Спектроскопия комбинационного рассеяния для оценки состава деионизированной воды

© П.Е. Тимченко[1], А.Д. Волов[2], Л.Т. Волова[2], Е.В. Тимченко[1,2], А.А. Чернухин[1,¶]

[1] Самарский университет,
Самара, Россия
[2] Самарский государственный медицинский университет (СамГМУ),
Самара, Россия
¶ e-mail: anbik1128@gmail.com

Поступила в редакцию 11.11.2025 г.
В окончательной редакции 02.12.2025 г.
Принята к публикации 03.06.2026 г.

Представлены результаты применения метода спектроскопии комбинационного рассеяния для сравнительной оценки состава деионизированной воды, применяемой в экспериментах для биотехнологических лабораторий. В качестве объектов исследований использованы образцы деионизированной воды, полученной на аппарате ДМЭ-2Б ОПТИМА (СамГМУ, Самара) и аппарате фирмы ООО „Атлант“ (г. Челябинск), а также водопроводная вода. Установлено, что исследуемые группы деионизированной воды имеют спектральное сходство между собой и различие с водопроводной, что связано с наличием микроорганизмов в водопроводной воде. Полученные результаты показывают применимость спектроскопии комбинационного рассеяния в качестве метода оценки чистоты воды.

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, оценка состава, деионизированная вода, водопроводная вода, дискриминантный анализ.

DOI: 10.61011/OS.2026.08.63717.21-26

Введение

Качество воды играет важную роль для исследований в биотехнологических лабораториях. Вода, как универсальный растворитель, обладает уникальными свойствами, такими как сильная полярность и водородные связи, которые делают её реакционноспособной и подверженной загрязнению [1]. Пренебрежение качеством воды в лабораторных приложениях может приводить к неудовлетворительным результатам проводимых экспериментов [1]. Чтобы получить воду удовлетворяющего биотехнологическим требованиям уровня чистоты, в лабораторных условиях широко применяется деионизация воды. Этот процесс подразумевает удаление ионов с помощью синтетических смол. Для повышения эффективности деионизации технологию ионного обмена совмещают с электродиализом для автоматической регенерации ионнообменных смол. Такой метод эффективно удаляет ионы, но не является полностью стерилизующим, так как не полностью удаляет из воды неионные органические соединения и микроорганизмы [1,2]. Оценка состава деионизированной воды для последующего её применения в биомедицинских задачах является весьма актуальной задачей.

Традиционные методы контроля качества воды, такие как кондуктометрия, направлены на одно химическое вещество и не способны различить разные компоненты, которые могут негативно сказываться на результатах [3]. Другие подходы к анализу, включая ионную хроматографию, электрохимический анализ, атомно-эмиссионную спектроскопию с индуктивной связанной плазмой, атомно-абсорбционную спектроскопию и УФ-ВИД-спектроскопию, требуют длительного обнаружения, сложной пробоподготовки, комбинации нескольких методов и не подходят для измерений *in situ* [3,4]. Некоторые из них также предполагают применение определенных химических веществ, что может вызывать вторичное загрязнение [4].

В последнее время широкое применение для решения медико-биологических задач нашли оптические методы [5–7]. Среди существующих оптических методов контроля качества воды спектроскопия комбинационного рассеяния зарекомендовала себя как эффективный инструмент обнаружения загрязняющих веществ в биотехнологических приложениях, обеспечивающий быстрое и неразрушающее определение широкого спектра критически важных органических и неорганических примесей, что прямо влияет на достоверность, воспроизводимость и успех биотехнологических исследований [8,9].

Целью работы являлось применение спектроскопии комбинационного рассеяния для оценки состава деионизированной воды.

Материалы и методы исследований

Эксперименты были проведены для трёх групп воды: 1 — деионизированная вода, полученная на аппарате ДМЭ-2Б ОПТИМА (СамГМУ, г. Самара), 2 — ультрачистая (с чистотой 99.999 %) деионизированная вода, полученная на аппарате фирмы ООО „Атлант“ (г. Челябинск), 3 — водопроводная вода. Экспери-

