

## Opinion

V. M. Buznik

**Russian Science Requires a Combination of Theory and Practice** 94

## Laboratory Accreditation

V. I. Sheveleva

**How does the Accreditation Body Work?** 100

The article discusses the process of accreditation of conformity assessment bodies using the example of the activities of the accreditation body AAC Analitica. All stages of the accreditation process are considered in a comprehensive manner, which allows us to get the clearest possible picture of the functioning of the accreditation body, even for those readers who have never encountered it before. The article also provides explanations on fundamental issues related to the functioning of international accreditation organizations and accreditation activities as such.

**Keywords:** accreditation, accreditation body, conformity assessment

## Analytical Methods and Instruments

O. V. Shestak, M. A. Gorbachev

**Analytics without Compromise** 108

Since 2015, the EnProTech company has been providing comprehensive equipment for analytical, environmental, research, technological laboratories and quality control departments. Since its founding, the company's clients and partners have included representatives from the mining, oil and gas, pharmaceutical, agricultural and food industries. The supplied equipment and integrated solutions are successfully used by leading enterprises in their sectors. The priority direction of the EnProTech is gold mining and assay and analytical laboratories, which make an undeniable contribution to ensuring maximum extraction of the precious metal from ore. The article focuses on EnProTech's approach to equipping assay laboratories, which, however, does not exclude readiness to expand cooperation in other areas.

**Keywords:** assay laboratories, sample preparation, fusion furnaces, analytical balances, atomic absorption spectrometer, elemental analysis, laboratory equipment

V. Orlovsky, A. Kuchkin

**Chromatography is not Just a Chromatograph! About the Importance of a Chromatography Column** 114

The authors argue that the choice of a chromatograph as a tool for solving a chromatographic problem is not as important as the choice of a column on which the mixture will be separated.

The option of using columns with mixed phase is considered as the most interesting for the development of methods for separating complex mixtures, for example, including substances with different physicochemical properties.

**Keywords:** chromatography, column, laboratory, mixed phase

## Мнение

В. М. Бузник

**Для российской науки необходимо сочетание теории и практики**

## Аккредитация лабораторий

В. И. Шевелева

**Как устроена работа органа по аккредитации?**

В статье рассматривается процесс аккредитации органов по оценке соответствия на примере деятельности органа по аккредитации ААЦ «Аналитика». Все этапы процесса аккредитации рассматриваются разносторонне, что позволяет составить максимально четкое представление о функционировании органа по аккредитации даже тем читателям, которые никогда ранее с ним не сталкивались. Также в статье даются разъяснения по основополагающим вопросам, связанным с функционированием международных организаций по аккредитации и деятельностью по аккредитации как таковой.

**Ключевые слова:** аккредитация, орган по аккредитации, оценка соответствия

## Аналитические методы и приборы

О. В. Шестак, М. А. Горбачев

**Аналитика без компромиссов**

Компания «ИнПроТех» с 2015 года занимается комплексным оснащением лабораторий: аналитических, экологических, исследовательских, технологических и ОТК. С момента основания клиентами и партнерами компании стали представители горнодобывающей, нефтегазовой, фармацевтической, аграрной и пищевой отраслей промышленности. Поставляемое оборудование и комплексные решения успешно применяются ведущими в своих секторах предприятиями. Приоритетным направлением компании «ИнПроТех» является золотодобыча и пробирно-аналитические лаборатории (ПАЛ), которые вносят неоспоримый вклад в обеспечение максимального извлечения благородного металла из руды. В статье основное внимание уделено подходу «ИнПроТех» к оснащению ПАЛ, что, однако, не исключает готовности расширять взаимодействие по другим направлениям.

**Ключевые слова:** пробирно-аналитические лаборатории, пробоподготовка, плавильные печи, аналитические весы, атомно-абсорбционный спектрометр, элементный анализ, лабораторное оборудование

А. М. Кучкин, В. В. Орловский

**Хроматография – это не только хроматограф! О важности хроматографической колонки**

Авторы рассуждают о том, что выбор хроматографа как инструмента решения хроматографической задачи не так важен, как выбор колонки, на которой будет происходить разделение смеси. Рассмотрен вариант применения колонок со «смешанной фазой» как наиболее интересный для разработки методик разделения сложных смесей, например, включающих в себя вещества с разными физико-химическими свойствами.

