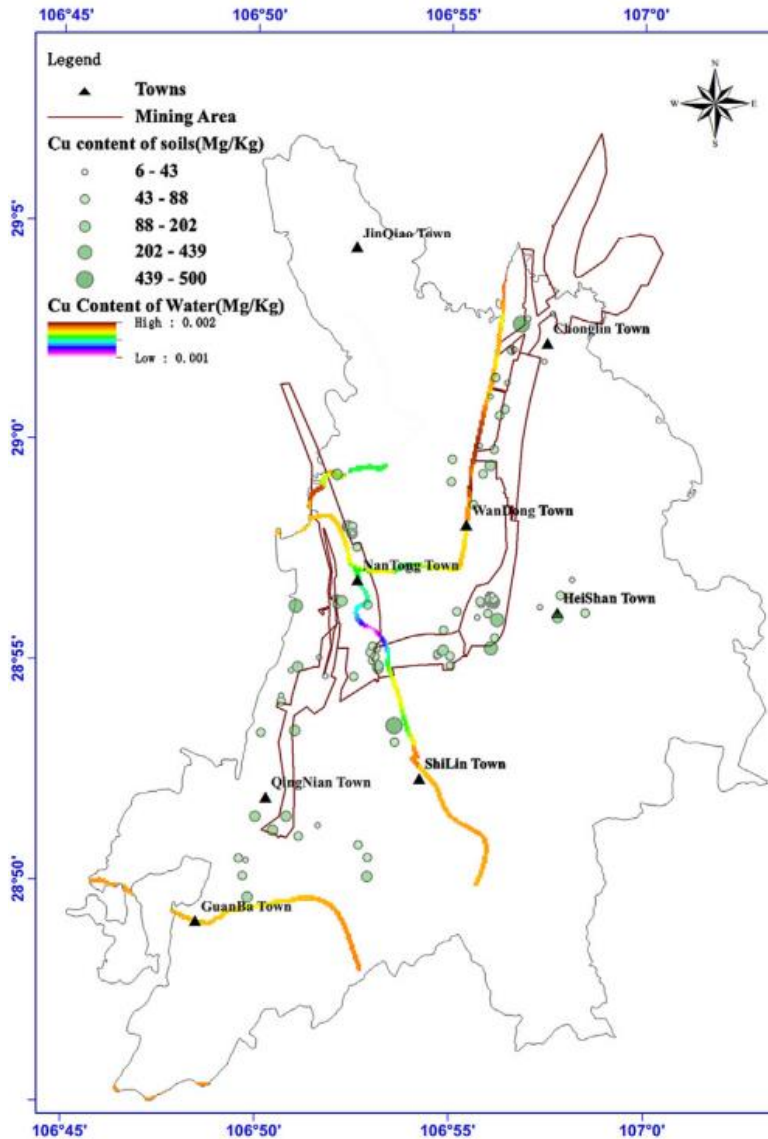
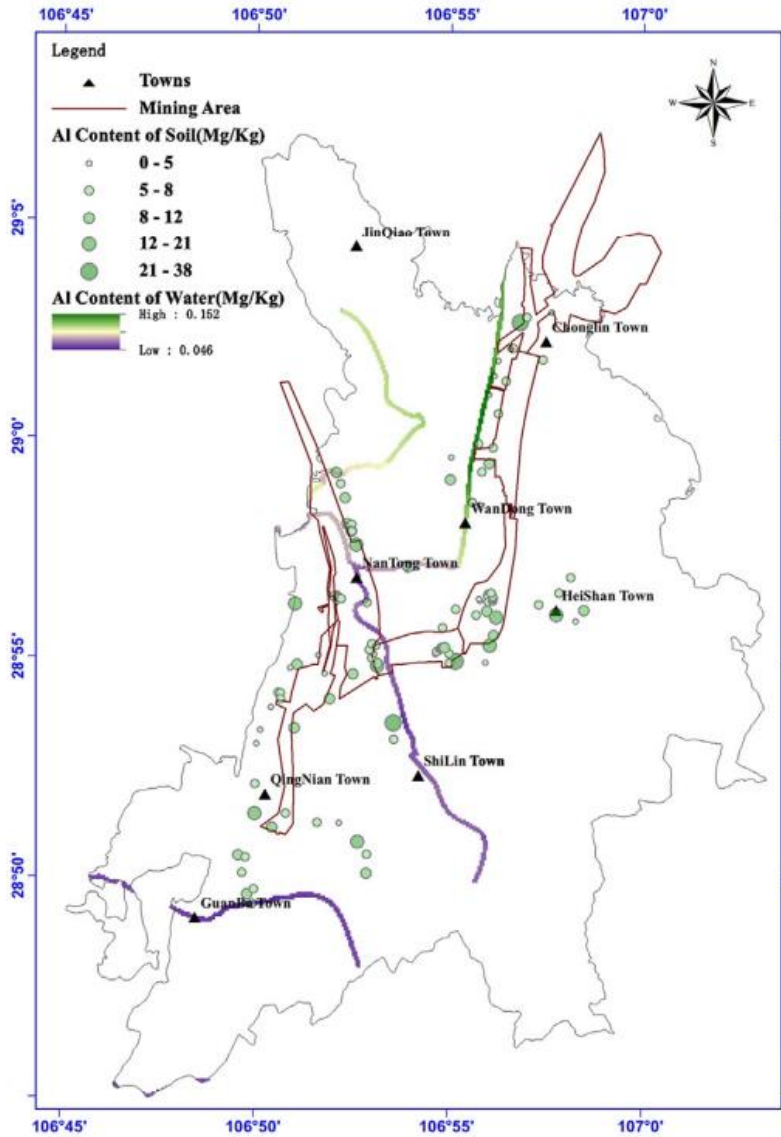


# Спектри відбиття різних зразків





# Картографування забруднених територій.



## Комбінаційний метод – точний метод оцінки забруднення ґрунту.

1. Підготовка зразка; У більшості випадків підготовка зразків не потрібна. Зразок можна розмістити в положення тримача, і спектр можна отримати.
2. Вода як розчинник; Вода – слабкий розсіювач; таким чином, його можна використовувати як розчинник для «складного зразка» - ніДля вимірювання у водних розчинах потрібні спеціальні аксесуари.
3. Відсутність необхідності продувки азотом оптичної лави; Пари води і вуглекислого газу дуже слабкі розсіювання видів.
4. Дешеві та зразкові тримачі; У більшості випадків ідеально підходять недорогі скляні тримачі зразків.
5. Cleaner Spectra; Спектри комбінаційного розсіювання «чистіші», ніж спектри середнього ІЧ-спектру — смуги раманівського розсіювання вузьчі, а смуги обертонів і комбінацій, як правило, слабкі.
6. Широкий спектр молекул для дослідження; Стандартний спектральний діапазон досягає значно нижче 400 см<sup>-1</sup>, виготовлення Техніка ідеальна як для органічних, так і для неорганічних видів.
7. Дослідити слабкі ІЧ-смуги; Раманівська спектроскопія може бути використана для вимірювання смуг симетричних зв'язків, які є слабкими в інфрачервоному спектрі, наприклад C=C, C-S і S-S.





Дякую

Презентація - Бішта Д.  
IGTI.ltd