

14. Сагинаев А.Т., Багрий Е.И. // Изв. ВУЗ. ХиХТ.2018. Т. 61. №. 12. С. 108.
15. Saginayev A.T., Kursina M.M, Gilazhov E.G. // Int. J. Pet. Res.2017. Vol. 1. No. 2. P. 101.
16. McQuarrie D.A. Statistic Thermodynamics. N.Y. 1973. 194 p.

МЕТОД ОБЪЕДИНЕНИЯ ДАННЫХ ВЭЖХ И ИК ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ.

Садырбеков Д.Т., Фомин В.Н.*, Айнабаев А.А., Кайкенов Д.А., Туровец М.А.,
Келесбек Н.К.

Карагандинский университет им. академика Е.А. Букетова

*автор-корреспондент vitfomin@mail.ru

Задачи классификации по месту происхождения и времени сбора часто возникают при анализе растительного сырья. Для их решения может потребоваться объединение результатов нескольких видов анализа. При решении задачи отнесения образцов сырья к тому или иному виду с успехом применяется обработка хроматограмм экстрактов хемометрическими методами. Для однозначной идентификации растительного сырья хроматографических данных может быть недостаточно.

Для предварительного подбора условий анализа на хроматографе ShimadzuProminenceLC-20 применялся интуитивный метод. Использовались различные условия хроматографирования: менялся состав элюента (соотношения воды и ацетонитрила 95:5, 50:50, 5:95), скорость его подачи (1 мл/мин, 0.5 мл/мин, 0.4 мл/мин), температура колонки (40 °С, 50 °С), условия детектирования (рефрактометрический и спектрофотометрический детекторы). Объектом исследования являлся экстракт полыни горькой на 50%-ном этиловом спирте.

Хороший результат хроматографического разделения был получен при следующих условиях:

Колонка для ВЭЖХ EC 150/4.6 NUCLEODUR 100-5 NH₂-RP, 150 мм, 4.6 мм, Macherey-Nagel, температура колонки 40°С, элюент вода ацетонитрил (95:5), скорость потока 0.4 мл/мин, детектирование при 230 нм. Эти условия будут учтены при составлении плана оптимизационного эксперимента с применением метода ВДПЭ [1-3].

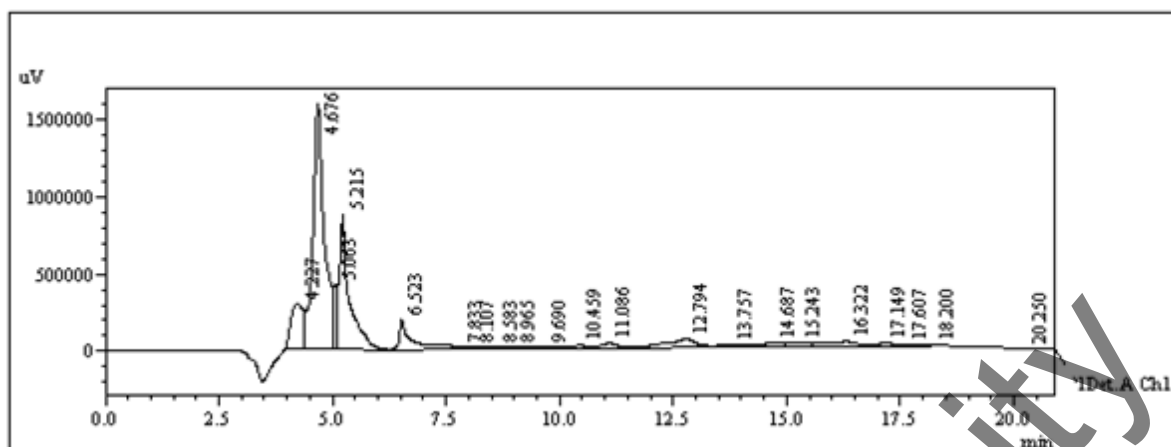


Рисунок 1. Хроматограмма экстракта полыни горькой.

Регистрация ИК-спектров производилась на приборе ФСМ-1201 (ООО «Инфраспек», РФ) в диапазоне длин волн $400\text{-}4000\text{ см}^{-1}$ в режиме пропускания (разрешение по волновому числу 2.0 см^{-1}), с усреднением по 50 сканированиям.



Рисунок 2. ИК-спектр экстракта полыни горькой.

Из приводимых хроматограмм и ИК-спектра видно, что единицы измерения интенсивности сигнала ВЭЖХ измеряются величинами значительно большего порядка, чем интенсивности полос ИК-спектра пропускания.

Все методы уменьшения размерности, используемые для классификационного анализа, требуют шкалирования данных, позволяющего сделать вклады каждой из величин статистически равнозначными [4]. При объединении данных разных методов анализа шкалировать можно не только функцию отклика, но и независимую переменную, что позволит использовать

все результаты измерений единым массивом. Также следует учесть, что воспроизводимость ИК-спектров, хроматограмм и т.п. существенно улучшается при использовании нормализации. ИК-спектр предварительно трансформировали в более удобную для нашей цели форму спектра поглощения по формуле $A_b = -\log(T/100)$, где A_b - поглощение, T - пропускание. Нормализацию спектра и хроматограммы провели делением всех интенсивностей на максимальную (сигнал с временем удерживания 4.676 мин на ВЭЖХ и полоса 510 см^{-1} в ИК спектре). Шкалирование независимой переменной также провели путём деления волнового числа и времени удерживания на максимальные значения. После этого к шкалированному значению волнового числа прибавили единицу, и объединили данные. Результат объединения представлен на рисунке 3.

