

УДК 543.42 : 550.8

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Г. М. МКРТЧЯН, М. Я. МАРТИРОСЯН

ПРОБЛЕМНЫЕ ВОПРОСЫ АНАЛИТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
В СОВРЕМЕННОЙ ГЕОЛОГИИ

(основные параметры аналитических методов и специфика  
геологических исследований)

Большинство направлений геологической науки и практики—прогнозирование и поиски месторождений, разведка недр, установление промышленных кондиций, подсчет запасов, технологические схемы переработки минерального сырья,—в значительной мере основывается на аналитических данных о вещественном составе пород, руд и минералов.

Современный этап развития геологических исследований, характеризующийся повышением глубинности поисков в связи с разведанностью основных, близповерхностных месторождений, широким использованием электронно-вычислительной техники при обобщении аналитических данных, полученных в разное время и в разных лабораториях, переходом от изучения местных относительных закономерностей к более общим—региональным и глобальным,—предъявляет соответственно новые повышенные требования к лабораторно-аналитическим исследованиям.

Рассмотрим некоторые аналитические проблемы, обусловленные спецификой современных геологических исследований.

С аналитической точки зрения минеральное сырье резко выделяется среди других объектов, подвергающихся анализу (например, металлов и сплавов). Широкие вариации содержаний основных компонентов  $\text{SiO}_2$ —1—90%;  $\text{CaO}$ ,  $\text{MgO}$ —1—50%;  $\text{Al}_2\text{O}_3$ —1—30%;  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{O}$ —1—10%;  $\text{TiO}_2$ —0—5%), а также элементов-примесей относительно кларков (с возможными отклонениями на несколько порядков) приводят к сильному влиянию общего состава на величину аналитического сигнала.

Тесная генетическая взаимосвязь химических элементов в процессах петрогенезиса и рудообразования требует комплексного подхода к решению геологических задач с одновременным определением возможно большего числа элементов.

Высокая природная изменчивость геологических образцов и масштабность изучаемых объектов обуславливают количество проб, подвергающихся анализу, достигающее тысяч и десятков тысяч. Поэтому производительность и экспрессность становятся решающими факторами при выборе метода анализа.



Большое число проб, подвергающихся анализу, широкие вариации их химического состава и затруднения с правильным названием образцов геологом часто не позволяют аналитику учитывать состав проб при выборе соответствующих эталонов. Поэтому одной из основных задач является разработка методов, свободных от влияния валового состава.

Резюмируя, можно сказать, что основной проблемой повышения эффективности аналитических исследований в геологии и геохимии является разработка универсальных способов анализа, обеспечивающих высокую чувствительность, производительность и точность при одновременном определении большого числа элементов в пробах переменного состава [4, 5].

Из существующих методов анализа одновременно всем этим требованиям в большей мере удовлетворяет оптический эмиссионный спектральный анализ и его дальнейшее совершенствование является в настоящее время актуальной задачей.

Для геологии характерна еще одна специфическая особенность анализа, повышающая требовательность к его качеству,—многократное использование результатов анализа в течение длительного, практически неограниченного времени: издаются сборники химических анализов пород; по мере накопления аналитических данных уточняются региональные и глобальные кларки; результаты анализов, выполненные при разведке месторождений и подсчете запасов, используются в течение всего периода эксплуатации месторождений. В металлургии же, например, результаты анализа представляют интерес только в момент проверки правильности хода плавки или определения сорта и марки сплава.

Основной характеристикой аналитического метода является чувствительность или нижний предел определения элемента, которую в геологии целесообразно рассматривать в соотношении с кларками или промышленными кондициями. Ввиду относительного постоянства кларков, требования к чувствительности анализа минерального сырья более стабильны, чем, например, в полупроводниковой промышленности и при анализе особо-чистых веществ, требования к чистоте которых непрерывно повышаются и соответственно уменьшается нижний предел содержаний примесей, подлежащих определению.

На составленной нами диаграмме (рис. 1) представлены кларки наиболее часто определяемых в геологии элементов и чувствительности их определения различными методами. Из рисунка видно, что чувствительность определения многих элементов, расположенных в правой части диаграммы, выше кларковых содержаний. Разработка методов определения кларковых содержаний всех элементов позволила бы повысить информативность изучаемых геологических проб (рис. 1).

После того, как элемент в изучаемом объекте обнаружен, на первый план выступает метрологическая характеристика анализа—его точность, зависящая от случайных и систематических погрешностей и характеризующаяся воспроизводимостью (повторяемостью) и пра-



вильностью (соответствием истинному содержанию) результатов анализа.

