

# مطالعه پراکندگی نمونه‌های خاکی منطقه بهاباد توسط تجزیه با استفاده از روش‌های ژئوکومتریکس با روش‌های ICP - MS و ICP - OES

سمیه ویسه<sup>۱</sup>، علی نیازی<sup>۲</sup> و جهانبخش قاسمی<sup>۲</sup>

دکتر، گروه شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد اراک، اراک، ایران  
استاد، گروه شیمی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۴/۱۱/۱۹ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۰۲/۱۹

## چکیده

در این پژوهش پراکندگی و تأثیر عناصر در نمونه‌های خاکی منطقه بهاباد استان یزد بر پایه تجزیه عناصر مختلف توسط روش‌های ICP-MS، ICP-OES و AF با روش‌های مختلف ژئوکومتریکس ارائه شده است. برای این منظور ۱۵۶ نمونه خاکی در مناطق بهاباد، آسفنج، بنستان انتخاب، نمونه‌برداری و پس از آماده‌سازی‌های لازم تجزیه شد. برای مطالعه پراکندگی نمونه‌های خاکی در این منطقه و همچنین بررسی عناصر مؤثر در این پراکندگی نمونه‌های خاکی مطالعه در ۳ بخش انجام شده است که شامل بررسی بر پایه مقادیر عناصر پایه (Zn, Cu, Sn, Ni, Co, W, Fe, Pb) و عناصر سنگین (Cd, Hg, As, Cr, B) و همچنین بر پایه اورانیم و توریم است. برای بررسی پراکندگی نمونه‌های خاکی از روش‌های ژئوکومتریکس که به عنوان کاربرد روش‌های کامپیوتری، آماری، ریاضی و گرافیکی برای درک بهتر داده‌های علوم زمین تعریف شده است، استفاده شد. به همین منظور از روش تجزیه گونه‌های اصلی (PCA) که یک روش فاکتور آنالیز است برای بررسی پراکندگی و تأثیر عناصر در این نمونه‌ها استفاده شده است؛ گفتنی است که از مهم‌ترین خروجی‌های الگوریتم PCA، مقادیر Score و Loading نمودار Biplot است که با استفاده از این خروجی‌ها می‌توان تفسیرهای مناسبی در داده‌های گردآوری شده داشت. همچنین از روش رده‌بندی نزدیک‌ترین همسایه (KNN) برای رده‌بندی و به دست آوردن همبستگی میان عناصر موجود در این مطالعه استفاده شده است. از نتایج به دست آمده در این مطالعه می‌توان در مباحثی همانند زمین‌شناسی پزشکی، زمین‌شناسی محیط زیست و اکتشافات مواد معدنی به منظور تفسیر بهتر رده‌بندی عناصر، منشأیابی آلودگی یا معدنی، تشخیص نمونه‌های دورافتاده و یا بی‌هنجار استفاده کرد و قابل توجه است که برای اولین بار، ژئوکومتریکس در این پژوهش معرفی شده است.

**کلیدواژه‌ها:** ژئوکومتریکس، رده‌بندی، آنالیز فاکتورهای موازی، نزدیک‌ترین همسایه، نمونه‌های خاکی، ICP-MS، ICP-OES.

E-mail: somayeh.veyseh@gmail.com

**نویسنده مسئول:** سیمیه ویسه

## ۱- پیش‌نوشتار

مدیریت توسعه پایدار و ایجاد محیط زیست امن‌تر برای ساکنان شهرها مفید باشد (سمایی و میرطاهری، ۱۳۹۳).

یکی از اهداف این مطالعه کاربرد ژئوکومتریکس به عنوان علمی بین رشته‌ای برای درک بهتر اطلاعات زمین‌شناسی و شیمیایی با استفاده از روش‌های ریاضی، کامپیوتر و آماری است (Niazzi and Veyseh, 2015). کمومتریکس دارای کاربردهای فراوانی در کالیبراسیون‌های چندمتغیره، تفکیک منحنی‌های چند متغیره، طراحی آزمایش، خوشه‌بندی و ... است. یکی از پرکاربردترین روش‌های ریاضی، روش تجزیه گونه‌های اصلی (PCA) است که بر پایه این روش داده‌های حاصل از تجزیه فلزات در نمونه‌های مختلف به عنوان داده‌های اولیه تجزیه خواهد شد. در این روش با به دست آوردن تعداد عامل‌های مستقل، داده‌های اولیه به دو ماتریس Score و Loading تقسیم می‌شوند که داده‌های Score ضریبی از متغیرهای مستقل و داده‌های Loading ضریبی از متغیرهای وابسته هستند. از رسم Score‌ها می‌توان به عنوان الگویی از تغییرات نمونه‌ها بر پایه عامل‌های مستقل استفاده کرد که پایه خوشه‌بندی مورد مطالعه بر پایه توزیع داده‌های Score در فضای PCها است؛ همچنین از رسم مقادیر Loading می‌توان به تأثیر عناصر در نمونه‌ها پی برد.

از فواید به کار بردن روش تجزیه عامل‌های اصلی حذف نوفه و خطاهای موجود در اندازه‌گیری است که این امر سبب افزایش دقت و درستی نتایج و تفسیر آنها می‌شود. گفتنی است از نتایج حاصل از تجزیه با روش یاد شده می‌توان ردیابی فلزات و شبه فلزات در اکوسیستم‌های مختلف، مقاصد اکتشافی، زمین‌شناسی‌های پزشکی، محیط زیستی، دریایی و ... را نام برد. همچنین در این مطالعه برای به دست آوردن همبستگی میان فلزات در نمونه‌های مورد مطالعه از یک روش خوشه‌بندی به نام روش نزدیک‌ترین همسایه (KNN) استفاده شده است که از روش‌های قدیمی در خوشه‌بندی است و در مقالات بسیاری از این روش برای خوشه‌بندی

شهرستان بهاباد با مساحتی در حدود ۸۲۳۵ کیلومتر مربع و جمعیتی بیش از ۲۷۸۰۰ نفر (سرشماری سال ۱۳۹۰) در شمال خاور استان یزد جای دارد (شکل ۱؛ شریف‌نژاد و امیدی، ۱۳۹۳). این منطقه بخشی از پهنه ایران مرکزی را تشکیل می‌دهد که شامل دو سری ارتفاعات موازی است که در امتداد شمال باختری - جنوب خاوری کشیده شده‌اند. همچنین حدود نیمی از رخصاره‌های سنگی این منطقه را رسوبات شیلی، ماسه‌سنگی ژوراسیک و تشکیلات پالئوژن نئوژن تشکیل می‌دهد (بلاغی و همکاران، ۱۳۸۷).

