



اندازه گیری غلظت رنگ در محلول های دوجزئی به روش مشتقی پیک تا پیک طیف نسبی

احسان اکرامی و علی شمس ناتری*

گروه مهندسی نساجی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۸۶/۴/۳۱ تاریخ پذیرش: ۱۳۸۶/۸/۲۳ در دسترس به صورت الکترونیکی از: ۱۳۸۶/۸/۳۰

چکیده

در مقاله حاضر از روش مشتقی پیک تا پیک طیف نسبی به منظور تعیین غلظت اجزای مخلوط های مختلف دوتایی از سه رنگزا با رنگ های زرد، سرخ و قرمز استفاده گردید. در روش مشتقی پیشنهادی، از اختلاف مقادیر طیف جذبی نسبی به دست آمده در دو اکسترمم همسایه (مقدار پیک تا پیک) جهت پیشگویی غلظت مواد رنگزا استفاده شد. مقادیر متوسط فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی غلظت در نمونه های مختلف دوتایی تهیه شده در این تحقیق با استفاده از روش معمول به ترتیب ۱۱۲/۸۲، ۰/۰۰۶۲۲ و ۲۲/۶۹۳ و با استفاده از روش مشتقی ارائه شده ۹۹/۲۸۷، ۰/۰۰۰۳۳ و ۱/۱۱۸ بوده اند. با توجه به نتایج حاصله، روش مشتقی پیک تا پیک طیف نسبی در پیشگویی غلظت اجزای مخلوط های دوتایی مواد رنگزا نسبت به روش معمولی از دقت بالاتری برخوردار است.

واژه های کلیدی: رنگزا، غلظت، روش مشتقی پیک تا پیک طیف نسبی، اندازه گیری، برهمپوشانی.

Determination of the Dye Content in Bicomponent Dye Mixtures by Ratio Spectra Derivative Method (peak to peak)

E. Ekrami and A. Shams Nateri*

Abstract

In the present work, ratio spectra derivative method (p-p) was used in order to determine the dye contents in different bicomponent dye mixtures prepared with three dyes of yellow, scarlet and red colors. The difference between neighboring extremum values at derivative ratio spectra of bicomponent mixtures of the dyes were used for determination of dye content. The obtained recovery factor, absolute error and relative error by using the proposed derivative technique and normal methods were 99.287, 0.000033, 1.118 and 112.82, 0.00622, 22.693 respectively. The analysis of obtained results via the proposed derivative and normal methods show higher accuracy of the developed method in determination of bicomponent dye solutions. J. Color Sci. Tech. 1(2007), 49-55. © Institute for Colorants, Paint and Coatings.

Keyword: Dye, Concentration, Ratio spectra derivative method (peak to peak), Determination, Overlapping.

۱- مقدمه

اندازه‌گیری مقادیر رنگ‌ها با مشکل مواجه می‌گردد حالتی است که مواد رنگزای موجود در مخلوط به لحاظ طیفی مشابه بوده و طیف جذبی آنها به میزان زیادی دارای برهمپوشانی باشد. در این گونه موارد بروز کوچکترین خطاها در فرآیند اندازه‌گیری منجر به بروز اشتباهات بزرگ در مقادیر محاسبه شده خواهد گردید بر این اساس اندازه‌گیری مواد رنگزای دارای مشابهت طیفی از حساسیت ویژه‌ای برخوردار است. یکی از رویکردهای جالب به منظور حل مشکل برهمپوشانی طیفی ترکیبات در مخلوط آنها، استفاده از روش مشتق‌گیری طیفی می‌باشد که امروزه در زمینه‌های مختلفی مورد توجه و استفاده قرار گرفته است [۳-۸].

اسپکتروفوتومتری مشتقی UV-visible روشی است طیفی، که در آن نرخ تغییر جذب به صورت تابعی از طول موج مورد اندازه‌گیری قرار می‌گیرد [۹]. طیف مشتقی به دست آمده پیچیده‌تر بوده و همچنین ممکن است از مشخصات بیشتری در مقایسه با طیف اولیه برخوردار باشد. فرآیند مشتق‌گیری به طور کلی منجر به افزایش قابلیت تجزیه و تحلیل در مورد طیف‌های روی هم افتاده می‌گردد. اصول اسپکتروفوتومتری مشتقی توسط تالسکی [۸] مورد بررسی قرار گرفته است. در بسیاری از نوشته‌ها از روش‌های اسپکتروفوتومتری مشتقی در تعیین مقادیر مواد رنگی دارویی و غذایی در مخلوط دوتایی و سه تایی آنها استفاده شده است [۱۰-۱۶].

در مقاله حاضر روش مشتقی طیف نسبی [۱۷، ۱۸] به منظور تعیین مقادیر رنگ‌های دارای برهمپوشانی طیفی در مخلوط‌های دوتایی آنها مورد استفاده قرار گرفته است. در ارزیابی‌ها نیز از روش پیک تا پیک (پیک - پیک، (p-p)) که از روش‌های متداول در اسپکتروسکوپی مشتقی است استفاده شد. روش مشتقی ارائه شده در مواردی که روش معمول اندازه‌گیری در تجزیه و تحلیل مقادیر رنگ‌های دارای طیف‌های روی هم افتاده با خطا مواجه می‌گردد، از کارایی بالایی برخوردار است.