**Ключевые слова:** хроматография, колонка, лаборатория, смешанная фаза

### АНАЛИТИКА®

Перегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи и массовых коммуникаций 7 сентября 2017 г., ПИ № ФС77-70983

Журнал издается с 2011 года 6 раз в год.

#### Журнал включен

в Российский индекс научного цитирования (РИНЦ), в Перечень рецензируемых научных изданий ВАК 18.03.2016.

На сайте Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU доступны полные тексты статей. Статьи из номеров журнала текущего года предоставляются на платной основе.

### Учредитель – АО «РИЦ «ТЕХНОСФЕРА»

#### Генеральный директор:

О. А. Казанцева

#### Главный редактор:

В. Б. Барановская

#### Заместитель главного редактора:

В. В. Родченкова

#### Научный редактор:

М. С. Дороница

#### Корректор:

А. В. Лужкова

#### Компьютерная верстка:

А. А. Небольсин

#### Руководитель проекта:

О. А. Лаврентьева, j-analytics@mail.ru

#### Ответственный секретарь:

Э. А. Газина, journal@electronics.ru

#### Сбыт и подписка:

А. А. Метлов, sales@technosphera.ru

Е. В. Зайкова, magazine@technosphera.ru

Тираж 4 500 экз. Цена договорная.

Сдано в печать 05.04.2024, заказ № 240755.

© При перепечатке ссылка

на журнал «АНАЛИТИКА» обязательна.

Мнение редакции не всегда совпадает с точкой зрения авторов статей.

Рукописи рецензируются, но не возвращаются. Срок рассмотрения рукописей – 6 недель.

За содержание рекламных материалов редакция ответственности не несет.

Отпечатано в соответствии с предоставленными материалами в ООО «Юнион Принт», г. Н. Новгород, ул. Окский съезд, д. 2

### АО «РИЦ «ТЕХНОСФЕРА»

#### Адрес редакции:

Москва, ул. Краснопролетарская, д. 16, стр. 2

Тел.: +7 495 234-01-10

Факс: +7 495 956-33-46

journal@electronics.ru

#### Для писем:

125319, Москва, а/я 91

www.j-analytics.ru

elibrary.ru

www.e.lanbook.ru

**A New Attachment to the FT-801 IR Fourier Spectrometer from SIMEX for Headspace Analysis of Liquids with Sample Heating up to 220 °C** 118

The design of the attachment for headspace analysis of liquids for the FT-801 Fourier transform infrared spectrometer is described in detail. The advantages of headspace analysis of liquids are emphasized, which make it possible to identify impurities in a solution with a concentration of less than 1%. Sharp, narrow, well-resolved lines of individual components of a vapor mixture make it possible to easily determine its individual components, which is impossible in liquid cells due to the broadening of spectral lines due to strong intermolecular interactions. Additional capabilities and the purpose of the new attachment to spectrometers that have long proven themselves to be the best are noted.

**Keywords:** Fourier transform infrared spectrometer, headspace analysis, condensed matter, absorption, optical density, cuvette

**Chromatographic Complex for Helium Analysis** 124

Issues related to the extraction and purification of inert helium gas from impurities are discussed. A brief historical background of the discovery of helium is given. The areas of application are listed, and the increased need of various industries for highly purified helium is noted. Modern automated installations are needed to control the quality of extracted helium. The design of a chromatographic complex for determining helium purity is described. All components of the complex, which operates under software control, are considered and a diagram of its operation is provided. Particular attention is paid to sample preparation: for the preparation of helium samples, the chromatographic complex includes a cryoconcentration unit operating in automatic mode under the control of a specialized program installed on a PC.