استان یزد به عنوان یکی از استان‌های غنی و پرپتانسیل معدنی کشور، دارای معادن فعال و متروکه بسیاری است. از منابع معدنی فلزی مهم این استان می‌توان معادن آهن چغارت، آهن بافق، معدن سرب و روی کوشک، سرب و روی مهدی‌آباد و اورانیم ساغند را نام برد. همچنین از کانه‌های غیر فلزی این منطقه هم می‌توان به کانه‌هایی مانند فلورین، پرلیت، بنتونیت، فلدسپار، کائولن، آزبست و پتاس اشاره کرد (دهقانی‌زاده و فلاح، ۱۳۹۱). در منطقه بهاباد نیز معادن سرب و روی گیجر کوه، معدن زغال‌سنگ چهارچشمه و غیره وجود دارد. همچنین از نزدیک‌ترین کارخانه‌های فرآوری به این منطقه می‌توان به کارخانه سرب و روی کوشک و کارخانه سنگ آهن چادرمو اشاره کرد (عبودی و همکاران، ۱۳۹۰). بنابراین وجود معادن سرشار در این مناطق و فعالیت‌های معدنی می‌تواند سبب ایجاد آلودگی‌های زیست محیطی همچون آلودگی آب، خاک و هوا شود (برزین و همکاران، ۱۳۹۴). از بزرگ‌ترین چالش‌های موجود در نواحی شهری، آلودگی خاک توسط مواد شیمیایی زائد است. از میان آنها فلزات سنگین مانند سرب، روی، مس، کادمیم و غیره به دلیل غیر قابل تجزیه بودن و اثرات فیزیولوژیکی که بر موجودات زنده دارند حتی در غلظت‌های کم نیز برای اهمیت شناخته شده‌اند. بنابراین در دست داشتن اطلاعات در مورد توزیع فلزات در محیط شهری می‌تواند در راستای

۳ درصد عناصر مورد مطالعه در این پژوهش از شرکت Inorganic تهیه و سپس محلول‌ها با غلظت مورد نظر در آب خالص تهیه شدند. اسید پرکلریک، اسید نیتریک و اسید هیدروکلریک با خلوص بالا و اسید HF از شرکت مرک تهیه شدند. استانداردهای خاک برای چک کردن درستی خوانش نمونه‌های خاک و ماتریکس توسط دستگاه از شرکت IGGE تهیه شد. کپسول گاز آرگون گرید ۵ و درصد خلوص ۹۹۹/۹۹ از شرکت فرا فن گاز فراهم شده است.

### ۳- دستگاه‌ها و نرم‌افزارها

دستگاه طیف‌سنج جرمی پلاسمای جفت شده القایی ICP-MS مدل Perkin Elmer Sciex ELAN 9000 ساخت آمریکا و دستگاه طیف‌سنج نشری پلاسمای جفت شده القایی مدل Varian 735ES ساخت کشور استرالیا و دستگاه فلونورسانس اتمی مدل AF-640 ساخت شرکت Rayleigh کشور چین است. مشخصات دستگاه‌های مورد استفاده در جدول ۱ و ۲ خلاصه شده است؛ تنظیمات و میزان غلظت استانداردها در کالیبراسیون برای خوانش نمونه‌ها برای دستگاه ICP-MS و ICP-OES به ترتیب استاندارد EPA200/8 و EPA200/7 است و برای ثبت مختصات برای نمونه‌برداری از دستگاه GPS مدل Oregon 650 استفاده شد.

### ۴- روش نمونه‌برداری نمونه‌های خاک

نمونه‌های خاک شهرستان بهاباد بر پایه شبکه‌بندی‌های سیستماتیک از مناطق شهری، روستایی و کشاورزی برداشته شدند. به منظور برداشت نمونه‌های خاک حدود ۱۵ سانتی‌متر از خاک سطحی کنار زده و با استفاده از الک ۲۰ مش از ژرفای تقریبی ۱۵ تا ۲۰ سانتی‌متری در حدود ۲۰۰ گرم خاک برای انجام آزمایش‌ها برداشت می‌شود. چگالی نمونه در پوشش سیستماتیک پروژه‌های ژئوشیمیایی شهری (Kruzlicova et al., 2013) یک نمونه در هر کیلومتر مربع (۱۰۰۰ × ۱۰۰۰ متر) است. شبکه نمونه‌برداری برای برداشت نمونه‌های آبی با توجه به فاصله و توزیع نمونه‌ها در سطح حوضه آبریز طراحی شد (Demetriades and Birke, 2015).

### ۵- روش هضم نمونه‌های خاکی برای تجزیه توسط ICP-MS

روش چهار اسید برای هضم نمونه‌های خاک منطقه مورد مطالعه استفاده شده است. در این روش ابتدا نمونه‌های سنگ و خاک طبق استاندارد D4698-92 آماده و توسط سنگ‌شکن‌های فکی، غلتکی و آسیابی خرد شدند. سپس از سرند ۲۰۰ مش عبور داده و درون آون به مدت ۲ ساعت در دمای ۸۰ درجه سانتی‌گراد قرار داده شدند تا خشک شوند. آنگاه ۰/۱ گرم از نمونه وزن، درون ظروف تفلونی درب‌دار ریخته و به آن ۱ میلی‌لیتر آب و ۶ میلی‌لیتر  $\text{HNO}_3$  غلیظ افزوده شد و در دمای ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۳۰ دقیقه روی هات‌پلیت قرار گرفت. در مرحله بعد ۶ میلی‌لیتر HF و ۲ میلی‌لیتر  $\text{HClO}_4$  به این ترکیب افزوده شد و روی هات‌پلیت با دمای ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد قرار داده شد تا نمونه ژله‌ای شود. سپس ۲ میلی‌لیتر  $\text{HClO}_4$  برای پراندن کامل HF برای جلوگیری از خورده شدن قطعات شیشه‌ای دستگاه به ترکیب افزوده شد و روی هات‌پلیت قرار گرفت تا جایی که دود سفید که نشان‌دهنده از بین رفتن HF است، ظاهر شود. در مرحله پایانی برای جلوگیری از رسوب عناصری مانند Sn و Ti، ۲ میلی‌لیتر HCl ۵۰ درصد و سپس ۱۰ میلی‌لیتر آب خالص به نمونه افزوده شد و به مدت ۵ دقیقه در دمای ۱۵۰ درجه سانتی‌گراد قرار گرفت. در پایان ترکیب حاصل درون بالن‌های شیشه‌ای A class ۵۰ یا ۱۰۰ میلی‌لیتر با آب خالص به حجم رسید و توسط دستگاه خوانش شد (Amr et al., 2016; Pietilä et al., 2015). (Standard method by code number of D 4698-92)

استفاده شده است (Chatfield and Collins, 1980; Flury and Riedwyl, 1988; Martens and Neas, 1989; Manly, 1994; Adams, 1995; Vandeginste et al., 1998; Otto, 1999). گفتنی است هدف از انجام روش KNN در کنار روش PCA تأیید نتایج است. روش‌های PCA و KNN در مطالعه‌های فراوانی به دلیل کاربردی بودن آنها استفاده شده‌اند (Sinkov et al., 2014; Pornwilard et al., 2011; Varmuza et al., 2014; Yamashita and Wakahara, 2016).