۲- روش تجربی

در این تحقیق از ۳ رنگزای Cibacron yellow 3G-، Cibacron scarlet R-P و E و Cibacron red 3B-P از محصولات شرکت سیباگایکی سویس به منظور تهیه نمونه محلول‌های رنگی استفاده گردید. در اندازه‌گیری طیف جذبی محلول‌های رنگی تهیه شده نیز از یک دستگاه اسپکتروفوتومتر Cintra 10 Uv-visible استفاده شد.

محلول‌های استفاده شده شامل محلول‌های تک جزیبی و دوجزئی بوده‌اند. محلول‌هایی تک جزیبی با استفاده از غلظت‌های ۰/۰۲۵، ۰/۰۱، ۰/۰۲۵، ۰/۰۵ و ۰/۱ گرم در لیتر از رنگ‌های قرمز و سرخ و ۰/۰۲۵، ۰/۰۵، ۰/۱ و ۰/۱۲۵ گرم در لیتر از رنگزای زرد تهیه گردید. محلول‌های دوجزئی نیز ترکیب دوتایی مواد رنگزای فوق با غلظت‌های

معمولاً در صنایع مرتبط با رنگ از جمله نساجی، جوهر، نقاشی و غیره بسیاری از فام‌ها از طریق مخلوط نمودن چند ماده رنگزا تولید می‌گردند. یکی از مسائل قابل توجه در این مورد یافتن مقادیر دقیق رنگ‌ها به منظور کنترل فام‌ها و یا تولید رنگ همانند با نمونه هدف می‌باشد. روش‌های اندازه‌گیری مختلفی ممکن است به منظور تعیین مقادیر رنگ‌ها در مخلوط آنها مورد استفاده قرار گیرند. تخمین مقدار رنگزا در مواد از طریق اطلاعات انعکاسی نمونه رنگزای شده و یا با استفاده از اطلاعات مربوط به طیف جذبی محلول رنگزا انجام می‌گیرد. در مورد اطلاعات انعکاسی از قانون کیوبلکا-مانک و در محلول‌های رنگی از قانون بیر - لامبرت استفاده می‌شود.

طبق قانون لامبرت، در غلظت ثابت با افزایش طول سل، میزان نور جذب شده به تناسب افزایش می‌یابد. طبق قانون بیر نیز میزان جذب محلول تابع غلظت اجزای جاذب در محلول می‌باشد. ترکیب این دو قانون تحت عنوان قانون بیر - لامبرت بیان می‌شود که رابطه آن به صورت زیر می‌باشد.

$$T = \frac{I}{I_0} = 10^{-\epsilon c L} \quad (1)$$

که در آن T ضریب انتقال، ϵ ضریب جذب مولار (که تابع ساختار شیمیایی ماده جاذب می‌باشد)، L طول مسیر عبور نور یا ضخامت لایه جاذب (سل دستگاه اسپکتروفوتومتر)، c غلظت ماده جاذب یا رنگزا، I_0 شدت نور تابیده شده و I نیز شدت نور منتقل شده است.

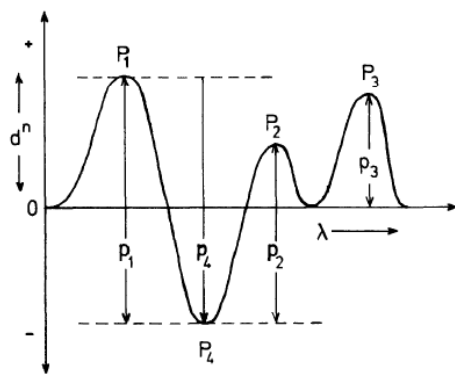
متغیر دیگری تحت عنوان مقدار جذب A براساس فرمول (۲) محاسبه می‌گردد.

$$A = \log\left(\frac{1}{T}\right) = -\epsilon c L \quad (2)$$

بر طبق این رابطه میزان جذب یک محلول در یک طول موج مشخص، مستقیماً متناسب با غلظت محلول و طول سل است. مقدار جذب مخلوط چند ماده جاذب مساوی با مجموع مقدار جذب اجزای تشکیل دهنده مخلوط می‌باشد. وابستگی مقدار جذب محلول به غلظت ماده جاذب در طول موج‌های مختلف متغیر است به طوری که در یکی از این طول موج‌ها بیشینه می‌باشد. طول موجی را که در آن بیشترین جذب حاصل می‌شود با λ_{max} نشان داده شده و در محاسبه غلظت ماده جاذب مورد استفاده قرار می‌گیرد.

خطی بودن قانون بیر - لامبرت در بعضی موارد نقض می‌گردد. به عنوان مثال غلظت‌های بالای ماده جاذب، انتشار نور توسط ذرات ریز موجود در نمونه، پدیده فلورسانس یا فسفرسانس و غیره باعث نقض قانون بیر - لامبرت و به عبارتی انحراف از حالت خطی می‌گردند [۱، ۲].