Понятие точность анализа довольно многогранно. Так при метроло-

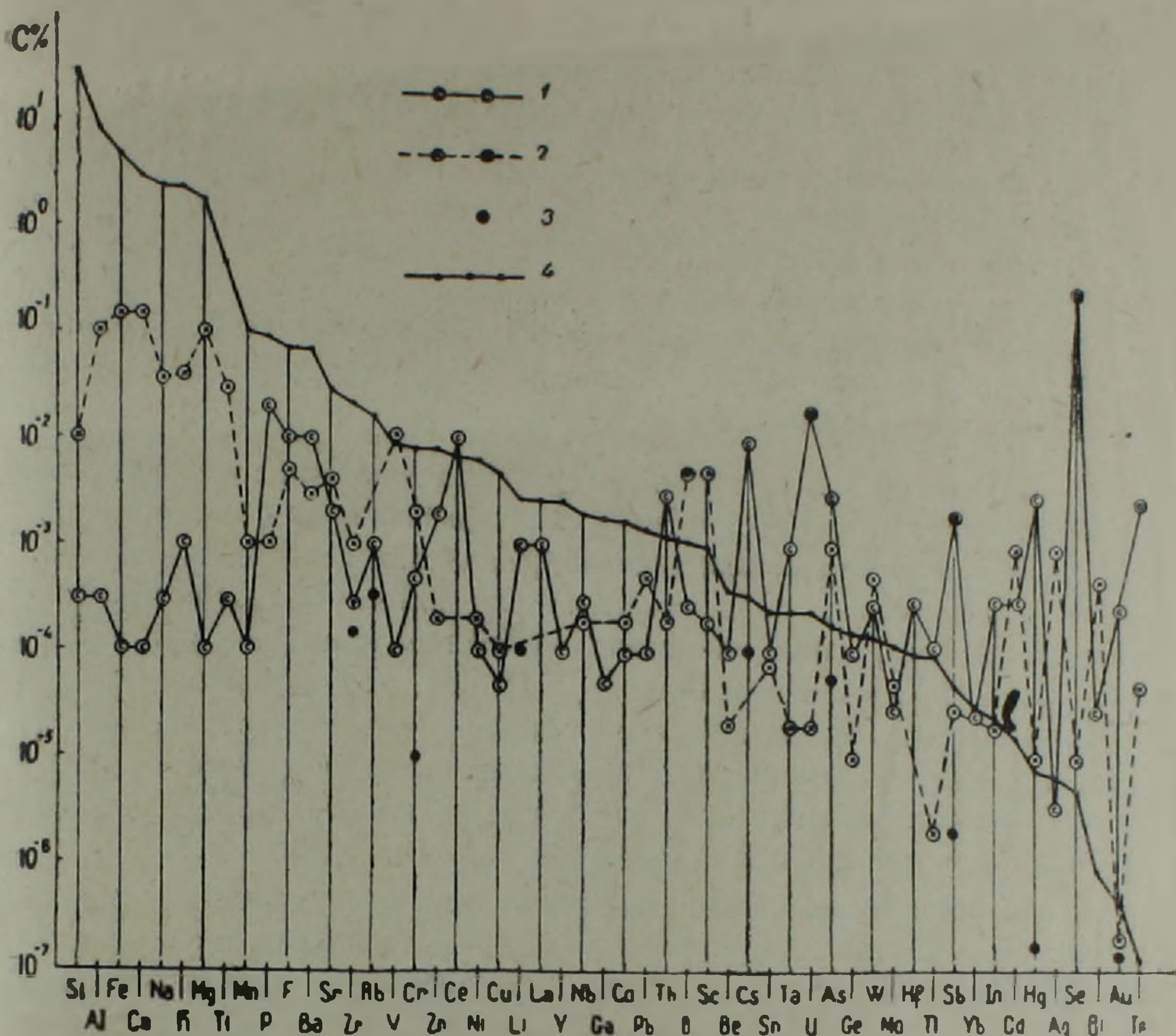


Рис. 1. Обеспеченность геохимических исследований чувствительными аналитическими методами: сопоставление нижнего предела определения (чувствительности) методов с кларковыми содержаниями элементов в изверженных породах. 1—чувствительность определения элемента при прямом оптическом эмиссионном спектральном анализе; 2—чувствительность химического анализа (по некоторым элементам данные отсутствуют); 3—чувствительность специальных методов анализа; 4—линия кларков элементов.

