

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه سمنان

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد

اندازه گیری و پیش تغلیظ کاتیون های منگنز و نیکل و وانادیوم در آب و نمونه

های غذایی با روش استخراج مایع-مایع پخشی

توسط:

سیده مژگان به گزین

استاد راهنما:

علیرضا اصغری

فرزانه شمیرانی

استاد مشاور:

سید حسن زوار موسوی

بهمن ۱۳۸۹



دانشگاه سمنان

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی

تحت عنوان

اندازه گیری و پیش تغلیظ کاتیون های منگنز و نیکل و وانادیوم در آب و نمونه های غذایی

با روش استخراج مایع-مایع پخششی

ارائه شده توسط:

سیده مژگان به گزین

در تاریخ ۳۰ بهمن ماه ۱۳۸۹ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت:

- | | |
|-------------------------|---------------------|
| دکتر علیرضا اصغری | ۱-استاد راهنمای اول |
| دکتر فرزانه شمیرانی | ۲-استاد راهنمای دوم |
| دکتر سید حسن زوار موسوی | ۳-استاد مشاور |
| دکتر مریم رجبی | ۴-استاد داور داخلی |
| دکتر علی فضلی | ۵-استاد داور داخلی |

اندازه گیری و پیش تغلیظ کاتیونهای منگنز و نیکل و وانادیوم در آب و نمونه های غذایی با روش

استخراج مایع-مایع پخشی

چکیده

در کارتحقیقاتی اول، از روش میکرواستخراج مایع-مایع پخشی برای جداسازی و پیش تغلیظ مقادیر بسیار کم یونهای منگنز و نیکل در نمونه های غذایی و اندازه گیری آن به وسیله اسپکترومتر جذب اتمی شعله ای استفاده شد. این تکنیک ساده، سریع، راندمان و فاکتور تغلیظ بالایی دارد. در این روش از دو حلال استخراج کننده و پخش کننده استفاده می گردد. 0.3 میلی لیتر (حلال پخش کننده) حاوی 90 میکرو لیتر کلر فرم (حلال استخراج کننده) و $10^{-4} \times 10/5$ میکروگرم $1-2$ (پیریدیلازو) 2 -فتول (PAN) (عامل کمپلکس کننده) به وسیله سرنگ $1/0$ میلی لیتری سریعا به درون $10/0$ میلی لیتر آب حاوی مخلوط یونهای منگنز و نیکل (100 و 50 میکروگرم برلیتر، به ترتیب) تزریق شد. محلول سانتیفریوژ شده و 20 میکرو لیتر فاز آلی ته نشین گردید. و با 120 میکرو لیتر اتانول رقیق گشته و به اسپکترومتر جذب اتمی شعله ای جهت اندازه گیری منگنز و نیکل تزریق شد. پارامترهای موثر بر استخراج از قبیل pH، غلظت لیگاند، نوع و حجم حلال استخراج کننده و پخش کننده و زمان استخراج مورد بررسی قرار گرفت و بهینه گردید. تحت شرایط بهینه، حد تشخیص روش برای اندازه گیری منگنز و نیکل به ترتیب 0.8 و $1/7$ میکروگرم برلیتر و محدوده خطی منحنی کالیبراسیون $150-300$ و $250-600$ میکروگرم برلیتر و فاکتور افزایشی استخراج $64/2$ و $58/6$ می باشد. تکرارپذیری روش برای مخلوط منگنز و نیکل (100 و 50 میکروگرم برلیتر) $2/9$ و $3/2$ / بندست آمد. ($n=6$) به منظور بررسی کارایی روش، آزمایش روی نمونه های آب معدنی، نوشابه، دلستر و آب میوه انجام شد. درصد بازیافت منگنز و نیکل در نمونه ها، بدون نیاز به عامل رفع مزاحمتها، در محدوده $101/8-90$ و $100/4-92$ درصد به ترتیب قرار گرفت.