طیف‌سنجی پلاسمای جفت شده القایی از جمله روش‌های طیف‌سنجی اتمی است که در آن اتمی شدن عناصر به کمک پلاسمای تولید شده توسط یک گاز بی‌اثر که در بیشتر موارد آرگون است صورت می‌پذیرد. از این رو برای تجزیه عنصری از بیشتر عناصر به جز آرگون (گاز بی‌اثر) استفاده می‌شود. این روش در مقایسه با روش‌های دیگر، روشی حساس‌تر، با حد تشخیص بهتر و تکرارپذیری بالاتر است. از تلفیق این روش با طیف‌سنج جرمی می‌توان برای افزایش قابلیت‌های این روش استفاده کرد. از جمله کاربردهای روش طیف‌سنجی جرمی توسط پلاسمای جفت شده القایی در نانوفناوری، تعیین اندازه نانو ذرات و تجزیه همزمان چند عنصری نمونه‌های آب و خاک است (Varmuza et al., 2014; Cruz et al., 2015; Labrecque et al., 2016; Maher et al., 2016). نشری پلاسمای جفت شده القایی (ICP-OES) یکی از مهم‌ترین روش‌های دستگاهی تجزیه عنصری است. از این روش‌ها می‌توان برای اندازه‌گیری همزمان در نمونه‌های مختلف مانند نمونه‌های خاک، آب، فلزات، سرامیک‌ها و نمونه‌های آبی و ... استفاده کرد. روش‌های ICP با آشکارسازهای جرمی و نوری به دلیل حساسیت بالا، داشتن دقت و درستی بالا و قابلیت تجزیه خودکار عناصر، کاربردهای بسیاری در تجزیه همزمان عنصری دارد و به همین منظور از این روش‌ها در تجزیه عناصر مورد مطالعه در این پژوهش در نمونه‌های خاکی استفاده شده است (Dados et al., 2014; Luis et al., 2015; Nakata et al., 2016).

فلونورسانس اتمی شامل نشر فوتون از بخار اتمی است که با جذب فوتون برانگیخته شده است. در غلظت‌های پایین آنالیت، کسر بسیار کوچکی از تابشی منبع برانگیختگی جذب می‌شود. کسری از این تابشی جذب شده به فلوپارسانی تبدیل و با بازده توان فلونورسانی تعیین می‌شود. سرانجام کسر کوچکی از فلونورسانس نشر شده گردآوری و آشکارسازی می‌شود. روش‌های فلونورسانس اتمی برای تجزیه فلزات در موادی مانند روغن‌های روان‌کننده، آب دریا، مواد زیست‌شناختی، گرافیت و نمونه‌های کشاورزی به کار برده شده‌اند. با کمک این روش می‌توان عناصر فرار را با حساسیت مناسب تجزیه کرد. همچنین این آزمایشگاه تجزیه تخصصی عنصر جیوه را دارد و آماده‌سازی خاص برای تجزیه با کمک این دستگاه برای هضم نمونه‌های مختلف زمین‌شناسی و زیست محیطی بر پایه استاندارد داس (Silva et al., 2014; Yang et al., 2015; Guoxin et al., 2016).

روش‌های مختلف خوشه‌بندی با استفاده از نتایج ICP-MS و ICP-OES در مطالعه‌های مختلفی مانند خوشه‌بندی نمونه‌های خوراکی (Antonio et al., 2014)، نمونه‌های محیط زیستی (Zhuang and Kokot, 2014)، نمونه‌های پزشکی (Liu et al., 2014) و مطالعه‌های شیمیایی (Kruzlicova et al., 2013) استفاده شده است. در این مطالعه از نتایج تجزیه عناصر به دست آمده توسط روش‌های ICP-MS، ICP-OES، AF در ۱۵۶ نمونه خاکی منطقه بهاباد برای مطالعه پراکندگی و توزیع نمونه‌ها و تفسیر این پراکندگی بر پایه داده‌های منطقه‌ای و تأثیر عناصر مهم و تأثیرگذار در هر نمونه توسط روش‌های ژئوکومتریکس به عنوان یک کاربرد مناسب و مفید در علوم زمین استفاده شده است.

### ۲- مواد و واکنشگرها

محلول استاندارد  $10 \mu\text{g mL}^{-1}$  در ماتریکس نمونه حجمی حجمی اسید نیتریک

## ۶- روش هضم نمونه‌های خاکی برای تجزیه توسط ICP-OES

ابتدا ۰/۵ گرم از نمونه خشک توزین، سپس ۶ میلی‌لیتر  $\text{HNO}_3$  به آن افزوده و به مدت ۳۰ دقیقه در دمای ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد گرما داده می‌شود. پس از خنک شدن به مدت ۵ دقیقه ۲ میلی‌لیتر  $\text{HClO}_4$  و ۶ میلی‌لیتر HF به آن افزوده و گرما داده می‌شود تا دود سفید رنگ پر کلریک خارج و نمونه خشک شود؛ دوباره ۲ میلی‌لیتر  $\text{HClO}_4$  و ۶ میلی‌لیتر HF به آن افزوده و گرما داده می‌شود تا دود سفید رنگ پر کلریک خارج شود. پس از سرد شدن و رسیدن دمای نمونه به ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد ۲ میلی‌لیتر  $\text{HCl}$  ۱:۱ و ۱۰ میلی‌لیتر آب خالص به آن افزوده و روی هیتر گذاشته می‌شود تا نمونه کاملاً حل شود و پس از سرد شدن با آب دوبار تقطیر به حجم ۵۰ میلی‌لیتر رسانده می‌شود (Martin and Martin, 1990; Martin et al., 1991 and 1994; USEPA-ICP-Users Group).

## ۷- روش هضم نمونه‌های خاکی برای تجزیه توسط AF

ابتدا ۰/۲ گرم از نمونه توزین، درون لوله ۲۵ میلی‌لیتر ریخته و سپس به نمونه‌ها آب مقطر و تیزاب به مقدار مشخص افزوده می‌شود و در حمام آب گرم در دمای ۶۰ تا ۷۰ درجه سانتی‌گراد قرار می‌گیرد؛ نمونه‌ها در حمام آب گرم هم زده می‌شوند تا به دمای ۹۰ درجه سانتی‌گراد برسند و یک ساعت در این دما باقی می‌مانند. سپس نمونه‌ها از آب گرم بیرون آورده می‌شوند تا به دمای محیط برسند. ۰/۲۵ گرم تیو اوره و ۰/۲۵ گرم ویتامین سی در ۵ میلی‌لیتر آب مقطر برای هر نمونه محلول و به نمونه افزوده می‌شود؛ در صورت نیاز، به نمونه محلول دی‌کرومات (برای اکسید عنصر جیوه) افزوده می‌شود. سپس با آب مقطر به حجم ۲۵ میلی‌لیتر رسانده، در لوله آزمایش ریخته و به اندازه‌ای هم زده می‌شود تا مواد با هم مخلوط شوند. نمونه‌ها باید ۲۴ ساعت ثابت باقی بمانند تا ته‌نشین شوند و محلول شفاف حاصل شود (Duan et al., 2015).

## ۸- نرم‌افزارها

نرم‌افزارهای مورد استفاده در این پژوهش جعبه ابزار PLS\_Toolbox با ورژن ۶/۵ است که در محیط متلب با ورژن ۲۰۱۲ قابل اجراست. همچنین برای آماده‌سازی نمونه‌ها و پیش پردازش‌های لازم از نرم‌افزار اکسل ۲۰۱۰ استفاده می‌شود.