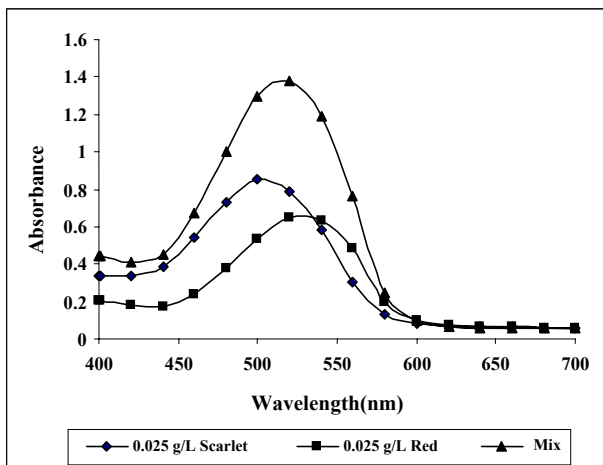
یکی از مواردی که در آن کاربرد قانون بیر - لامبرت به منظور



شکل ۱: فواصل قابل استفاده در روش مشتقی پیک تا پیک [۸].

۳- نتایج و بحث

طیف‌های جذبی (مرتبه صفر) محلول‌های تکی و دوتایی سه رنگ زرد، قرمز و سرخ در شکل‌های ۲ تا ۴ نشان داده شده‌اند. طول موج‌های بیشینه جذب در رنگ‌های زرد، سرخ و قرمز به ترتیب ۴۰۰، ۵۰۰ و ۵۲۵ نانومتر می‌باشند. با توجه به شکل ۱ مخلوط رنگ‌های سرخ و قرمز بیشتر از سایر مخلوط‌ها از برهم‌پوشانی طیفی برخوردارند. در روش نرمال از مقادیر جذب در طول موج‌های بیشینه جذب، جهت محاسبه غلظت اجزاء در مخلوط‌های دوتایی استفاده گردید. برای مخلوط قرمز - زرد مقادیر فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی برای جزء قرمز به ترتیب برابر ۱۱۷/۹۱۳، ۰/۰۰۳۴ و ۱۸/۰۳۷ و برای جزء زرد به ترتیب برابر ۱۰۴/۸۵، ۰/۰۰۲۱۳ و ۱۵/۹ می‌باشد. همچنین در مخلوط قرمز - سرخ مقادیر فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی برای جزء قرمز به ترتیب برابر ۱۰۵/۱۸۷، ۰/۰۰۵۰۸ و ۲۱/۹۴ و برای جزء سرخ به ترتیب برابر ۹۸/۰۳۳۷، ۰/۰۰۹۳۷ و ۱۳/۱۳۳۷ می‌باشد.



شکل ۲: طیف جذبی محلول ۰/۰۲۵ g/L از رنگ‌های سرخ، قرمز و مخلوط آنها.

۰/۰۰۲۵، ۰/۰۰۱، ۰/۰۲۵ و ۰/۰۵ گرم در لیتر از رنگزای قرمز و سرخ و ۰/۰۲۵، ۰/۰۰۵، ۰/۱ و ۰/۱۲۵ گرم در لیتر از رنگزای زرد بوده‌اند.

عمل پیشگویی غلظت رنگ محلول‌ها به دو روش نرمال و روش مشتق نسبی پیک تا پیک صورت پذیرفت. بدین منظور نمونه‌ها به دو دسته تقسیم شدند که از دسته اول جهت عمل کالیبراسیون و دسته دوم جهت تست و ارزیابی روش‌ها استفاده گردید.

در روش نرمال با توجه به دو جزئی بودن محلول‌ها از مقادیر جذب در دو طول موج جهت اندازه‌گیری غلظت اجزاء استفاده شد. طول موج‌های انتخابی مربوط به طول موج بیشینه جذب اجزای تشکیل دهنده مخلوط و برای رنگ سرخ ۵۰۰ نانومتر، رنگ قرمز ۵۲۵ نانومتر و برای رنگ زرد ۴۰۰ نانومتر بوده‌اند. به این ترتیب غلظت رنگ‌ها در مخلوط‌های مختلف دو جزئی با استفاده از حل همزمان معادلات مربوط به این دو طول موج محاسبه گردیدند.

به منظور اندازه‌گیری غلظت اجزای رنگی مخلوط‌ها با استفاده از روش مشتقی طیف نسبی پیک تا پیک، یک نمونه از هر جزء مخلوط به عنوان استاندارد انتخاب شد که غلظت استاندارد در مورد مخلوط‌های رنگ‌های قرمز و سرخ، ۰/۰۲۵ گرم در لیتر و در مخلوط‌های رنگزای زرد نیز ۰/۰۵ گرم در لیتر بوده است.

در روش مشتقی نسبی طیف جذبی یک مخلوط دوتایی به طیف جذبی نمونه استاندارد تقسیم و از طیف نسبی یا خارج قسمت تقسیم به دست آمده مشتق‌گیری می‌شود. طیف مشتق نسبی حاصل تنها وابسته به غلظت نمونه مقسوم علیه می‌باشد. در مرحله بعد تعدادی از نمونه‌ها برای کالیبراسیون و بقیه برای تست روش مورد استفاده قرار گرفت.