гической оценке аналитических методов общепринятый критерий точности—ошибка однократного определения признается недостаточной характеристикой и предлагаются преобразованные математические критерии, учитывающие также продолжительность и стоимость анализа [3]:

$$V_A^2 \cdot t_A = V_B^2 \cdot t_B \text{ и } V_A^2 \cdot P_A = V_B^2 \cdot P_B,$$

где  $V$  — коэффициент вариации,  $t$  — время (продолжительность анализа),  $P$  — стоимость анализа; если  $V_A^2 \cdot t_A > V_B^2 \cdot t_B$  или  $V_A^2 \cdot P_A > V_B^2 \cdot P_B$ , то метод «В» имеет преимущества перед методом «А», хотя при этом возможно  $V_A < V_B$ .



Таким образом *экспрессность* и *экономичность* аналитического метода являются важными характеристиками, дополняющими понятие *точность*, тем более, что стоимость одного элементо-определения существенно различается для различных методов. По данным Ю. Н. Кузнецова и др. [2], стоимость одного элементо-определения (в руб.) при определении примесей в окиси свинца марки ОСЧ составляет:

|                                                      |      |
|------------------------------------------------------|------|
| Оптический эмиссионный спектральный анализ . . . . . | 0,8  |
| Масс-спектральный . . . . .                          | 3,0  |
| Атомно-абсорбционный . . . . .                       | 27,0 |
| Спектрофотометрический . . . . .                     | 19,0 |
| Активационный. . . . .                               | 9,7  |
| Полярографический . . . . .                          | 26,5 |
| Газохроматографический . . . . .                     | 19,5 |

Выбор метода анализа следует ставить в зависимость от специфики решаемых задач: так при невысоких требованиях к воспроизводимости и правильности метода анализа, решающим является его экспрессность и дешевизна, когда исследователя интересуют относительные изменения в содержании элементов, решающим критерием при выборе будет служить воспроизводимость (например, при изучении «ореолов рассеяния»); при подсчете запасов главное звено это «правильность»; в случае особо прецизионных исследований (например, аттестационные анализы стандартных образцов) одинаково жесткие требования предъявляются и к воспроизводимости, и к правильности результатов.

Отмеченное разнообразие аналитических задач геологии и необходимость соответствия метрологических и экономических характеристик метода решаемой задаче—привело к разработке и использованию в аналитической практике восьми категорий лабораторных методов анализа минерального сырья [1].

В области спектрального анализа аналитические методы принято подразделять на полуколичественные (коэффициент вариации ( $v$ ) более 33%) и количественные ( $v$  менее 33%). При этом в силу специфических особенностей метода, при полуколичественном анализе возможно одновременное определение большого числа элементов, в то время как при количественном—одновременно определяется, как правило, 2—3 элемента.

Количественный спектральный анализ по поставляемым сведениям и трудоемкости мало чем отличается от других аналитических методов, в то время как по количеству сообщаемой информации и экспрессности полуколичественный метод не имеет себе равных.

Вместе с тем, практика показывает, что точность массового полуколичественного спектрального анализа во многих случаях не удовлетворяет требованиям геохимических исследований на современном этапе, так как для поисковых целей начинают использоваться все более тонкие закономерности распределения элементов в земной коре. Так для