## ۹- بحث و نتیجه‌گیری

در این مطالعه ۱۵۶ نمونه از منطقه بهاباد (بهاباد، آسفنج و بنستان) در استان یزد بر پایه اصول نمونه‌برداری، گردآوری شد و بر پایه روش‌های آماده‌سازی ارایه شده در بخش تجربی، مراحل آماده‌سازی نمونه‌ها انجام گرفت و با توجه به عناصر مورد مطالعه، از روش‌های ICP-OES، ICP-MS و AF برای تجزیه استفاده شد؛ با توجه به نوع تجزیه عناصر مورد مطالعه در ۳ گروه عناصر پایه، عناصر سنگین، اورانیم و توریم در دسته‌های مختلف تقسیم‌بندی شدند. برای مطالعه و بررسی توزیع نمونه‌های خاکی بر پایه روش‌های مختلف، روش‌های PCA و KNN مورد استفاده قرار گرفت که نتایج در بخش‌های دیگر به ترتیب ارائه شده است.

## ۱۰- خوشه‌بندی و الگوشناسی نمونه‌های خاکی بر پایه فلزات پایه

در ابتدای مطالعه برای بررسی اهمیت عناصر پایه، توسط رسم نمودار مقدار ویژه بر حسب تعداد گونه‌های اصلی (شکل ۲)، دیده می‌شود که دست کم ۶ عنصر از ۸ عنصر اندازه‌گیری شده مؤثر هستند. گفتنی است که ۳ گونه اصلی اول ( $\text{PC}_3=13.18\%$ ،  $\text{PC}_2=23.40\%$ ،  $\text{PC}_1=35.23\%$ ) بیش از ۷۰ درصد تغییرات را شامل می‌شوند و با توجه به سطح اطمینان ۹۵ درصد تعداد گونه ۶ انتخاب شد تا بالای ۹۵ درصد تغییرات توسط عناصر در نظر گرفته شود. گفتنی است تعداد عامل‌های

اصلی (عناصر مؤثر) بر پایه مقدار ویژه نمایش داده شده قابل انتخاب است و در عاملی که مقدار ویژه به صفر نزدیک می‌شود آن عامل دیگر نمی‌تواند تأثیرگذار باشد. همچنین در انتخاب عامل‌های اصلی می‌توان از مقدار درصد تغییرات مورد نظر در سامانه نیز استفاده کرد. در این مطالعه با در نظر گرفتن درصد اطمینان ۹۵ درصد تعداد عامل‌های مؤثر انتخاب شد.

بر پایه تجزیه گونه‌های اصلی (PCA) و انتخاب ۶ گونه اصلی، مقادیر Score و Loading به دست آمد که با رسم نمودار Score می‌توان پراکندگی نمونه‌های گردآوری شده در منطقه بهاباد را بر پایه گونه‌های اصلی مورد مطالعه قرار داد. در شکل ۳ نمودار سه‌بعدی Score از رسم  $\text{PC}_1$ ،  $\text{PC}_2$  و  $\text{PC}_3$  نشان داده شده است و همان‌گونه که دیده می‌شود بر پایه توزیع و پراکندگی نمونه‌ها در فضای گونه‌های اصلی  $\text{PC}_1$ ،  $\text{PC}_2$  و  $\text{PC}_3$  بیشتر نمونه‌ها در یک منطقه پراکنده شده‌اند که با توجه به نمونه‌برداری که در یک منطقه انجام شده است و بر پایه ساختار زمین‌شناسی منطقه نوع پراکندگی و الگوی رفتاری منطقی به نظر می‌رسد و تنها تعدادی از نمونه‌های مربوط به منطقه آسفنج (As6، As3، As2، As12) و منطقه بنستان (Bs4، Bs، Bs5) دارای پراکندگی متفاوتی از دیگر نمونه‌ها هستند که با بررسی داده‌های منطقه‌ای علت پراکندگی متفاوت As2 به دلیل مقادیر سرب بالا در منطقه آسفنج و مقادیر روی، قلع و سرب بالا در نمونه‌های As6، As3 و As12 است.

برای بررسی دقیق‌تر برای نمونه، نمودار  $\text{PC}_1$  که بیشترین درصد تغییرات ۳۵/۲۳ درصد را دارد در شکل ۴ نشان داده شده است؛ همان‌گونه که دیده می‌شود نمونه‌های مربوط به منطقه آسفنج و به‌ویژه نمونه ۱۴۰ مربوط به منطقه آسفنج تفاوتی قابل توجهی با دیگر نمونه‌ها دارند که این به دلیل مقدار سرب و روی بالاست. گفتنی است که مقدار سرب و روی در این نمونه به ترتیب ۳۴۰۳ و ۳۰۹۱ میکروگرم بر لیتر است که با توجه به دیگر نتایج در نمونه‌های دیگر این منطقه، غلظت این دو عنصر در این نمونه بسیار بالاست.

برای تحلیل آماری و بررسی معنی‌دار بودن این تفاوت نمونه‌های اشاره شده با دیگر نمونه‌ها از آزمون Hotelling-T2 استفاده شد که این آزمون آماری، آزمون-t در فضای چندبعدي است که در شکل ۵ تحلیل آزمون  $T^2$  نشان داده شده است که تفاوت در پراکندگی نمونه‌های As6، Bas6، Bas4، As3، As6، As2 و Bs238 از دید آماری مورد تأیید قرار گرفت.

در شکل ۶، نمودار Biplot که ادغام نمودارهای Score و Loading است نشان داده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده، عناصر سرب و روی تأثیر مهمی بر فاصله گرفتن نمونه‌های منطقه آسفنج (As6، As3، As2، As12) دارند و همچنین بیشترین تأثیر در پراکندگی نمونه‌های بنستان مقادیر آهن موجود در این نمونه‌هاست. یکی از بررسی‌های مهم و قابل اهمیت، به دست آوردن همبستگی میان عناصر مورد تجزیه است که در شکل ۷ همبستگی عناصر مورد اندازه‌گیری نشان داده شده است؛ همان‌گونه که دیده می‌شود عناصر Cu، Zn و Pb در این منطقه مورد تجزیه همبستگی بالایی دارند. همچنین در شکل ۸، نمودار خوشه‌ای KNN برای این عناصر نشان داده شده است که همان‌گونه که دیده می‌شود عنصر آهن در یک خوشه به‌طور کلی قرار گرفته است و با مقادیر بالای آهن همخوانی دارد و عناصر روی و سرب نیز در یک خوشه قرار گرفته‌اند.

## ۱۱- خوشه‌بندی و الگوشناسی نمونه‌های خاکی بر پایه فلزات سنگین

در مرحله بعدی مطالعه نمونه‌های گردآوری شده بر پایه روش ارائه شده در بخش آزمایشگاهی توسط روش دستگاهی مناسب فلزات سنگین (Pb، Cd، Hg، As، Cr، B) اندازه‌گیری و تجزیه شد. در ابتدای مطالعه برای بررسی اهمیت عناصر پایه مورد مطالعه توسط رسم نمودار مقدار ویژه بر حسب تعداد گونه‌های اصلی (شکل ۹)، دست کم ۵ عنصر از ۶ عنصر اندازه‌گیری شده مؤثر هستند. گفتنی است ۳ گونه