به منظور تنظیم منحنی‌های کالیبراسیون و همچنین تعیین مقادیر رنگ‌ها در مخلوط‌ها از اختلاف مقادیر بین دو اکسترم همسایه در طیف مشتق نسبی به دست آمده (روش پیک تا پیک) استفاده شد. فواصل قابل استفاده در این روش به طور شماتیک در شکل ۱ نشان داده شده است. در این روش از اختلاف بین مقادیر جذب در دو اکسترم همسایه در طیف مشتق نسبی جهت محاسبه غلظت استفاده می‌گردد.

جهت مقایسه نتایج حاصله از سه پارامتر فاکتور بازیابی، (R_f) مقدار قدر مطلق خطا (E) و همچنین درصد خطای نسبی (E_r) به ترتیب بر اساس روابط (۳ - ۵) استفاده گردید.

$$R_f (\%) = \frac{C_p}{C_a} \times 100 \quad (3)$$

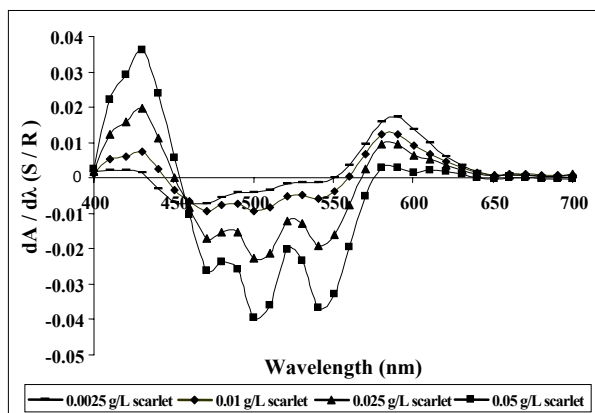
$$E = |C_p - C_a| \quad (4)$$

$$E_r (\%) = \frac{|C_p - C_a|}{C_a} \times 100 \quad (5)$$

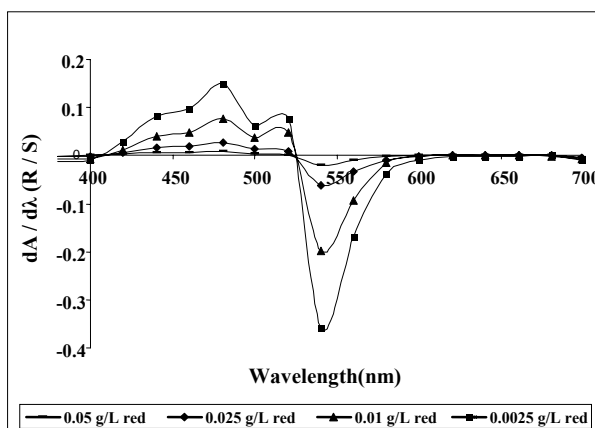
به طوری که C_p غلظت پیشگویی شده و C_a غلظت واقعی می‌باشند.

غلظت رنگ قرمز در مخلوط‌هایی دوتایی سرخ و قرمز استفاده گردید. برای مخلوط قرمز - سرخ مقادیر فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی برای جزء قرمز به ترتیب برابر ۹۹/۱۳۷، ۰/۰۰۰۲۱ و ۱/۰۷۳۷ می‌باشد و برای جزء سرخ به ترتیب برابر ۹۹/۰۹۹، ۰/۰۰۰۵ و ۰/۹۲۶ بوده‌اند.

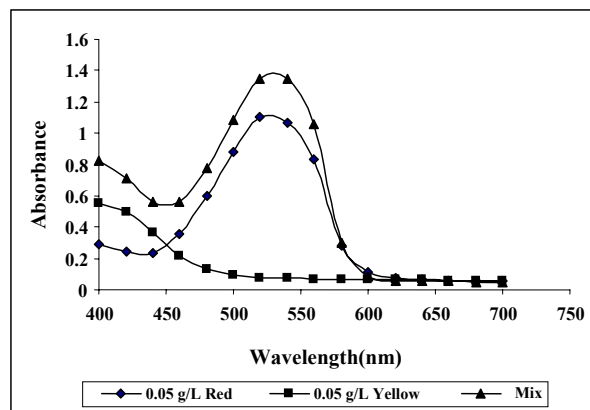
مشتق اول طیف نسبی مخلوط‌های دوتایی قرمز - زرد با استفاده از نمونه استاندارد زرد با غلظت ۰/۰۵ گرم در لیتر در شکل ۷ نشان داده شده است. در طیف مشتقی نسبی حاصله، مقادیر جذب در طول موج‌های ۵۰۰ و ۵۸۰ نانومتر انتخاب و از اختلاف بین مقادیر جذب این دو طول موج به عنوان مقادیر پیک تا پیک جهت محاسبه غلظت رنگ قرمز استفاده گردید. همچنین در شکل ۸ مشتق اول طیف نسبی مخلوط دوتایی قرمز و زرد با استفاده از نمونه استاندارد قرمز با غلظت ۰/۰۵ گرم در لیتر نشان داده شده است. در طیف مشتقی نسبی حاصله از اختلاف بین مقادیر جذب در طول موج‌های ۴۵۰ و ۵۲۵ نانومتر به عنوان مقادیر پیک تا پیک (در این حالت پیک تا زمینه) جهت محاسبه غلظت رنگ زرد استفاده گردید.