در کارتحقیقاتی دوم، از روش میکرواستخراج مایع-مایع پخشی برای جداسازی و پیش تغلیظ مقادیر بسیار کم یون وانادیوم در نمونه های غذایی و اندازه گیری آن به وسیله اسپکترومتری استفاده شد. در این روش از دو حلال استخراج کننده و پخش کننده استفاده می گردد. 0.5 میلی لیتر (حلال پخش کننده) حاوی 110 میکرو لیتر کلر فرم (حلال استخراج کننده) و $10^{-4} \times 10/10$ میکرو گرم بنزوئیل-فنیل-هیدروکسیل آمین (BPHA) (عامل کمپلکس کننده) به وسیله سرنگ $1/0$ میلی لیتری سریعا به درون $10/0$ میلی لیتر آب حاوی مخلوط یون وانادیوم (250 میکروگرم برلیتر) تزریق شد. محلول سانتیفریوژ شده و 20 میکرو لیتر فاز آلی ته نشین گردید. و با 300 میکرو لیتر اتانول رقیق گشته و به اسپکترومتر UV-Vis جهت اندازه گیری وانادیوم تزریق شد. پارامترهای موثر بر استخراج از قبیل PH، غلظت لیگاند، نوع و حجم حلال استخراج کننده و پخش کننده و زمان استخراج مورد بررسی قرار گرفت و بهینه گردید. تحت شرایط بهینه، حد تشخیص روش برای اندازه گیری، وانادیوم

۰/۱۳ میکروگرم برلیترو محدود خطی منحنی کالیبراسیون ۵۰۰-۰/۵ میکروگرم برلیترو فاکتور افزایشی استخراج ۹۸/۴ می باشد. تکرارپذیری روش برای وانادیوم (۲۵۰ میکروگرم برلیتر) ۰/۳۲٪ بدست آمد. (n=۵) به منظور بررسی کارایی روش، آزمایش روی نمونه های آب چاه، کاهو، بادام و جعفری انجام شد. درصد بازیافت وانادیوم در نمونه ها، بدون نیاز به عامل رفع مزاحمتها، در محدوده ۹۴-۸۶٪ درصد قرار گرفت.

Determination and preconcentration of cations (Mn& Ni and V) in water and food samples with dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) method

In the first work, Dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) was developed for the preconcentration and determination of simultaneous manganese and nickel in water and food samples. In this work, an appropriate mixture of ethanol (the disperser solvent) and chloroform (the extraction solvent) was injected rapidly into the aqueous samples containing manganese and nickel. Complex was formed by using 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol (PAN) reagent. The sedimented phase was dissolved in 100 μL ethanol and aspirated into the flame atomic absorption spectrometer (FAAS) using a home-made microsample introduction system. Several variables affecting the microextraction efficiency such as pH, concentration of ligand, type and volumes of extraction and disperser solvents were investigated and optimized. Under the optimized conditions and preconcentration of only 1 mL of sample, the enhancement factors of 64.2 and 84.6 and the detection limits of 0.8 $\mu\text{g L}^{-1}$ and 1.7 $\mu\text{g L}^{-1}$ were obtained for manganese and nickel, respectively. The relative standard deviations (R.S.D. $n=5$) were lower than 4% for both of elements.

In the second work, Dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME) was developed by the spectrophotometry satisfactorily to the preconcentration of vanadium in water and food samples. In this work, an appropriate mixture of ethanol (the disperser solvent) and chloroform (the extraction solvent) was injected rapidly into the aqueous samples containing vanadium. Complex was formed by using N-benzoyl-N-phenylhydroxylamine (BPHA) reagent. The sedimented phase was dissolved in 300 μL ethanol. The factors influencing the complex formation and extraction by DLLME-SFO method were optimized. Under the optimized conditions: 110 μL , 0.5 mL and 1 mL of extraction solvent (chloroform), disperser solvent (ethanol) and sample volume, respectively, an enrichment factor of 94.4, a detection limit (based on 3Sb/m) of 0.14 $\mu\text{g L}^{-1}$ and a relative standard deviation of 0.32% (at 200 $\mu\text{g L}^{-1}$) were obtained. The calibration graph using the preconcentration system for vanadium was linear from 0.5 to 200 $\mu\text{g L}^{-1}$ with a correlation coefficient of 0.98. The method was successfully applied for the determination of vanadium in shaft water, lettuce, almond and parsley.



Semnan University

Faculty of Science

Chemistry Department

Master of Science

Subject

**Determination and preconcentration of cations (Mn& Ni and V) in
water and food samples with dispersive liquid-liquid
microextraction (DLLME) method**

by

SeyedeMozhganBehgozin

Supervisor

AlirezaAsghari

FarzanehShemirani

Advisor:

S.HassanZavarMousavi

تقدیم به پیشگاه مقدس عمه سادات....