**Keywords:** chromatographic complex, column, cryoconcentration unit, sample preparation, software

**Новая приставка к ИК-фурье-спектрометру ФТ-801 фирмы «СИМЕКС» для парового анализа жидкостей с нагревом пробы до 220 °C** 118

Подробно описана конструкция приставки для парового анализа жидкостей к ИК-фурье-спектрометру ФТ-801. Подчеркнуты преимущества парового анализа жидкостей, которые позволяют выявить в растворе примесь с концентрацией менее 1%. Острые, узкие, хорошо разрешенные линии отдельных компонентов паровой смеси дают возможность без труда определить ее отдельные компоненты, что невозможно в жидкостных кюветках из-за уширения спектральных линий вследствие сильных межмолекулярных взаимодействий. Отмечены дополнительные возможности и назначение новой приставки к давно зарекомендовавшим себя с самой лучшей стороны ИК-фурье-спектрометрам.

**Ключевые слова:** ИК-фурье-спектрометр, паровый анализ, конденсированная среда, поглощение, оптическая плотность, кювета

**Хроматографический комплекс для анализа гелия** 124

Обсуждаются вопросы, связанные с добычей и очисткой от примесей инертного газа гелия. Приведена краткая историческая справка открытия гелия. Перечислены области применения, отмечена возросшая потребность различных отраслей в гелии высокой степени очистки. Для контроля качества добытого гелия необходимы современные автоматизированные установки. Описана конструкция хроматографического комплекса по определению чистоты гелия. Рассмотрены все компоненты комплекса, который работает под управлением программного обеспечения, приведена диаграмма его работы. Особое внимание уделено пробоподготовке: для подготовки проб гелия в состав хроматографического комплекса входит установка криоконцентрирования, работающая в автоматическом режиме под управлением специализированной программы, установленной на ПК.

**Ключевые слова:** хроматографический комплекс, хроматографическая колонка, установка криоконцентрирования, пробоподготовка, программное обеспечение

**News** 132, 179

**Новости**

**Efficient Solutions**  
P. A. Savkin  
**We Choose the Best for our Clients** 138

**Эффективные решения**  
П. А. Савкин  
**Для своих клиентов мы выбираем лучшее**

**Advanced Instrument Solutions From Energolab** 140

**Передовые инструментальные решения от компании «Энерголаб»**

**Редакционный совет**

**БАРАНОВСКАЯ** Василиса Борисовна  
доктор химических наук,  
Институт общей и неорганической химии  
им. Н. С. Курнакова РАН,  
председатель ред. совета

**ГРИГОРОВИЧ** Константин Всеволодович  
доктор технических наук, академик РАН,  
Институт металлургии и материаловедения  
им. А. А. Байкова РАН

**АПЯРИ** Владимир Владимирович  
доктор химических наук, Химический  
факультет МГУ им. М. В. Ломоносова

**БОЛДЫРЕВ** Иван Владимирович  
исполнительный директор Ассоциации  
аналитических центров «Аналитика»

**ГАЛСТЯН** Арам Генрихович  
доктор технических наук, профессор РАН,  
член-корреспондент РАН, ВНИИПБиВП

**ДВОРКИН** Владимир Ильич  
доктор химических наук, Инсти-  
тут нефтехимического синтеза  
им. А. В. Топчиева РАН

**ИСТОМИНА** Наталья Леонидовна  
доктор физико-математических наук,  
начальник отдела – заместитель  
академика-секретаря отделения  
физических наук РАН

**КАРЦОВА** Людмила Алексеевна  
доктор химических наук, профессор,  
Институт химии Санкт-Петербургского  
государственного университета

**КУЦЕВА** Надежда Константиновна  
кандидат химических наук,  
Аналитический центр ЗАО «Роса»

**МАРЮТИНА** Татьяна Анатольевна  
доктор химических наук, заведую-  
щая лабораторией концентрирования  
Института геохимии и аналитической химии  
им. В. И. Вернадского РАН

**МИЛЬМАН** Борис Львович  
доктор химических наук,  
ФГБУ «Научно-клинический центр  
токсикологии им. акад. С. Н. Голикова»  
ФМБА РФ