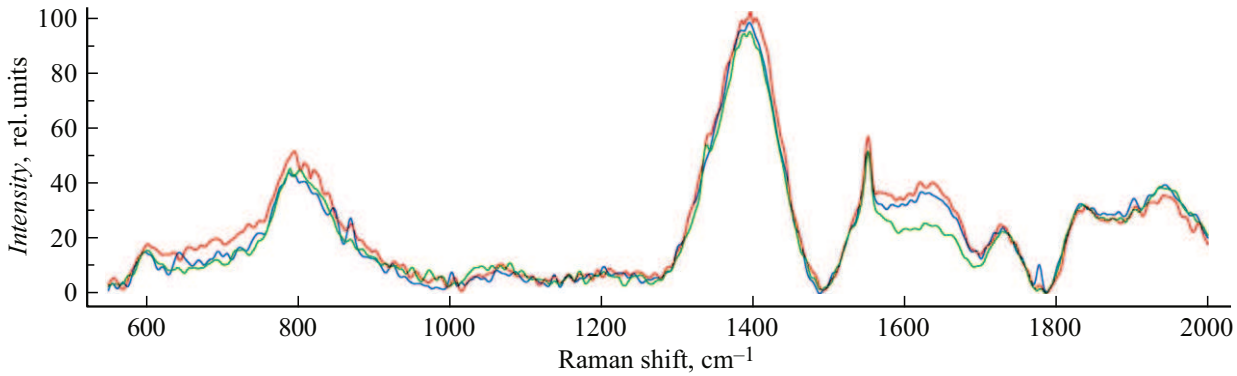


Рис. 1. Усредненные спектры комбинационного рассеяния исследуемых образцов воды: синяя линия — вода деионизированная ультрачистая (аппарат фирмы ООО „Атлант“, г. Челябинск); красная линия — вода деионизированная (аппарат ДМЭ-2Б ОПТИМА, г. Самара); зеленая линия — вода водопроводная.

менты были проведены с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния, реализуемой с помощью экспериментального стенда, описанного в работе [6]. Установка включала лазер (LML-785.0RB-04), спектрограф (Sharmrock SR-303i) с камерой (ANDOR DV-420A-OE, $-60\,^{\circ}$C, разрешение 0.15 nm), рамановский пробник (PBL 785) и ноутбук. Мощность излучения составляла 150 mW при времени экспозиции 60 s. После регистрации спектр подвергался обработке методом *Extended multiplicative signal correction* (EMSC) и фильтрации шумов методом сглаживания *Maximum Likelihood Estimation Savitzky-Golay filter* (MLE-SG) с параметром $\sigma = 4$, а также вычитанию автофлуоресцентной составляющей, получаемой полиномиальной аппроксимацией *Extended Modified Multi-Polynomial Fitting* (Ex-ModPoly) со степенью полинома 7. Обработка спектров и статистический анализ были выполнены в программе „Raman spectroscopy tool. 1.0.9.“ [10].

Дополнительно был проведен химический и микробиологический анализы исследуемых групп.

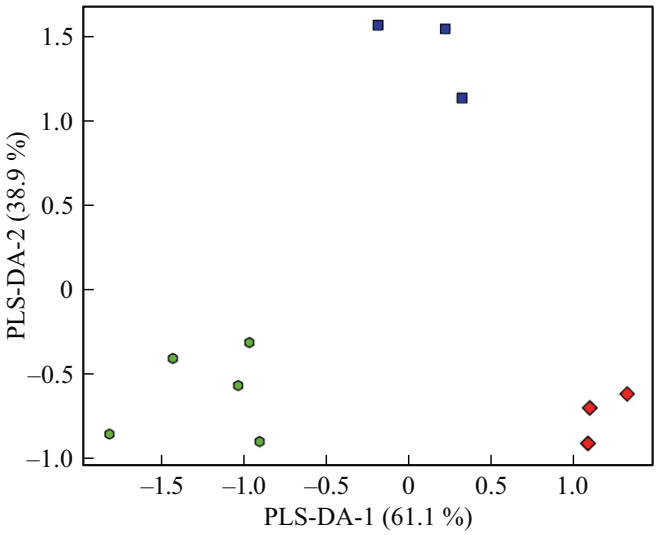


Рис. 2. Двумерный график значений линейной дискриминантной функции PLS-DA: синий цвет — вода деионизированная ультрачистая (аппарат фирмы ООО „Атлант“, г. Челябинск); красный цвет — вода деионизированная (аппарат ДМЭ-2Б ОПТИМА, г. Самара); зеленый цвет — вода водопроводная.

Результаты проведенных исследований

На рис. 1 приведены усредненные спектры исследуемых групп образцов воды. Анализ рис. 1 показывает, что во всем исследуемом диапазоне наблюдаются схожие спектральные изменения исследуемых двух групп деионизированной воды, полученных на разных установках, что может свидетельствовать о схожем химическом составе данных групп образцов.