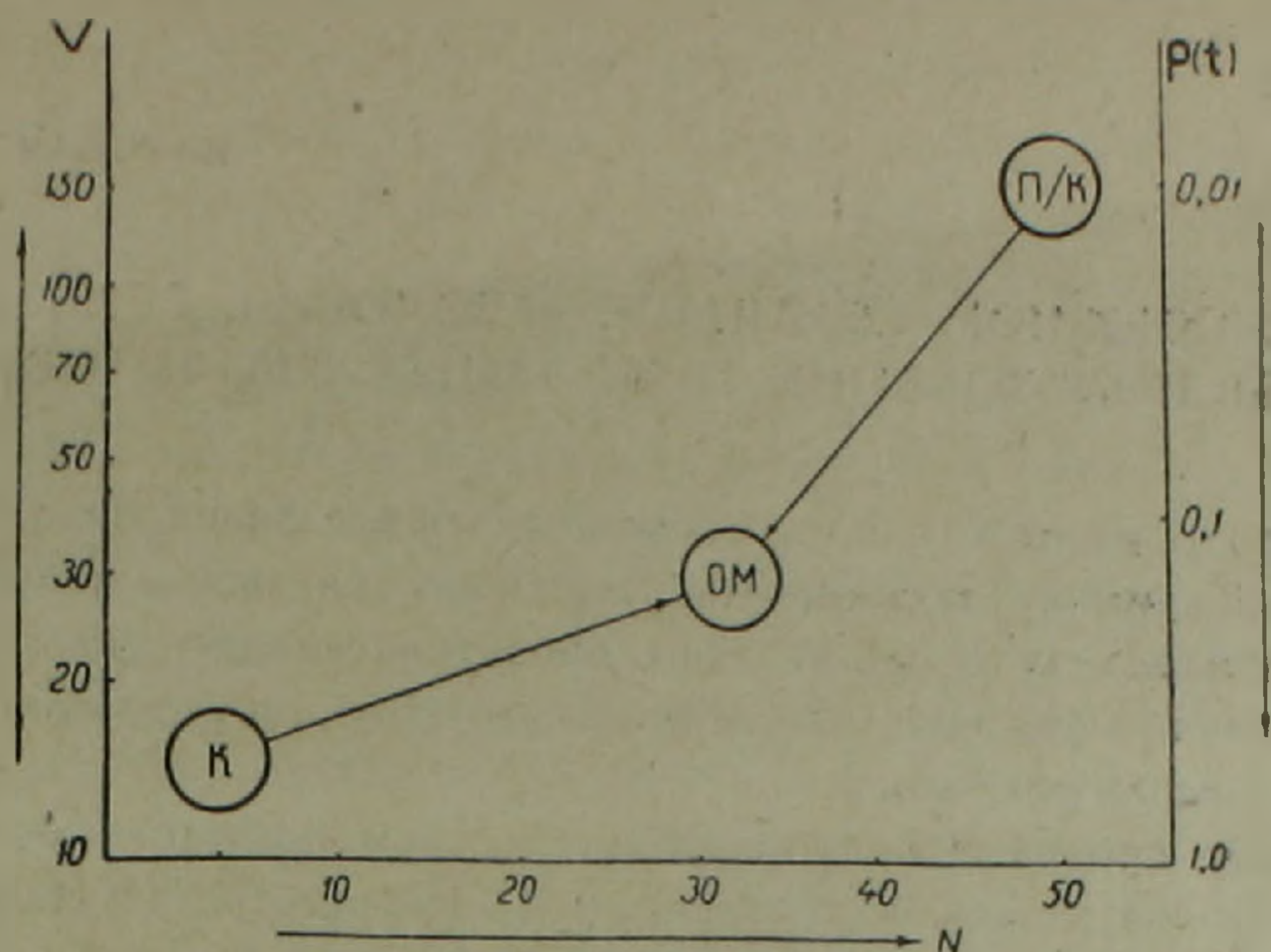


Рис. 2. Современное метрологическое состояние количественных (К) и полуколичественных (П/К) методов спектрального анализа и пути разработки оптимизированного метода (ОМ).  $V$ —коэффициент вариации в %,  $N$ —число элементов, одновременно определяемых методом,  $P$ —стоимость и  $t$ —длительность одного элементо-определения в условных (относительных) единицах. Масштаб для  $V$  и  $P(t)$ —логарифмический.

изучения первично-конституционального рассеяния элементов в горных породах метод полуколичественного спектрального анализа непригоден из-за малой точности, а классические методы количественного спектрального анализа на 2—3 элемента—из-за своей трудоемкости.

На рис. 2 схематически представлено современное состояние методов спектрального анализа и сущность проблемы их совершенствования. Метод спектрального анализа сохранит свое особое положение среди других аналитических методов при условии его дальнейшего развития по пути повышения точности одновременного определения большого числа элементов при сохранении приемлемых экономических показателей:

Институт геологических наук  
АН Армянской ССР

Поступила 25.VII.1977.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Классификации методов анализа минерального сырья. Методические указания, № 11. Научный Совет по аналитическим методам. М., 1976.
2. Кузнецов Ю. Н., Кузовлев И. А., Сабатовская В. Л., Свердлина О. А. Некоторые проблемы спектрального анализа, материалов и изделий полупроводниковой электронной техники. Сб. «Прикладная спектроскопия» (обзорные доклады 17-го Всесоюзного съезда по спектроскопии). Минск 1974.
3. Райский С. М. Понятие точности анализа. Зав. лаб., 31, № 7, 1965.
4. Райхбаум Я. Д., Костюкова Е. С., Кузнецова А. И., Петров Л. Л., Смирнова Е. В., Глазунова А. Д., Арбатская С. Н. Эмиссионный спектральный анализ в геохимии. «Наука». Новосибирск, 1976.
5. Русанов А. К., Райхбаум Я. Д., Калинин С. К., Фалькова О. Б. Современные методы спектрального анализа в геологии и геохимии. В сб. «Прикладная спектроскопия» (обзорные доклады 17-го Всесоюзного съезда по спектроскопии). Минск, 1974.