**НОВИКОВ** Евгений Анатольевич  
кандидат химических наук,  
генеральный директор ООО «СокТрейд»

**ПЕРМИНОВА** Ирина Васильевна  
доктор химических наук,  
профессор, Химический факультет  
МГУ им. М. В. Ломоносова

**САДИКОВ** Илхам Исмаилович  
доктор технических наук, действительный  
член АН Узбекистана, директор Института  
ядерной физики АН Узбекистана

**САНЖАРОВА** Наталья Ивановна  
доктор биологических наук, профессор,  
член-корреспондент РАН,  
директор ВНИИРАЭ

**УСТЫНЮК** Юрий Александрович  
доктор химических наук, профессор,  
главный научный сотрудник,  
МГУ им. М. В. Ломоносова

**ФИЛИППОВ** Михаил Николаевич  
доктор физико-математических наук, про-  
фессор, заведующий лабораторией химиче-  
ского анализа Института общей и неоргани-  
ческой химии им. Н. С. Курнакова РАН

**ХАМИЗОВ** Руслан Хажсетович  
доктор химических наук,  
член-корреспондент РАН,  
Институт геохимии и аналитической химии  
им. В. И. Вернадского РАН

## **Analytics of Substances and Materials**

Е. П. Векхтер, И. К. Горкина, О. Н. Новикова, В. А. Антонов, И. К. Журкович

### **Modern Approaches to Measuring the Mass Concentration of 1,1-Dimethylhydrazine in Water Using Chromatographic Methods** 144

This review discusses the advantages and disadvantages of chromatographic approaches proposed in the scientific literature for the determination of 1,1-dimethylhydrazine (UDMH) in water with the aim of providing information that can be useful in the development of highly sensitive methods for measuring the mass concentration of UDMH in water bodies at levels corresponding to current hygienic standards. The use of methods of high-performance liquid chromatography – tandem mass spectrometry with pre-column derivatization of the analyte can be considered promising. There are few official methods for quantitative determination of NDMH in aqueous samples that meet the necessary metrological requirements.

**Keywords:** 1,1-dimethylhydrazine, analysis, water, ion chromatography, derivatization, gas chromatography, HPLC, tandem mass spectrometry

А. В. Саакян, А. Д. Левин

### **Software for Spectral Data Processing by Chemometrics and Machine Learning Methods** 154

The article describes a software package that supports the basic methods of chemometrics, and machine learning used for spectral data processing. The package can be used both as part of the software for analytical spectral instruments or independently. The package contains both common methods (linear and quadratic discriminant analysis, principal component regression, and partial least squares), as well as lesser known but proven effective in processing spectra, including the random forest method and extreme gradient boosting. Data on the testing of the program are provided, incl. an example of using the developed software package to solve problems of classifying black carbon particles according to the initial combustion objects.

**Keywords:** fluorescence, Raman scattering, spectra, chemometrics, machine learning, spectroscopy, photometry, classification, regression, software

Т. П. Столбоушкина, А. А. Стахеев

### **Determination of Zinc, Copper, Cadmium and Lead in Beef Liver** 162

The results of measurements of the mass fraction of zinc, copper, cadmium and lead using inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) and inductively coupled plasma optical emission spectroscopy (ICP-OES) in bovine liver samples are presented. Optimal spectrometer parameters for measurements and conditions for sample preparation in a microwave digestion system, as well as a method for preparing laboratory plasticware, were selected. The analytical method was validated by measuring detection limit, limit of quantitation, linearity, precision, and relative bias of the data. The results obtained were compared with certified values and the relative error was assessed. Both methods have been shown to be reliable and can be used to determine the elemental content of bovine liver samples.

**Keywords:** ICP-MS, ICP-OES, mass spectrometric analysis, toxic metal, macro- and microanalysis of metals, microwave sample preparation

К. А. Докукина, А. Н. Конюков, В. С. Шешуков, О. И. Окина, К. В. Ван

### **Integrated Geochronological and Geochemical Studies of a Probably Impact Zircon Older than 2.8 Ga in Rocks of the Belomorian Eclogite Province** 168

Using laser ablation with inductively coupled plasma, U-Th-Pb isotope dating of igneous and metamorphic zircons extracted from aegirine-bearing gneisses in the Gridino melange of the Belomorian eclogite province was carried out. Igneous cores with an age of 2.89–2.83 Ga date