حضرت رقیه بنت حسین (ع)

که اگر توسل به آستان مبارکش نبود امکان ادامه این مسیر برایم غیر ممکن بود...

تقدیم به...

یگانه تکیه گاه های زندگی ام....

خانواده ام بخصوص، مادرم که همیشه دعاهایش پشتوانه زندگی ام است.

و همسر مجتبی که همیشه تکیه گاهی برایم بوده و اگر زحماتش نبود امکان دفاع نیز برایم ممکن

نبود...باشد که جبرانش کنم.

باسپاس...

این پایان نامه زیر نظر اساتید محترم سرکار خانم دکتر فرزانه شمیرانی و جناب آقای دکتر علیرضا اصغری به انجام رسیده است. در اینجا لازم میدانم از زحمات بسیار خانم دکتر شمیرانی تشکر نمایم چرا که ایشان من آموختند در این راه از پانزدهمین و با همه سختی های بسیارش ادامه دهم. هر وقت که به بن بست می خوردم تنها کلام ایشان بود که به من امید می بخشید و راهی پیش رویم باز میکرد. امیدوارم بتوانم زحمات ایشان و دکتر اصغری را با ادامه دادن راه علم و دانش جبران نمایم.

از راهنمایی های جناب آقای دکتر سید رضا یوسفی در انجام این پایان نامه استفاده فراوان برده ام و در اینجا از ایشان سپاس گزاری میکنم.

جناب آقای دکتر موسوی استاد خوبم در کلاسهای شما من درسهای بسیاری آموختم و از راهنمایی های شما سود بسیار بردم در اینجا به خاطر زحماتتان و تمامی امیدواری دادنتان تشکر می کنم.

از زحمات سرکار خانم دکتر رجبی و جناب آقای دکتر فضلای که زحمت داوری این پایان نامه را کشیده اند و درسهای بسیاری در کلاسهایشان آموخته ام نیز سپاس گزاری می کنم.

جناب آقای دکتر به نژاد، بهترین معلم و استادم در همه این سالها، شما نه تنها مرا همیشه تشویق نمودید بلکه راهنماییهای شما در درس و زندگی اگر نبود قادر به ادامه این مسیر نبودم مراتب قدردانی و سپاس خود را نسبت به شما ابراز می نمایم.

جناب آقای دکتر مهدوی، بهترین مشاور و استادم که همیشه بهترین راهنمایی ها را به من نمودید، مراتب قدردانی و سپاس خود را نسبت به شما ابراز می نمایم.

در خاتمه بر خود وظیفه می دانم از همه دوستانم در دانشگاه تهران آقای مجیدی، آقای خانی و خانم ماه پشانیان که در به ثمر رسیدن این پایان نامه کمک نموده اند، تشکر و قدردانی نمایم.

فهرست مندرجات

۱	تئوری	۱
۱-۱	میکرو استخراج مایع-مایع پخشی	۱
۱-۱-۱	روابط تئوری میکرو استخراج مایع-مایع پخشی	۳
۱-۱-۱-۱	مزایای روش میکرو استخراج مایع-مایع پخشی	۵
۱-۱-۱-۲	محدودیت های روش میکرو استخراج مایع-مایع پخشی	۵
۱-۱-۱-۳	اصول DLLME	۵
۱-۱-۱-۴	اثر حلال در اسپکتروسکوپی جذب اتمی شعله ای	۷
۱-۲	نیکل، کاربردها و روشهای اندازه گیری	۸
۱-۲-۱	مشخصات نیکل	۸