خاک منطقه بنستان در بیشتر نمونه‌ها بالاتر از میزان استاندارد است و ممکن است سلامت ساکنان این منطقه را به خطر بیندازد. به‌طور کل میانگین این عنصر در نمونه‌های خاک ۶۹ میلی‌گرم بر کیلوگرم است و میزان آن میان ۵۵/۸ تا ۱۴۲/۱ میلی‌گرم بر کیلوگرم تغییر پیدا می‌کند. تمرکز کروم در جنوب باختری منطقه بنستان است و طیف گسترده‌ای از آلودگی به این عنصر را می‌توان در این مناطق دید. همچنین بالاترین تمرکز کروم در مناطق مرکزی آسفیج است که احتمالاً مربوط به آلاینده‌های سمی است که به‌طور گسترده در سیمان و بتن در مناطق مسکونی وجود دارد و طیف گسترده‌ای از آلودگی به این عنصر را در این مناطق ایجاد کرده است. یکی از بررسی‌های مهم و قابل اهمیت، به دست آوردن همبستگی میان عناصر مورد تجزیه است که در شکل ۱۴ همبستگی عناصر اندازه‌گیری شده نشان داده شده است که همان‌گونه که دیده می‌شود عناصر Cd، As، Pb در این منطقه مورد تجزیه همبستگی بالایی دارند. همچنین در شکل ۱۵، نمودار خوشه‌ای KNN برای این عناصر نشان داده شده است که همان‌گونه که دیده می‌شود عنصر سرب در یک خوشه متفاوت قرار گرفته است و با مقادیر بالای سرب همخوانی دارد و همچنین عنصر آرسنیک نیز تقریباً در دسته‌ای متفاوت است و همچنین عناصر کروم و بر و نیز جیوه و کادمیم نیز در یک خوشه دیگر قرار گرفته‌اند.

#### ۱۲- خوشه‌بندی و الگوشناسی نمونه‌های خاکی بر پایه اورانیم و توریم

در مرحله سوم این مطالعه با توجه به اهمیت بررسی عناصر اورانیم و توریم در نمونه‌های خاکی در مطالعات زمین‌شناسی، مقادیر اورانیم و توریم در ۱۵۶ نمونه اندازه‌گیری شد. مقادیر اورانیم در گستره ۱/۴۸ تا ۳/۸۱ میلی‌گرم بر لیتر و مقادیر توریم در گستره ۴/۰۷ تا ۱۱/۰۰ میلی‌گرم بر لیتر دارای تغییرات غلظتی هستند و همان‌گونه که دیده می‌شود مقادیر غلظتی اورانیم و توریم در این منطقه قابل توجه است و بر پایه مطالعه تجزیه دستگاهی عامل‌های اصلی، PC1 دارای ۷۸/۶۶ درصد تغییرات و PC2 دارای ۲۱/۳۴ درصد تغییرات در نمونه‌های مورد مطالعه هستند و به عبارتی هر دو عنصر اورانیم و توریم در منطقه بهاباد از دید تغییرات اهمیت قابل توجهی دارند.

بر پایه دو گونه اصلی PC1 و PC2، نمودار Score در شکل ۱۶ نشان داده شده است که نمونه‌های Bs305 و Bs328 تفاوت قابل توجهی در توزیع و پراکندگی نمونه‌ها دارند و بر پایه آزمون Hotelling-T<sup>2</sup> که در شکل ۱۷ نشان داده شده است این پراکندگی قابل توجه از دید آماری معنی‌دار است.

برای نشان دادن تغییرات غلظتی در نمونه‌ها، در شکل ۱۸ تغییرات مقادیر PC1 بر حسب نمونه‌ها نشان داده شده است؛ تغییرات غلظتی در همه نمونه‌ها دیده می‌شود و تغییرات به‌گونه‌ای نیست که نمونه‌های خاصی دارای تغییرات فاحشی باشند. چند نمونه به نام‌های Bs305 و Bs328 اختلاف قابل توجهی با دیگر نمونه‌ها دارند و از دید مقدار غلظتی بالاترین غلظت توریم ۹/۴ و ۱۱/۰ میلی‌گرم بر لیتر است که در این دو نمونه دیده شده است.

در شکل ۱۹ نمودار Biplot نشان داده شده است که با توجه به نتایج به دست آمده تأثیر اورانیم و توریم در نمونه‌های مورد مطالعه مشخص شده است و با توجه به تجزیه‌های انجام شده و نتایج مقایسه‌ای، به‌طور کلی تأثیر اورانیم و توریم بر همه نمونه‌ها را می‌توان یکپارچه در نظر گرفت که با توجه به مقادیر غلظتی این دو عنصر در نمونه‌های مختلف این نتیجه‌گیری قابل پیش‌بینی بوده است.

#### ۱۳- نتیجه‌گیری

در این مطالعه نمونه‌های خاکی (۱۵۶ نمونه) از منطقه بهاباد با روش‌های دستگاهی مختلف با آماده‌سازی‌های مناسب مورد تجزیه عناصر مختلف قرار گرفته است و نتایج به دست آمده توسط روش‌های ژئوکومتریکیس تحلیل شده است. در این

اصولی اول (PC1=35.23%، PC2=23.40% و PC3=13.18%) بیش از ۷۵ درصد تغییرات را شامل می‌شوند و با توجه به سطح اطمینان ۹۵ درصد، تعداد گونه ۵ انتخاب شد تا بالای ۹۵ درصد تغییرات توسط عناصر در نظر گرفته شود.

بر پایه تجزیه گونه‌های اصلی (PCA) و انتخاب ۵ گونه اصلی، مقادیر Score و Loading به دست آمد که با رسم نمودار Score می‌توان پراکندگی نمونه‌های گردآوری شده در منطقه بهاباد را بر پایه گونه‌های اصلی مطالعه کرد. در شکل ۱۰ نمودار سه‌بعدی Score از رسم PC1، PC2 و PC3 نشان داده شده است و همان‌گونه که دیده می‌شود بر پایه توزیع و پراکندگی گونه‌های اصلی PC1، PC2 و PC3 بیشتر نمونه‌ها در یک منطقه پراکنده شده‌اند و شماری از نمونه‌های مربوط به منطقه آسفیج (As12، As6، As3، As2، As1، AS15) تحت تأثیر As و Pb و سپس Cd، Cr و Hg است. علت پراکندگی متفاوت As2 به دلیل مقادیر سرب و آرسنیک بالا در منطقه آسفیج است. نمونه منطقه بنستان (Bas1) پراکندگی متفاوتی از دیگر نمونه‌ها دارند که با بررسی داده‌های منطقه‌ای علت پراکندگی این نمونه نیز مقدار سرب در مقایسه با دیگر نمونه‌های بنستان است.

برای نشان دادن تفاوت نمونه‌ها می‌توان از نموداری از مقادیر PC بر حسب نمونه‌ها استفاده کرد؛ در شکل ۱۱ مقدار PC1 که بیشترین تغییرات (۴۲/۱۵ درصد) را دارد بر حسب نمونه‌ها نشان داده شده است که همان‌گونه که دیده می‌شود نمونه As2 مربوط به منطقه آسفیج تفاوت قابل توجهی با دیگر نمونه‌ها دارد که با مطالعه منطقه‌ای دلیل مقدار بالای آرسنیک و سرب است.

برای تحلیل آماری و بررسی معنی‌دار بودن این اختلاف نمونه‌های مورد اشاره در شکل ۱۱ با دیگر نمونه‌ها، از آزمون Hotelling-T<sup>2</sup> استفاده شد که در شکل ۱۲ تحلیل آزمون T<sup>2</sup> نشان داده شده است که معنی‌دار بودن تفاوت نمونه‌های As1، As2، As6، As7 و As12 از منطقه آسفیج و نمونه‌های Bas1، Bas3 و Bas4 از منطقه بنستان مورد تأیید آماری قرار می‌گیرد.