## **Аналитика веществ и материалов**

Е. П. Векхтер, И. К. Горкина, О. Н. Новикова, В. А. Антонов, И. К. Журкович

### **Современные подходы к измерениям массовой концентрации 1,1-диметилгидразина в воде хроматографическими методами** 144

Обсуждаются преимущества и недостатки предлагаемых в научной литературе хроматографических подходов к определению 1,1-диметилгидразина (НДМГ) в воде хозяйственно-питьевого и культурно-бытового назначения. Сравнительный анализ и выбор оптимальных решений полезен при разработке высокочувствительных методик измерений массовой концентрации НДМГ в водных объектах на уровнях, соответствующих действующим гигиеническим нормативам. Можно считать перспективным использование методов высокочувствительной жидкостной хроматографии – тандемной масс-спектрометрии с предколоночной дериватизацией аналита. Отмечается недостаточное число официальных методик количественного определения НДМГ в водных образцах, удовлетворяющих необходимым метрологическим требованиям.

**Ключевые слова:** 1,1-диметилгидразин, анализ, вода, ионная хроматография, дериватизация, газовая хроматография, ВЭЖХ, тандемная масс-спектрометрия

А. В. Саакян, А. Д. Левин

### **Программное обеспечение для обработки спектральных данных методами хеометрики и машинного обучения** 154

В статье описан программный пакет, поддерживающий основные методы хеометрики и машинного обучения, используемые для обработки спектральных данных. Он может использоваться как в составе программного обеспечения аналитических спектральных приборов, так и автономно. Пакет содержит как распространенные методы (линейный и квадратичный дискриминантный анализ, регрессия на главные компоненты, метод частичных наименьших квадратов), так и менее известные, но доказавшие свою эффективность при обработке спектров, в том числе метод случайного леса и экстремальный градиентный бустинг. Приводятся данные об апробации программного обеспечения на примере его использования для решения задач классификации частиц черного углерода по исходным объектам горения.

**Ключевые слова:** флуоресценция, комбинационное (рамановское) рассеяние, спектр, хеометрика, машинное обучение, спектроскопия, фотометрия, классификация, регрессия, программное обеспечение

Т. П. Столбоушкина, А. А. Стахеев

### **Определение цинка, меди, кадмия и свинца в говяжьей печени** 162

Приведены результаты измерений массовой доли цинка, меди, кадмия и свинца методами масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-МС) и оптико-эмиссионной спектроскопии с индуктивно связанной плазмой (ИСП-ОЭС) в образцах бычьей печени. Подобраны оптимальные для измерений параметры спектрометров и условия для проведения пробоподготовки образцов в системе микроволнового разложения проб, а также способ подготовки лабораторной пластиковой посуды. Аналитический метод валидирован путем измерений предела обнаружения, предела количественного определения, линейности, точности и относительного смещения данных. Полученные результаты сравнивали с сертифицированными значениями и оценивали относительную погрешность. Показано, что оба метода надежны и могут использоваться для определения содержания элементов в образцах бычьей печени.

**Ключевые слова:** ИСП-МС, ИСП-ОЭС, масс-спектрометрический анализ, токсичный металл, макро- и микроанализ металлов, микроволновая пробоподготовка

К. А. Докукина, А. Н. Конюков, В. С. Шешуков, О. И. Окина, К. В. Ван

### **Комплексные геохронологические и геохимические исследования предположительно импактного циркона древнее 2,8 млрд лет в породах Беломорской эклогитовой провинции** 168

Методом лазерной абляции с индуктивно связанной плазмой было проведено U-Th-Pb изотопное датирование магматических и метаморфических цирконов, извлеченных из

## **Научные специальности, по которым издание входит в список ВАК**

1.4.2. Аналитическая химия (химические науки)

2.2.4. Приборы и методы измерения (по видам измерений) (технические науки)

2.2.6. Оптические и оптико-электронные приборы и комплексы (технические науки)

2.2.8. Методы и приборы контроля и диагностики материалов, изделий, веществ и природной среды (технические науки)