ب

فهرست مندرجات

- ۱-۲-۲- محل کشف و پیدایش ۸
- ۱-۲-۳- کاربردهای نیکل ۹
- ۱-۲-۴- خواص نیکل ۹
- ۱-۲-۵- روش های اندازه گیری نیکل ۱۰
- ۱-۳-۳- منگنز، کاربردها و روشهای اندازه گیری ۱۱
- ۱-۳-۱- تاریخچه منگنز ۱۱
- ۱-۳-۲- مشخصات منگنز ۱۱
- ۱-۳-۳- تاثیرات منگنز بر انسان ۱۲
- ۱-۳-۴- تاثیرات منگنز بر گیاهان ۱۲
- ۱-۳-۵- کاربردهای منگنز ۱۳
- ۱-۳-۶- روش های اندازه گیری منگنز ۱۳
- ۱-۴-۴- وانادیوم، کاربردها و روشهای اندازه گیری ۱۳
- ۱-۴-۱- تاریخچه ۱۳
- ۱-۴-۲- پیدایش ۱۴
- ۱-۴-۳- خواص فیزیکی و شیمیایی ۱۴
- ۱-۴-۴- ایزوتوپ ها ۱۵
- ۱-۴-۵- اثرات وانادیوم بر سلامتی انسان ۱۵
- ۱-۴-۶- کاربردها ۱۶
- ۱-۴-۷- روش های اندازه گیری وانادیوم ۱۶

۱۸.....	۲ بخش عملی
۱۸.....	۱-۲- مواد و دستگاه های مورد نیاز
۱۸.....	۱-۱-۲- تهیه محلول ها و استانداردها
۱۹.....	۲-۱-۲- دستگاه ها
۱۹.....	۳-۱-۲- روش کار میکرو استخراج مایع-مایع پخشی برای منگنز و نیکل
۲۰.....	۴-۱-۲- بررسی عوامل موثر بر استخراج
۲۰.....	۱-۴-۱-۲- بررسی اثر pH
۲۱.....	۲-۴-۱-۲- بررسی اثر غلظت لیگاند
۲۲.....	۳-۴-۱-۲- بررسی اثر نوع و حجم حلال استخراج کننده
۲۳.....	۴-۴-۱-۲- بررسی اثر نوع و حجم حلال پخش کننده
۲۴.....	۵-۴-۱-۲- اثر افزایش نمک
۲۴.....	۶-۴-۱-۲- اثر زمان استخراج و سرعت سانتریفیوژ
۲۴.....	۷-۴-۱-۲- بررسی مزاحمتها
۲۶.....	۸-۴-۱-۲- ارقام شایستگی روش
۲۷.....	۹-۴-۱-۲- آنالیز نمونه های حقیقی
۲۸.....	۱۰-۴-۱-۲- مقایسه روش ارائه شده با سایر روش های جداسازی منگنز و نیکل
۳۰.....	۱۱-۴-۱-۲- نتیجه گیری
۳۱.....	۲-۲- روش کار میکرو استخراج مایع-مایع پخشی برای اندازه گیری وانادیوم

۳۱.....	۱-۲-۲- بررسی عوامل موثر بر استخراج
۳۱.....	۱-۱-۲-۲- بررسی اثر pH
۳۲.....	۲-۱-۲-۲- بررسی اثر غلظت لیگاند
۳۳.....	۳-۲-۲-۲- بررسی اثر نوع و حجم حلال استخراج کننده
۳۴.....	۴-۲-۲-۲- بررسی اثر نوع و حجم حلال پخش کننده
۳۵.....	۵-۲-۲-۲- اثر افزایش نمک
۳۶.....	۶-۲-۲-۲- بررسی مزاحمت ها
۳۷.....	۷-۲-۲-۲- ارقام شایستگی روش
۳۸.....	۸-۲-۲-۲- آنالیز نمونه های حقیقی
۳۹.....	۹-۲-۲-۲- مقایسه روش ارائه شده با سایر روشهای جداسازی وانادیوم
۴۱.....	۱۰-۲-۲-۲- نتیجه گیری
۴۱.....	۳-۲- ارائه پیشنهادات جدید

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱- مراحل استخراج در DLLME ۶
- شکل ۱-۲- اثر pH بر میزان استخراج منگنز و نیکل ۲۰
- شکل ۲-۲- اثر غلظت ۱- (۲-پیریدیلازو)۲-نفتول بر استخراج منگنز و نیکل ۲۱
- شکل ۳-۲- اثر حجم حلال استخراج کننده بر استخراج منگنز و نیکل ۲۲
- شکل ۴-۲- اثر حجم حلال پخش کننده بر استخراج منگنز و نیکل ۲۳
- شکل ۵-۲- اثر pH بر جذب $V(v): 250 \mu\text{g L}^{-1}$ ۳۲
- شکل ۶-۲- اثر غلظت لیگاند بر جذب $V(v): 250 \mu\text{g L}^{-1}$ ۳۳
- شکل ۷-۲- اثر حلال استخراج کننده بر جذب $V(v): 250 \mu\text{g L}^{-1}$ ۳۴
- شکل ۸-۲- اثر حلال پخش کننده بر جذب $V(v): 250 \mu\text{g L}^{-1}$ ۳۵
- شکل ۹-۲- اثر افزایش نمک بر جذب $V(v): 250 \mu\text{g L}^{-1}$ ۳۵