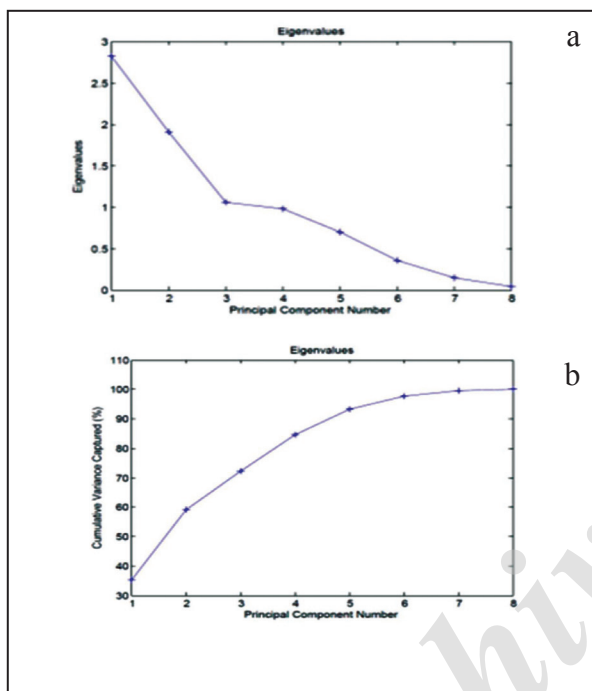
برای بررسی اثرگذاری عناصر مورد تجزیه در نمونه‌های مورد مطالعه، نمودار Biplot استفاده شد (شکل ۱۳). همان‌گونه که در شکل ۱۳ دیده می‌شود، در جهت نمونه آسفیج شماره ۲، بردار عنصر آرسنیک قرار گرفته است که نشان‌دهنده تأثیر این عنصر بر این نمونه است. همچنین می‌توان تأثیر عنصر کادمیم را در راستای نمونه‌های آسفیج ۶ و ۱۲ به روشنی نتیجه‌گیری کرد.

بررسی‌ها نشان داده است که در محدوده آسفیج، گسل راندگی به نسبت بزرگی از میان واحدهای ژوراسیک و تریاس عبور کرده و واحدهای آهکی و دولومیتی تریاس را روی واحدهای شیل و ماسه‌سنگی ژوراسیک رانده است. همچنین در کل ناحیه سنگ میزبان ماده معدنی سرب و روی وجود دارد. در جنوب منطقه آسفیج به دلیل تخریب این واحد دارای پتانسیل فلزی بالا و نیز فعالیت‌های معدنکاری، احتمالاً تمرکز بالایی از فلزات سنگین مانند آرسنیک دیده می‌شود که به شدت سلامت ساکنان منطقه را تهدید می‌کند. حد مجاز خاک کشاورزی برای آرسنیک ۱۱ میلی‌گرم بر کیلوگرم و حد مجاز برای مناطق شهری و صنعتی ۱۸ میلی‌گرم بر کیلوگرم است. همچنین تنها در بخش شمالی منطقه بنستان مقدار آرسنیک، افزایش جزئی نشان می‌دهد.

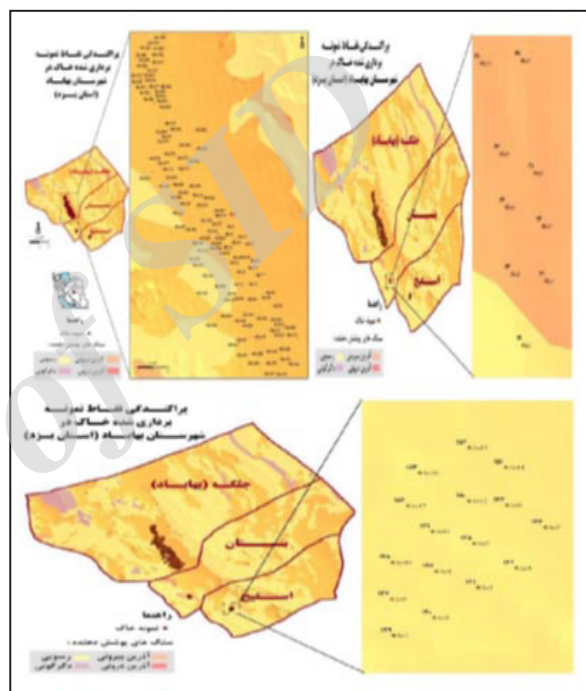
غلظت سرب در بیشتر نمونه‌ها بیش از حد مجاز بوده است که بیشتر این نمونه‌ها در بخش مرکزی آسفیج قرار دارند و مقدار این فلز در منطقه بسیار بالاست و این بالا بودن احتمالاً با کانسازسازی سرب و روی در سنگ‌های کربناته سازنده شتری مربوط به دوره سنی تریاس در ارتباط است که در منطقه پراکندگی متفاوت و احتمالاً در بالادست محدوده آسفیج رخنمون دارد. گفتنی است تعیین دقیق منشأ آلودگی خاک در منطقه نیازمند بررسی‌های دقیق‌تری است. میزان میانگین عنصر سرب در نمونه‌های خاک منطقه مورد مطالعه ۵۷ میلی‌گرم بر کیلوگرم است و میزان آن بین ۱۹/۳ تا ۳۴۰۳ میلی‌گرم بر کیلوگرم تغییر پیدا می‌کند. میزان عنصر کروم در

تأثیر عناصر در منطقه‌های مورد مطالعه را تشخیص داد که این نتیجه کاربرد بسیار مهمی در علوم زمین‌شناسی همچون اکتشاف، پزشکی و محیط زیست می‌تواند داشته باشد. همان‌گونه که در نتایج به دست آمده نشان داده شده است، نمونه‌هایی که توسط این روش‌های آماری به عنوان نمونه متفاوت شناسایی شده‌اند توسط داده‌های زمین‌شناسی کاملاً قابل تحلیل بودند. در پایان، این مطالعه می‌تواند یک کاربرد مناسب و کاربردی از علم ژئوکمتریکس به عنوان یک زمینه میان رشته‌ای از علوم زمین‌شناسی، شیمی و کمومتریکیس برای بهبود و درک بهتر نتایج نام برد.