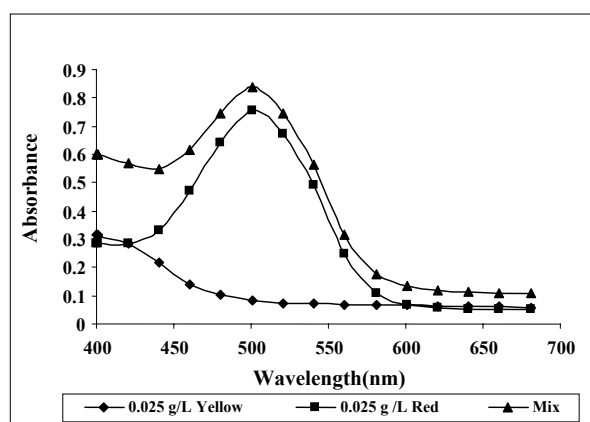
شکل ۵: مشتق طیف‌های نسبی مخلوط‌های قرمز و سرخ (۰/۰۲۵ g/L قرمز به عنوان استاندارد).



شکل ۶: مشتق طیف‌های نسبی مخلوط‌های قرمز و سرخ (۰/۰۲۵ g/L سرخ به عنوان استاندارد).



شکل ۳: طیف جذبی محلول ۰/۰۵ g/L از رنگ‌های سرخ، زرد و مخلوط آنها.



شکل ۴: طیف جذبی محلول ۰/۰۵ g/L از رنگ‌های زرد، قرمز و مخلوط آنها.

برای مخلوط قرمز - زرد نیز مقادیر فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی برای جزء قرمز به ترتیب برابر ۱۲۰/۳۸۷، ۰/۰۰۴۷۸ و ۲۹/۶۳۷ و برای جزء سرخ به ترتیب برابر ۱۳۰/۵۴۶، ۰/۰۱۲۶ و ۳۷/۵۰۸۷ بوده است.

مشتق اول طیف نسبی مخلوط دوتایی قرمز و سرخ با غلظت‌های مختلف سرخ با استفاده از نمونه استاندارد قرمز با غلظت ۰/۰۲۵ گرم در لیتر در شکل ۵ نشان داده شده است. در طیف مشتقی نسبی حاصله، از مقادیر جذب در طول موج‌های ۵۴۰ و ۵۸۰ نانومتر به عنوان دو پیک استفاده گردید و از اختلاف بین مقادیر جذب در طول موج‌های ۵۴۰ و ۵۸۰ نانومتر به عنوان مقادیر پیک تا پیک جهت محاسبه غلظت رنگ سرخ استفاده گردید.

در شکل ۶ مشتق اول طیف نسبی مخلوط‌های دوتایی قرمز و سرخ با استفاده از نمونه استاندارد سرخ با غلظت ۰/۰۲۵ گرم در لیتر نشان داده شده است.

در طیف مشتقی نسبی حاصله، از مقادیر جذب در طول موج‌های ۵۴۰ و ۵۳۰ نانومتر به عنوان دو پیک استفاده و از اختلاف بین مقادیر جذب در این طول موج‌ها به عنوان مقادیر پیک تا پیک جهت محاسبه

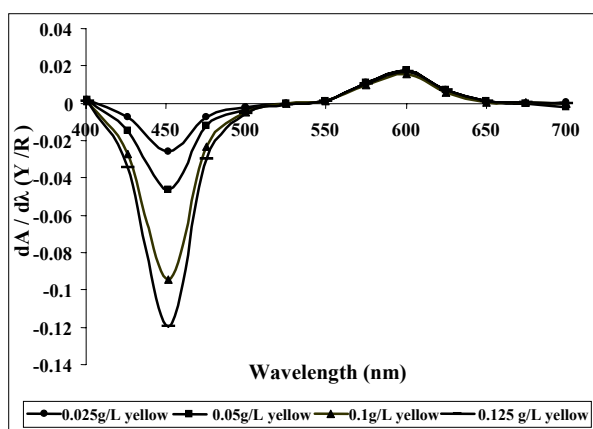
گرم در لیتر نشان داده شده است. در طیف مشتقی نسبی به دست آمده از اختلاف بین مقادیر جذب در طول موج‌های ۵۰۰ و ۵۵۰ نانومتر به عنوان مقادیر پیک تا پیک جهت محاسبه غلظت رنگ زرد استفاده گردید.