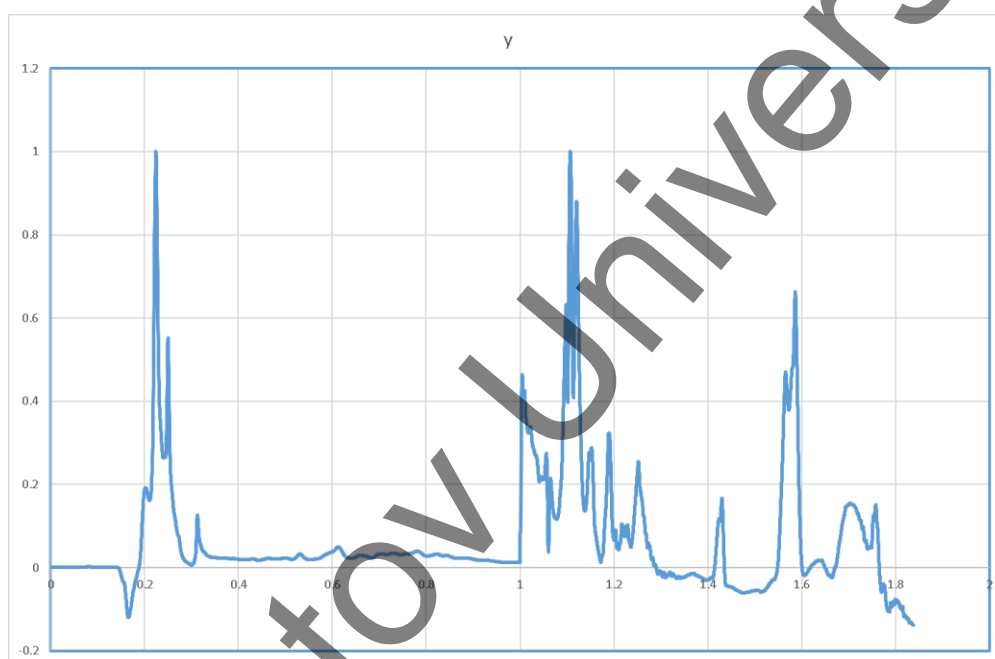


Рисунок 3. Объединённые данные ИК и ВЭЖХ.

Из рисунка видно, что интенсивности сигналов ВЭЖХ и полос ИК теперь выражены величинами одного порядка. Полученный результат может быть использован для классификационного анализа с применением хемометрических методов, таких как PCA, PLS и др.

Работа проводится при финансовой поддержке внутреннего гранта НАО КарУ им. Е.А. Букетова № 23-ВГ-23 «Метод классификации растительного сырья сочетанием ВЭЖХ, ГХ и АЭС».

Литература

1. Малышев В.П. Вероятностно-детерминированное отображение.- Караганда: Ғылым, 1994. – 373 с.
2. Беляев С.В., Малышев В.П. Пути развития вероятностно-детерминированного планирования эксперимента. В сб. Комплексная

- переработка минерального сырья Казахстана. Состояние. Проблемы. Решения. Алматы. 2008. т.9 Информационные технологии в минерально-сырьевом комплексе. Глава 8. – С.599-633
3. Fomin, V.N., Aynabaev, A.A., Kaykenov, D.A., Sadyrbekov, D.T., Aldabergenova, S.K., Turovets, M.A., Kelesbek, N.K. Optimization of coal tar gas chromatography conditions using probabilistic-deterministic design of experiment. // Bulletin of Karaganda University. Chemistry series. - 2021. - №4(104). - pp. 39-46.
 4. Анализ многомерных данных : избр. главы / Ким Эсбенсен ; пер. с англ. С. В. Кучерявского ; под ред. О. Е. Родионовой. - Черногловка : изд-во ИПХВ РАН, 2005. - 15с.

ХИМИЯ ПӘНІНЕН САРАЛАНҒАН ТАПСЫРМАЛАРДЫ ҚОЛДАНУДЫҢ ТӘСІЛДЕРІ

Саққулакова Н.Б.

Ұлытау облысы, Жаңаарқа ауданы, Қараағаш ауылдық округі, Ынталы жалпы білім беретін мектебі
Химия факультеті ДХБ-1к-22

Саралап оқыту әрбір оқушының жеке қажеттіліктеріне сәйкес тапсырма мен нұсқауларды, материал мен әдіс-тәсілдерді іріктеп қолдану процесі, оқушыларды оқуға ынталандыруға, шығармашылық және сын тұрғысынан ойлау дағдыларын дамытуға ықпал етеді. Сонымен бірге, саралап оқыту-бұл тұлғаның жеке ерекшеліктерін (жалпы және арнайы қабілеттері, даму деңгейі, қызығушылықтары, жүйке жүйесінің психофизиологиялық қасиеттері және т.б.) ескере отырып ұйымдастырылатын оқу процесі.

Сыныпта саралап оқытуда мұғалімдер: Оқушылардың оқу стиліне сәйкес ұйымдастырады (аудиал, визуал, кинестетик);

Оқушыларды қызығушылықтары, тақырыптар мен қабілеттері бойынша топтастыра алады;

Қалыптастырушы бағалауды қолданып оқушылардың оқу жетістігін бағалайды;

Сыныпта қауіпсіз және қолайлы оқу ортасын ұйымдастырады;

Оқушылардың қажеттіліктеріне сай сабақ мазмұнын жүргізіп, үздіксіз бағалау жүргізеді.

Оқу үдерісінде оқушылардың «өте қатты қобалжу» мен «зерігу» сәттер кездеседі. Қобалжу – мұғалім оқушыдан тым көп нәрсені күткенде, ал зерігу – оқушыға өте аз ұсынғанда пайда болады. Оны М.Чиксентмихайдың сызбасынан анық көруге болады.