فهرست جداول

- جدول ۱-۱- روش جداسازی وپیش تغلیظ ترکیبات الی و غیر آلی با استخراج مایع-مایع پخشی ۲
- جدول ۱-۲- اثر مزاحمت یونها در پیش تغلیظ Ni و Mn ۲۵
- جدول ۲-۲- برخی پارامترهای تجزیه ای در اندازه گیری منگنز و نیکل ۲۷
- جدول ۳-۲- استخراج و اندازه گیری منگنز و نیکل در نمونه های غذایی ۲۸
- جدول ۴-۲- مقایسه روش میکرو استخراج مایع-مایع پخشی با سایر روش های استخراجی منگنز و نیکل ۲۹
- جدول ۵-۲- اثر مزاحمت یونها در پیش تغلیظ وانادیوم ۳۶
- جدول ۶-۲- برخی پارامترهای تجزیه ای در اندازه گیری وانادیوم ۳۸
- جدول ۷-۲- استخراج و اندازه گیری وانادیوم در نمونه های غذایی ۳۹
- جدول ۸-۲- مقایسه روش میکرو استخراج مایع-مایع پخشی با سایر روش های استخراجی وانادیوم ۴۰

۱-۱- میکرو استخراج مایع-مایع پخشی (DLLME)

میکرو استخراج مایع-مایع پخشی یک روش جدیدی از جداسازی و پیش تغلیظ می باشد که اولین بار توسط آقای دکتر یعقوب اسدی در دانشگاه علم و صنعت ایران ارائه شد. این روش زیر مجموعه ای از استخراج مایع-مایع معمولی است؛ اما در این روش سطح تماس مولکولهای آب و حلال آلی استخراج کننده به میزان زیادی افزایش یافته و همین سبب کاهش زمان استخراج گونه مورد نظر می شود. در این روش گونه مورد نظر یا آب گریز است و یا با روش های کمپلکس کردن و یا مشتق سازی آب گریز می شود. در این روش سه جزء حلال آبی، حلال آلی استخراج کننده و حلال آلی پخش کننده به گونه ای با هم مخلوط می شوند که حلال آلی استخراج کننده به صورت قطرات بسیار ریز در حلال آبی پخش می شود. در این روش، میزان ضرایب توزیع آنالیت ها در حضور حلال پخش کننده متفاوت از ضرایب توزیع بین دو حلال آلی و آب درغیاب حلال پخش کننده است؛ پس محیطی جدید برای توزیع آنالیت ها ایجاد می شود. در این روش ابتدا یک محلول همگن از حلال آلی استخراج کننده و حلال آلی پخش کننده با نسبت معینی تهیه می شود؛ (در مواردی که آنالیت آبدوست است باید عامل کمپلکس کننده و یا مشتق ساز هم به این محلول همگن افزوده شود) و سپس مقدار مشخصی از این محلول به کمک یک سرنگ سریعاً به درون محلول آبی حاوی آنالیت تزریق می گردد. در نتیجه، به دلیل پخش شدن ذرات ریز حلال استخراج کننده در درون محلول آبی، محلول کدر (ابری) می شود. در مرحله پایانی این مخلوط سانتریفیوژ شده و ذرات ریز حلال استخراج کننده که دانسیته بیشتری از آب دارند، ته نشین می شوند. سپس فاز ته نشین شده که حاوی آنالیت استخراج شده است، با روش های دستگاهی مانند GC، GC-MS، HPLC، FAAS، ETAAS و..... آنالیز می شود. این روش تا کنون جهت جداسازی و اندازه گیری ترکیبات آلی و معدنی مختلفی به کار رفته است، زیرا به دلیل مصرف کم حلال آلی استخراج کننده در این روش

فاکتور تغلیظ یا افزایشی بالا است. از طرفی آماده سازی نمونه با این روش بر خلاف روش های قبلی به کمتر از چند دقیقه زمان نیاز دارد. در جدول ۱-۱ تعدادی از کارهای تحقیقاتی که از این روش جهت جداسازی و پیش تغلیظ استفاده کرده اند، جمع آوری شده است.