برای مخلوط‌های رنگ‌زاهای سرخ - زرد مقادیر فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی بترتیب برای جزء سرخ ۹۹/۵۸۷، ۰/۰۰۰۲۲۳ و ۱،۱۹ و برای جزء زرد ۹۹/۱۰۵، ۰/۰۰۰۰۵ و ۰/۹۲ بوده‌اند

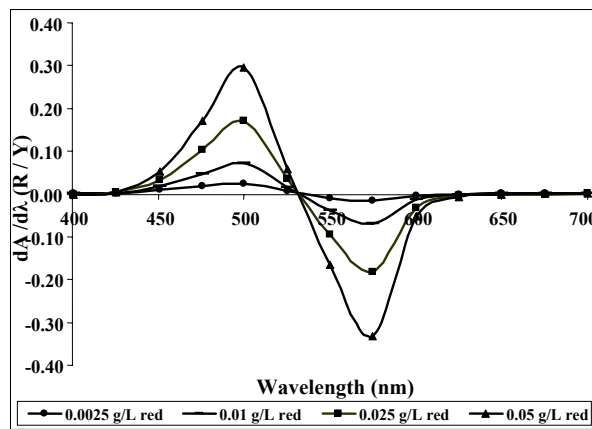
نتایج به دست آمده از اندازه‌گیری مقادیر رنگ‌زاهای در مخلوط‌های مختلف دوتایی توسط دو روش نرمال و مشتق طیف نسبی در جداول ۱ تا ۳ آورده شده‌اند.

برای مخلوط قرمز-زرد مقادیر فاکتور بازیابی، خطای مطلق و خطای نسبی پیشگویی برای جزء قرمز به ترتیب برابر ۹۹/۱۸۶، ۰/۰۰۰۲۹ و ۱/۴۵۶ و برای جزء زرد بترتیب برابر ۹۹/۶۰۶، ۰/۰۰۰۲۸ و ۱/۱۴۴ بوده است.

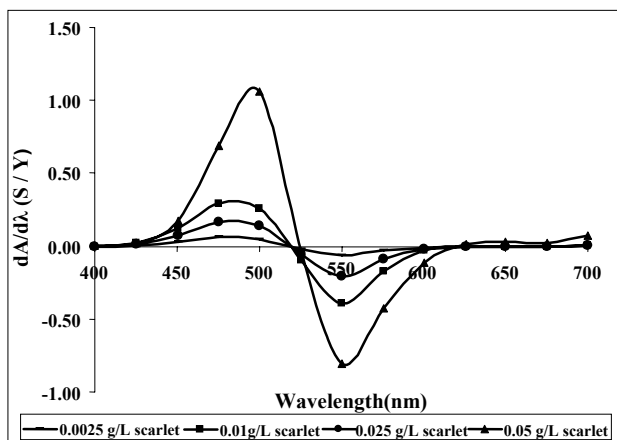
مشتق اول طیف نسبی مخلوط دوتایی سرخ - زرد با استفاده از استاندارد سرخ با غلظت ۰/۰۵ گرم در لیتر در شکل ۹ نشان داده شده است. در این طیف مشتقی نسبی مقادیر جذب در طول موج‌های ۴۵۰ و ۵۲۵ نانومتر انتخاب و از اختلاف بین آنها به عنوان مقادیر پیک تا پیک (در این حالت پیک تا زمینه) جهت محاسبه غلظت رنگ قرمز استفاده گردید. همچنین در شکل ۱۰ مشتق اول طیف نسبی مخلوط دوتایی سرخ و زرد با استفاده از نمونه استاندارد زرد با غلظت ۰/۰۵



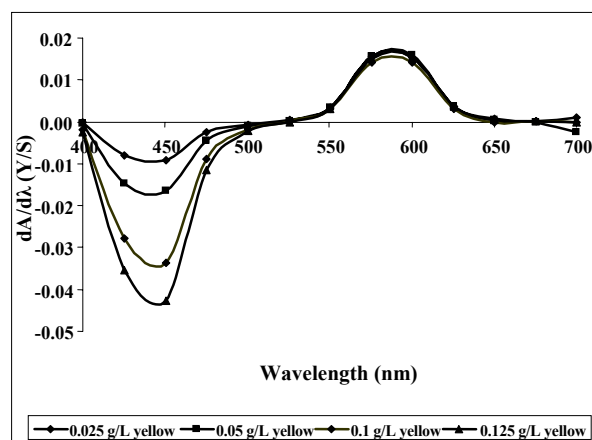
شکل ۸: مشتق طیف‌های نسبی مخلوط‌های زرد و قرمز (۰/۰۵ g/L قرمز به عنوان استاندارد).



شکل ۷: مشتق طیف‌های نسبی مخلوط‌های زرد و قرمز (۰/۰۵ g/L زرد به عنوان استاندارد).



شکل ۱۰: مشتق طیف‌های نسبی مخلوط‌های زرد و سرخ (۰/۰۵ g/L زرد به عنوان استاندارد).



شکل ۹: مشتق طیف‌های نسبی مخلوط‌های زرد و سرخ (۰/۰۵ g/L سرخ به عنوان استاندارد).

جدول ۱: مقایسه مقادیر فاکتور بازیابی روش نرمال و روش مشتقی پیک تا پیک.