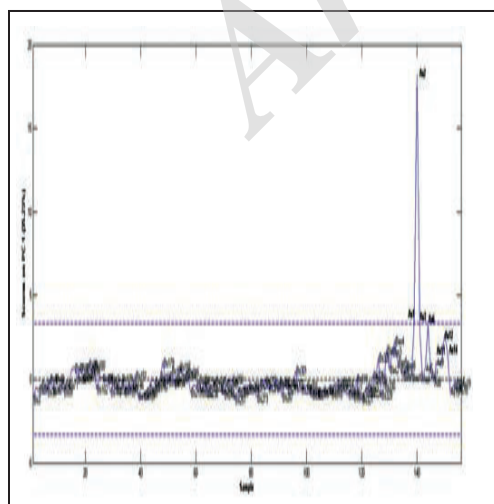
مطالعه از روش تحلیل داده‌های اصلی استفاده شد که یکی از قدرتمندترین الگوریتم‌های ریاضی در کاهش داده‌ها و به دست آوردن عامل‌های اصلی موثر در بررسی مطالعه است. با استفاده از الگوریتم PCA تعداد عناصر مؤثر از دید واریانس قابل تأثیر در سامانه شناسایی و سپس مقادیر Score و Loading در تحلیل نتایج به کار برده شده است. با استفاده از Score‌های به دست آمده، پراکندگی نمونه‌ها نسبت به هم نمایش داده می‌شود و با این نمایش در حقیقت می‌توان الگوشناسی منطقه و رفتار تغییرات غلظتی نمونه را استنباط کرد و با استفاده از مقادیر Loading می‌توان



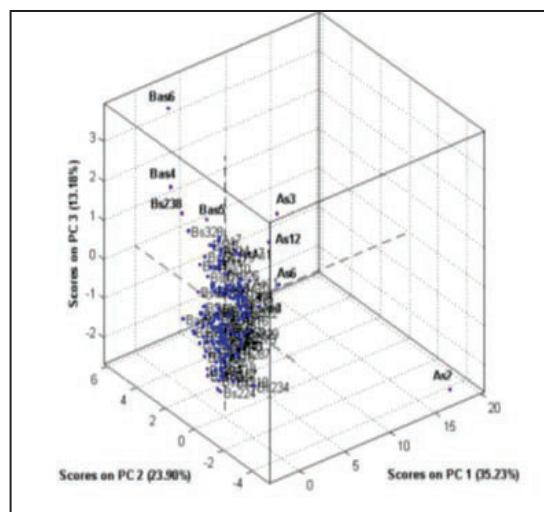
شکل ۲- نمودار: (a) مقادیر ویژه و (b) واریانس تجمعی بر پایه تعداد گونه‌های اصلی.



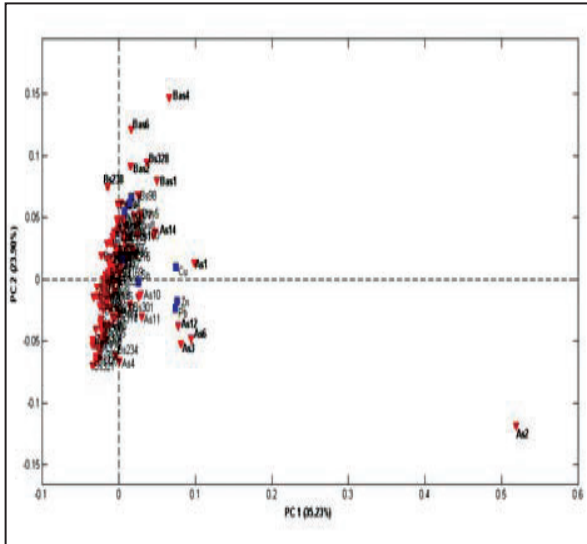
شکل ۱- توزیع پراکندگی نمونه‌های خاکی در منطقه‌های مورد مطالعه بهاباد، آسفنج و بنستان.



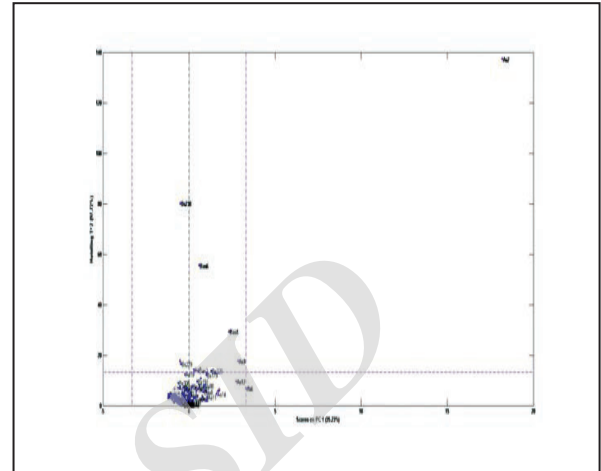
شکل ۴- نمودار PC1 با درصد تغییرات ۳۵%/۲۳ بر حسب شماره نمونه‌های مورد مطالعه.



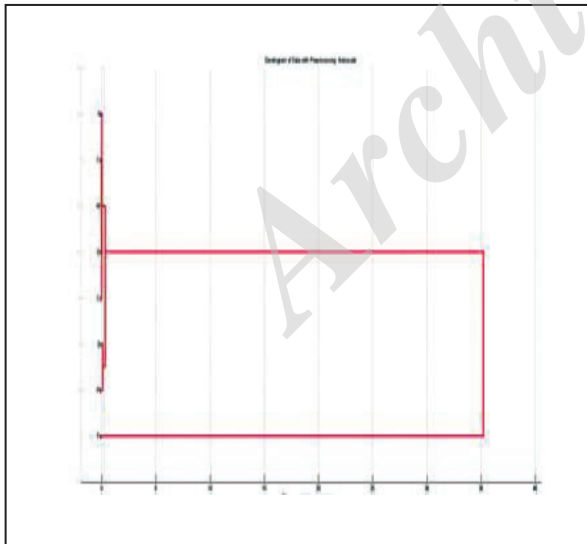
شکل ۳- نمودار پراکندگی نمونه‌های مورد تجزیه منطقه بهاباد بر پایه گونه‌های اصلی اول، دوم و سوم.



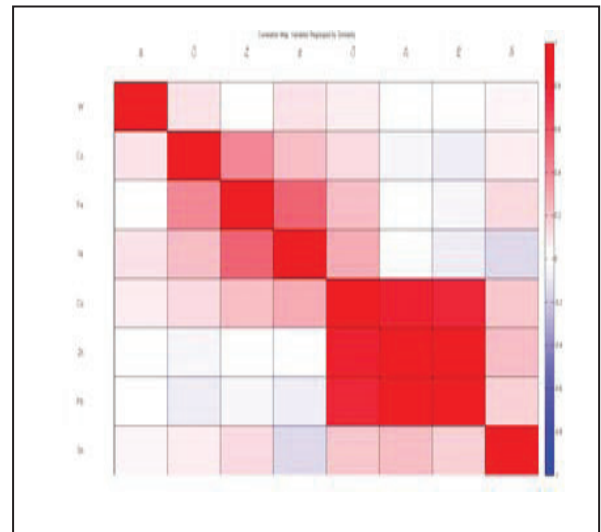
شکل ۶- نمودار Biplot برای بررسی تأثیر نوع عناصر بر نمونه‌ها.



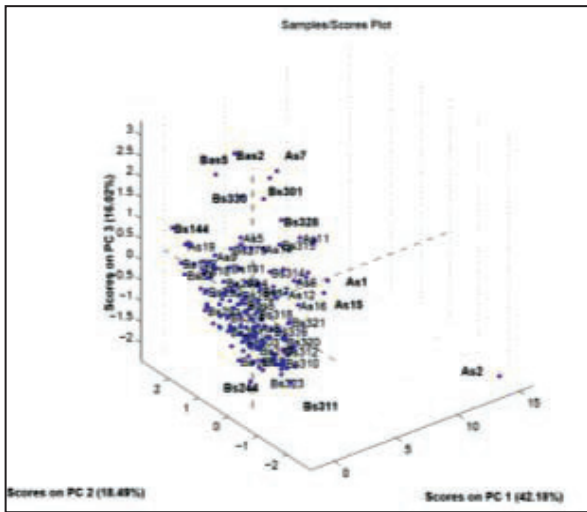
شکل ۵- نمودار تست  $T^2$  برای بررسی معنی دار بودن پراکندگی نمونه‌های خاکی منطقه بهاباد.