В области $\sim 1660\,\text{cm}^{-1}$ (амид I) были установлены спектральные различия водопроводной воды и исследуемых двух групп деионизированной воды, что, вероятнее всего, связано с наличием в составе водопроводной воды различных микроорганизмов.

Далее был проведен статистический дискриминантный анализ. Для статистической обработки декомпозированных линий был выбран PLS-DA-дискриминантный анализ методом частичных наименьших квадратов. Результаты PLS-DA анализа представлены на рис. 2.

Из рис. 2 видно, что все три группы представленных образцов воды статистически различимы. По параметру PLS-DA-2 (38.9 %) деионизированная ультрачистая вода, полученная на аппарате ООО „Атлант“ (г. Челябинск), сходна по спектральным свойствам с деионизированной водой, полученной на установке ДМЭ-2Б ОПТИМА (г. Самара). Данные две группы деионизированной воды отличаются по параметру PLS-DA-1 (61.1 %) от водопроводной, что подтверждает полученные выше результаты.

Проведенный химический анализ и микробиологический анализы исследуемых образцов воды показали, что деионизированная вода, полученная на установке ДМЭ-2Б ОПТИМА (г. Самара), а также куплен-

ная деионизированная вода, представленная под маркой „ультрачистая“ (аппарат фирмы ООО „Атлант“, г. Челябинск), имеют одинаковый химический состав. Все анализируемые образцы соответствуют нормативным требованиям по ключевым показателям — остаточному содержанию ионов, органических веществ (ТОС) и другим параметрам.

Выводы

В результате проведенного дискриминантного анализа спектров комбинационного рассеяния показано, что деионизированная вода, полученная с помощью установки ДМЭ-2Б ДМЭ-2Б ОПТИМА, сходна по спектральному составу с деионизированной ультрачистой водой, полученной на аппарате ООО „Атлант“.

Установлено, что в области линий КР $\sim 1660\,\mathrm{cm}^{-1}$ исследуемые группы деионизированной воды имеют спектральные различия с водопроводной водой, что, вероятнее всего, связано с наличием микроорганизмов в составе водопроводной воды.

Результаты исследований были подтверждены проведенным химическим и микробиологическим анализами исследуемых групп образцов.

Показано, что спектроскопия комбинационного рассеяния может быть использована для оценки состава деионизированной воды, применяемой в биотехнологических лабораториях.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] M. Mendes, C. Fagundes, C. Porto, L. Bento, T. Costa, R. Santos, N. Sumita. Jor. Bras. de Patol. e Med. Lab., **47** (3), 217–220 (2011). DOI: 10.1590/S1676-24442011000300004
[2] Ö. Arar, Ü. Yüksel, N. Kabay, M. Yüksel. Desalination., **342**, 16–17 (2014). DOI: 10.1016/j.desal.2014.01.028
[3] M.T. Stauffer. *Applications of Molecular Spectroscopy to Current Research in the Chemical and Biological Sciences* (InTechOpen, London, 2016) p. 406. DOI: 10.5772/64550
[4] S. Almaviva, F. Artuso, I. Giardina, A. Lai, A. Pasquo. Sensors., **22** (21), 1–12 (2022). DOI: 10.3390/s22218338
[5] Г.И. Долгих, В.Е. Привалов. *Лазеры и их применение в сверхточных измерениях* (Издательство ДВО РАН, Владивосток, 2024), 368 с.
[6] Э.И. Воронина, В.Е. Привалов, А.Э. Фотиади, В.Г. Шеманин. *Лазерные приборы дистанционного зондирования молекул загрязняющих веществ в атмосфере* (Изд-во КубГТУ, Новороссийск, 2009), 116 с.
[7] В.Е. Привалов, А.Э. Фотиади, В.Г. Шеманин. *Лидарное зондирование молекулярного водорода* (Политех-Пресс, СПб, 2023), 92 с.
[8] Z. Li, J. Wang, D. Li. Spectroscopy Reviews, **51** (4), 313–320 (2016). DOI: 10.1080/05704928.2015.1131711
[9] Z. Movasaghi, S. Rehman, I.U. Rehman. Applied Spectroscopy Reviews, **42** (5), 493–541 (2010).
[10] P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, O.O. Frolov. Journal of Optical Technology, **88** (9), 485–488 (2021). DOI: 10.1364/JOT.88.000485