

Чечельницкий М.Д., Рябова Ю.С., Молоков П.Б.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В РАСТВОРАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА И МЕТОДА PLS

*Северский технологический институт НИЯУ МИФИ,
636036, г. Северск, Томской обл., пр. Коммунистический, 65
e-mail: matthew3387c@mail.ru*

Госкорпорация Росатом имеет ряд приоритетных задач, одной из которых является развитие горно – добывающей промышленности, в частности добычи и эксплуатации редкоземельных металлов с целью обеспечения сырьевой независимости страны. Возникает необходимость исследований по определению концентрации редкоземельных элементов в растворах, знание которой является неотъемлемой частью задействованных технологий. Эта задача осложняется сложным составом, который влияет на точность полученного результата.

Для анализа используются физико-химические методы, среди которых предпочтение было отдано рентгенофлуоресцентному анализу. Данный метод базируется на регистрации вторичного рентгеновского излучения, испускаемого атомами после облучения первичным рентгеновским излучением. Он характеризуется высокой точностью, отсутствием необходимости подготовки или разрушения образца.

Трудностью при интерпретации результатов является наложение спектров элементов, особенно в случае редкоземельных металлов, чьи энергии флуоресцентного излучения могут пересекаться. Это приводит к трудностям в количественной интерпретации полученных данных.

Для повышения точности анализа и учёта энергетического наложения применялся метод частичных наименьших квадратов (PLS), позволяющий выявлять скрытые зависимости между переменными и снижать влияние шумов и взаимных помех. Метод реализовывался на языке программирования R.

Были построены градуировочные модели и модельные спектры, совпадающие со спектрами чистых элементов, что говорит о том, что предполагаемые результаты соответствуют результатом обработки. Представленные результаты подтверждают эффективность комплексного подхода к анализу многокомпонентных растворов.