

# Lahustunud orgaanilise aine ja humiinainete omaduste uurimine turbamuldades eksklusioonkromatograafia ja UV-Vis spektroskoopia meetoditega

Magistritöö

**Autor: Helen Otsep**

**Juhendaja: dotsent Viia Lepane (keemiainstituut, anorgaanilise keemia õppetool)**

Töö käigus oli uuriti turbamuldadest eraldatud humiin ja fulvohappeid ning fraktsioneerimata muldade lahustunud orgaanilise aine spektroskoopilisi ja molekulaarseid omadusi. Töö eesmärgid olid:

- 1) määrata eksklusioonkromatograafia ja UV-Vis spektroskoopia meetoditel analüütide neeldumiste suhted erinevatel lainepikkustel ultraviolet- ja nähtava kiirguse lainelas ning kasutada neid ühendite erinevate omaduste hindamiseks. Käesolevas töös uuriti neeldumiste suhteid  $A_{254}/A_{436}$  (autohtoonse/allohtoonse orgaanilise aine suhe),  $A_{280}/A_{350}$  (aromaatse süsiniku suhteline sisaldus),  $A_{254}/A_{354}$  (keskmise molekulmassi näitaja),  $A_{470}/A_{664}$  (üldise humifitseerumise astme näitaja) ja  $A_{254}/A_{204}$  (aromaatsete osade ja UV-kiirgust neelavate ühendite suhe).
- 2) määrata eksklusioonkromatograafia (HPSEC) abil erinevates turbamuldades humiinhapete (HA), fulvohapete (FA) ja lahustunud orgaanilise aine (DOM) fraktsioonide mass- ja arvkeskmistatud molekulmassid ja polüdispersuse astmed ning võrrelda HA molekulmassi muutust pinnaseprofiili neljal eri sügavusel,
- 3) võrrelda eksklusioonkromatograafia ja UV-Vis spektroskoopia eeliseid ja puudusi orgaanilise aine ja humiinainete omaduste määramisel.

Töö tulemusena jõuti järgmiste järeldusteni:

- 1) UV-Vis neeldumissuhete põhjal võib hinnata humiinhapete omaduste muutusi pinnaseprofiili lõikes või ka sarnaste pinnasetüüpide omavahelises võrdluses, kuigi ei ole võimalik määrata ühtki kvantitatiivset suurust. Leiti, et arvatud  $A_{254}/A_{354}$  suhte muutus kattus küllaltki hästi eksklusioonkromatograafia abil määratud HA molekulmasside muutusega. Ka on tõenäoline, et HA molekulide aromaatsus suureneb mulla vanuse suurenemisel.
- 2) Uuritud humiinhappe fraktsioonide molekulmassid jäid vahemikku 388 – 1474 Da, fulvohapete molekulmassid vahemikku 921 – 1223 Da ning DOM fraktsioonide molekulmassid vahemikku 700 – 955 Da. Töö tulemusena leiti, et humiinhapete Mw väärtused varieeruvad rohkem võrreldes fulvohapete Mw väärtustega ning HA molekulid võivad olla FA molekulidest nii suuremad kui väiksemad. Kõigi uuritud proovide polüdispersused jäid 2.3 – 5.8 vahele.
- 3) Kahe meetodiga saadud tulemused (neeldumiste suhted) ei kattu väga hästi, peamiselt seetõttu, et UV-Vis spektroskoopias lähtutakse kogu proovilahuse üldistest omadustest, kuid HPSEC meetodi puhul kromatogrammi piigi maksimumile vastavate molekulide omadustest.
- 4) UV-Vis spektroskoopia sobib paremini lahjemate proovilahuste analüüsimiseks, sest võimaldab erinevalt HPSEC-st määrata parema korduvusega neeldumiste intensiivsusi ka kõrgematel lainepikkustel. Seevastu on meetod vähem sobilik kasutamiseks lainepikkustel ~200 nm, kus neeldumiste intensiivsused on väga kõrged ja halva korduvusega ka lahjade proovilahuste korral. HPSEC meetodi eelis on kõrge selektiivsus ning võimalus ühe mõõtmisega teostada nii aine lahutamine segust kui ka aine kvalitatiivne ja kvantitatiivne analüüs. Käesoleva uurimuse käigus leiti, et HPSEC on sobiv meetod määramaks HS ja

OM molekulmasse, polüdisperssusi ning koos DAD detektoriga võimaldab saada infot ka erinevate omaduste kaudu, kasutades UV-Vis neeldumiste suhteid. UV-Vis spektroskoopia on samuti sobiv meetod UV-Vis suhete leidmiseks, kui aine kvalitatiivne koostis on eelnevalt kindlaks määratud.