مخلوط دو تایی	جزء	روش	میانگین	انحراف معیار	بیشینه	کمینه
قرمز و زرد	قرمز	معمولی	۱۱۷/۹۱	۱۵/۲۸	۱۶۸	۹۹
		پیک تا پیک	۹۹/۱۹	۲/۰۷	۱۰۳/۵۷	۹۶/۴۰
	زرد	معمولی	۱۰۴/۸۵	۲۲/۸۰	۱۵۲	۸۰
		پیک تا پیک	۹۹/۶۱	۱/۲۶	۱۰۲	۹۸
قرمز و سرخ	قرمز	معمولی	۱۰۵/۱۹	۲۴/۴۵	۱۴۰	۶۴
		پیک تا پیک	۹۹/۱۴	۲/۰۱	۱۰۳/۲۰	۹۶/۴۰
	سرخ	معمولی	۹۸/۰۳	۱۶/۶۹	۱۳۴	۷۶
		پیک تا پیک	۹۹/۱۰	۰/۸۶	۱۰۰/۲۰	۹۶/۸۰
سرخ و زرد	سرخ	معمولی	۱۲۰/۳۹	۳۱/۴۳	۱۸۸	۴۲
		پیک تا پیک	۹۹/۵۹	۱/۳۲	۱۰۲	۹۷/۲۰
	زرد	معمولی	۱۰۳/۵۵	۱۰۷/۶۴	۵۳۰	۶۱/۲۰
		پیک تا پیک	۹۹/۱۱	۰/۶۹	۱۰۰/۲۰	۹۸

جدول ۲: مقایسه مقادیر قدر مطلق خطای پیشگویی غلظت در روش نرمال و روش مشتقی پیک تا پیک.

مخلوط دو تایی	جزء	روش	میانگین	انحراف معیار	بیشینه	کمینه
قرمز و زرد	قرمز	معمولی	۰/۰۰۳۴۲	۰/۰۰۳۳۱	۰/۰۰۹۲۰	۰
		پیک تا پیک	۰/۰۰۰۲۹	۰/۰۰۰۲۶	۰/۰۰۰۹۰	۰/۰۰۰۰۲
	زرد	معمولی	۰/۰۰۲۱۳	۰/۰۰۲۷۰	۰/۰۱	۰
		پیک تا پیک	۰/۰۰۰۲۸	۰/۰۰۰۳۰	۰/۰۰۱	۰/۰۰۰۰۱
قرمز و سرخ	قرمز	معمولی	۰/۰۰۵۰۸	۰/۰۰۵۲۸	۰/۰۱۸	۰/۰۰۰۴
		پیک تا پیک	۰/۰۰۰۲۱	۰/۰۰۰۲۰	۰/۰۰۰۰۷	۰/۰۰۰۰۱
	سرخ	معمولی	۰/۰۰۹۳۷	۰/۰۰۹۹۳	۰/۰۰۳۴	۰/۰۰۰۸
		پیک تا پیک	۰/۰۰۵۰	۰/۰۰۰۴۲	۰/۰۰۱۵	۰
سرخ و زرد	سرخ	معمولی	۰/۰۰۴۷۸	۰/۰۰۴۰۲	۰/۰۱۴۵	۰/۰۰۰۴
		پیک تا پیک	۰/۰۰۰۲۲	۰/۰۰۰۲۵	۰/۰۰۰۰۸	۰/۰۰۰۰۳
	زرد	معمولی	۰/۰۱۲۵۶	۰/۰۲۵۷۳	۰/۱۰۷۵	۰/۰۰۰۱
		پیک تا پیک	۰/۰۰۰۵۰	۰/۰۰۰۳۱	۰/۰۰۱۲	۰/۰۰۰۱

جدول ۳: مقایسه مقادیر درصد خطای پیشگویی غلظت رنگ در روش نرمال و روش مشتقی پیک تا پیک.

مخلوط دو تایی	جزء	روش	میانگین	انحراف معیار	بیشینه	کمینه
قرمز و زرد	قرمز	معمولی	۱۸/۰۴	۱۵/۱۳	۰/۶۸	۰
		پیک تا پیک	۱/۴۶	۰/۸۲	۳/۶	۰/۶
	زرد	معمولی	۱۵/۹	۱۶/۵۹	۵۲	۰
		پیک تا پیک	۱/۱۴	۰/۵۹	۲	۰/۴
قرمز و سرخ	قرمز	معمولی	۲۱/۹۴	۱۰/۶۴	۴۰	۸
		پیک تا پیک	۱/۰۷	۰/۵۸	۲/۴	۰/۴
	سرخ	معمولی	۱۳/۱۳	۹/۹۳	۳۴	۱/۵
		پیک تا پیک	۰/۹۳	۰/۸۳	۳/۲	۰

جدول ۳: (ادامه).