جدول ۱-۱- روش جداسازی و پیش تغلیظ ترکیبات آلی و غیر آلی با استخراج مایع-مایع بخشی								
Analyte	Extraction solvent	Disperser solvent	Chelating agent	Analytical technique	EF ¹	LOD ² ($\mu\text{g L}^{-1}$)	RSD ³ %	Ref
Pd Co	dichlorobenzene	ethanol	PAN ⁴	FO-LADS ⁵	۱۶۲, ۱۶۵	۰/۲۵ ۰/۲۰	<۴	(۱)
CBS ⁶	chlorobenzene	acetone	-	GC-ECD	۷۱۱ to ۸۱۳	۰/۰۰۰۵ to ۰/۰۰۵	۰/۵۲ to ۲/۸	(۲)
CPS ⁷	chlorobenzene	acetone	acetic anhydride	GC-ECD	۲۸۷ to ۹۰۶	۰/۰۱۰ to ۲/۰	۰/۶ to ۴/۷	(۳)
Phenols	carbon tetrachloride	acetone	-	GC-MS	-	۲۸, ۴۴	۳/۸, ۲/۷	(۴)
Cd	carbon tetrachloride	methanol	APDC	GF-AAS	۱۲۵	۰/۰۰۰۶	۳/۵	(۵)
OPs ⁸	trichloroethane	acetone	-	GC-NPD	۱۹۰, ۸۳۰	۰/۰۱, ۰/۰۰۸	۱۰	(۶)
OPPs ⁹	chlorobenzene	acetone	-	GC-FPD	۷۸۹ to ۱۰۷۰	۰/۰۰۳ to ۰/۰۰۲۰	۱/۲ to ۵/۶	(۷)
Co, Ni	carbon tetrachloride	acetone	PAN	GF-AAS	۱۰۱, ۲۰۰	۰/۰۰۲۱, ۰/۰۰۳۳	۷/۵, ۸/۲	(۸)

¹ Enhancement factor

² Detection of limit

³ Relative standard deviation (RSD)

⁴ 1-(2-pyridylazo)-2-naphtol

⁵ Fiber optic-linear array detection spectrophotometry (FO-LADS)

⁶ Chlorobenzenes (CBs)

⁷ Chlorophenols (CPS)

⁸ Organo phosphorus compounds (OPs)

⁹ Organophosphorus pesticides (OPPs)

۱-۱-۱- روابط تئوری میکرو استخراج مایع-مایع پخشی

مقدار آنالیت استخراج شده در فاز ته نشین شده n_{sed} را می توان از روابط ریاضی استخراج مایع-مایع بدست آورد.

$$n_{tot} = n_{sed} + n_{aq} \quad 1-1$$

$$n_{sed} = C_0 \times V_{aq} - C_{aq} \times V_{aq} \quad 2-1$$

ضریب توزیع به صورت غلظت آنالیت استخراج شده به غلظت آنالیت در فاز آبی پس از تعادل می باشد:

$$n_{sed} = \frac{C \times V_{aq} - C_{sed}}{K_D \times V_{aq}} \quad 3-1$$

با جایگذاری رابطه (۴-۱) در (۳-۱)، رابطه (۵-۱) بدست می آید:

$$C_{sed} = \frac{n_{sed}}{V_{sed}}$$

$$n_{sed} = C_0 \times V_{aq} - \frac{n_{sed}}{V_{sed}} \times K_D \times V_{aq} \quad 5-1$$

$$n_{sed} = \frac{C_0 \times V_{aq}}{1 + \frac{V_{aq}}{V_{sed}} \times K_D} \quad 6-1$$

$$n_{sed} = K_D \times V_{sed} \times C_0 \times V_{aq} / V_{aq} + K_D \times V_{sed} \quad 7-1$$

n_{tot} = مقدار کل آنالیت در نمونه

n_{sed} = مقدار آنالیت در فاز ته نشین شده

n_{aq} = مقدار آنالیت در فاز آبی پس از تعادل

K_D = ضریب توزیع آنالیت بین فاز ته نشین شده و محلول نمونه