مخلوط دوتایی	جزء	روش	میانگین	انحراف معیار	بیشینه	کمینه
سرخ و زرد	سرخ	معمولی	۲۹/۶۴	۲۲/۲۳	۸۸	۵
		پیک تا پیک	۱/۱۹	۰/۶۵	۲/۸	۰/۲
	زرد	معمولی	۳۷/۵۱	۱۰۵/۲۶	۴۳۰	۰/۱
		پیک تا پیک	۰/۹۲	۰/۶۵	۲	۰/۱۶

- A. Savitzky, M. J. E. Golay, Smoothing and differentiation of data by simplified least square procedures. *Anal. Chem.* 36. (1964), 1627-1639.
- S. Altinoz, S. Toptan, Determination of Tartrazine and Ponceau-4R in Various Food Samples by Vierordt's Method and Ratio Spectra First-Order Derivative UV Spectrophotometry. *J. Food Compos. Anal.* 15(2002), 667-683.
- S. Altinoz, S. Toptan, Simultaneous determination of Indigotin and Ponceau-4R in, food samples by using, vierordt's method, ratio spectra first order derivative and derivative UV spectrophotometry, *J. Food Compos. Anal.* 16(2003), 517-530.
- L. El-Gindy, A. Ashour, L. Abdel-Fattah, M. M. Shabana, Spectrophotometric determination of benazepril hydrochloride and hydrochlorothiazide in binary mixture using second derivative of the ratio spectra and chemometric methods. *J. Pharmaceut. Biomed. Anal.* 25(2001), 299-307.
- J. J. Nevado, J. R. Flores, C. G. Cabanillas, M. J. V. Llerena, A. C. Salcedo, Resolution of ternary mixtures of Tartrazine, Sunset yellow and Ponceau 4R by derivative spectrophotometric ratio Spectrum-zero crossing method in commercial foods. *Talanta.* 46(1998), 933-942.
- J. J. Nevado, C. G. Cabanillas, A. M. C. Salcedo, Simultaneous spectrophotometric determination of three food dyes by using the first derivative of ratio Spectra. *Talanta.* 42(1995), 2043-2045.
- J. J. Berzas, J. R. Flores, M. J. V. Llerena, N. R. Fariñ as, Spectrophotometric resolution of ternary mixtures of Tartrazine, Patent Blue V and Indigo Carmine in commercial products. *Anal. Chim. Acta.* 391(1999), 353-364.
- M. Pernarowski, A. M. Knevel, J. E. Christian, Application of absorbency ratios to the analysis of pharmaceuticals I. Theory of the analysis of binary mixtures. *J. Pharmaceut. Sci.* 50 (1961), 943-945.
- F. Yokoyama, M. Pernarowski, Application of absorbency ratios to the analysis of pharmaceuticals III. Simultaneous analysis of aminophyline and phenobarbital. *J. Pharmaceut. Sci.* 50(1961), 953-957.
- F. Salinas, J. J. Berzas, A. E. Monsilla, Mixtures of chromophores with overlapped spectra on the basis of the first derivative of the ratio of the spectra. *Talanta.* 37(1990), 347-351.

۴- نتیجه‌گیری

در مقاله حاضر از روش مشتقی طیف نسبی پیک تا پیک به منظور تعیین مقادیر رنگ‌ها در مخلوط‌های دوتایی آنها استفاده گردید. با توجه به نتایج حاصله، خطای اندازه‌گیری روش مشتقی ارائه شده در پیشگویی غلظت اجزای مخلوط‌های دوتایی مواد رنگزا کمتر از روش معمول می‌باشد. روش مشتقی پیشنهادی در مواردی که اجزای مخلوط دارای تشابه طیفی هستند نیز از دقت بالایی برخوردار است. در اینگونه موارد روش معمول اندازه‌گیری نسبت به خطاهای آزمایشگاهی و اندازه‌گیری بسیار حساس بوده و معمولاً با خطاهای قابل توجهی همراه می‌گردد. روش مشتقی ارائه شده با توجه به دقت بالای آن در تخمین مقادیر رنگ‌ها در مخلوط‌های دوتایی و همچنین حساس نبودن آن نسبت به مشابهت طیفی مواد رنگزا یا مشکل برهم‌پوشانی طیفی نسبت به روش کلاسیک دارای برتری می‌باشد.

۵- مراجع

- N. M. Gary, Modern concepts of color and appearance. Science Publishers Inc., U.S.A. 2000, 232-4.
- T. Owen, Fundamentals of Uv-visible, Spectroscopy. Premier. Aligent technologies, 2000, 2-28.
- Varian instruments at work, application of derivative spectrophotometry UV-31., (1984), 1-33.
- C. B. Ojeda, F. S. Rojas, Recent developments in derivative ultraviolet/visible Absorption spectrophotometry. *Anal. Chim. Acta.* 518(2004), 1-24.
- Varian instruments at work, application of derivative spectrophotometry UV-38., 1986, 1-52.
- J. Karpinska, Derivative spectrophotometry-recent applications and directions of developments. *Talanta.* 64(2004), 801-822.
- A-AY. El. Sayed, NA. El Salem, Recent developments of derivative spectrophotometry and their analytical application. *Anal. Sci.* 21(2005), 595-695.
- G. Talsky, Derivative Spectrophotometry. VCH, WEINHEIM. first edition, 1994, 24-26.