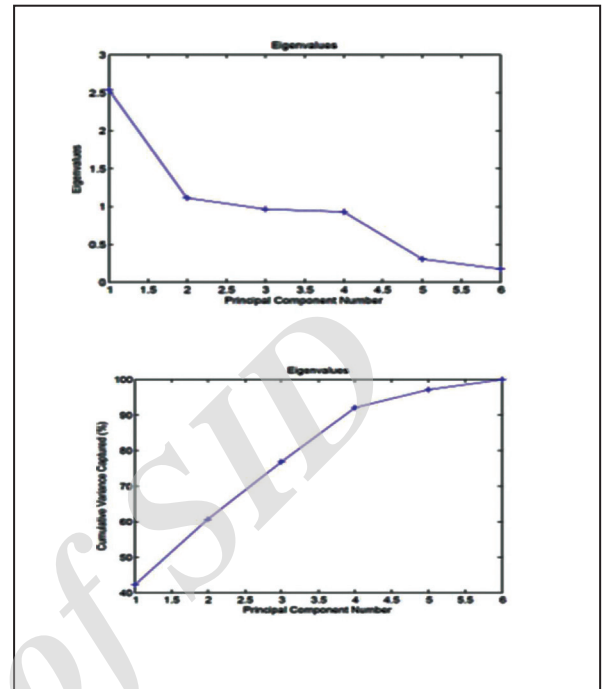
شکل ۸- نمودار خوشه‌ای بر پایه روش KNN برای بررسی همبستگی فلزات مورد مطالعه.



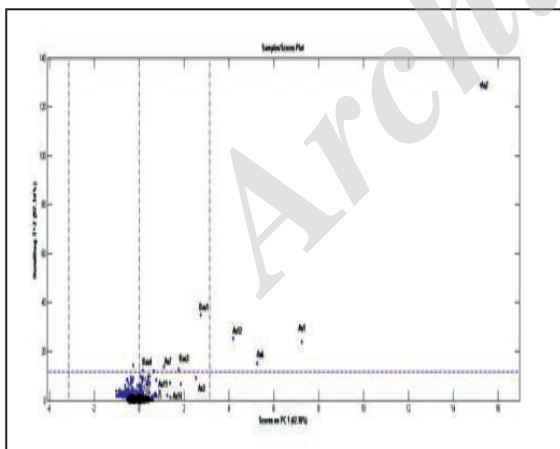
شکل ۷- نمودار همبستگی عناصر مورد تجزیه در این مطالعه.



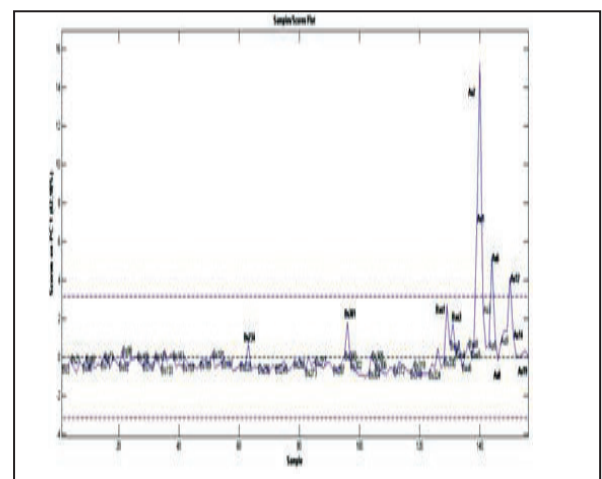
شکل ۱۰- نمودار پراکندگی نمونه‌های مورد تجزیه در منطقه بهاباد بر پایه گونه‌های اصلی اول، دوم و سوم.



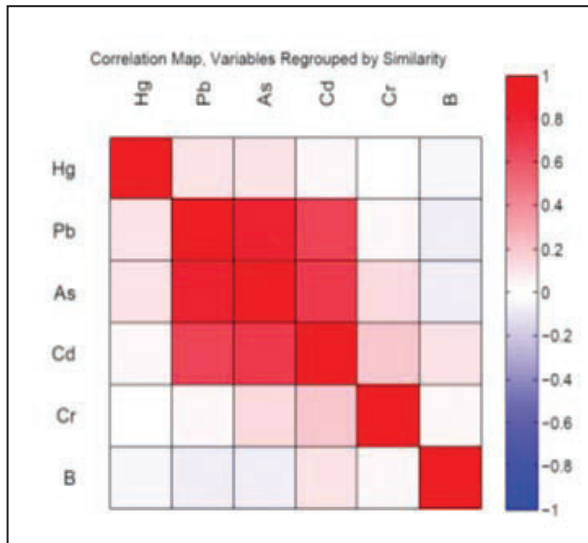
شکل ۹- نمودار: (a) مقادیر ویژه و (b) واریانس تجمعی بر پایه تعداد گونه‌های اصلی.



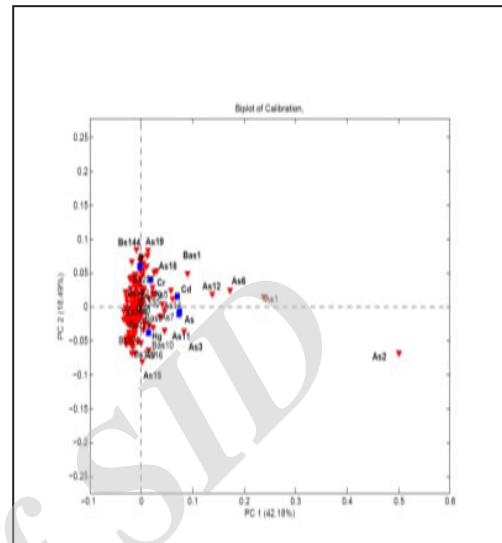
شکل ۱۲- نمودار آزمون  $T^2$  برای بررسی معنی دار بودن پراکندگی نمونه‌های خاکی مناطق بهاباد، بنستان و آسفنج.



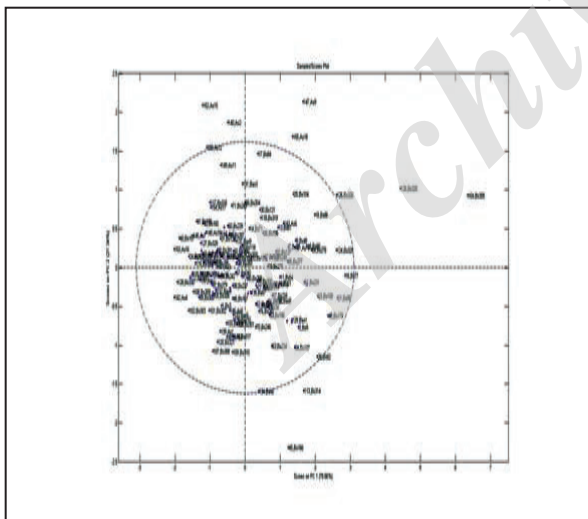
شکل ۱۱- نمودار مقادیر PC1 بر پایه شماره نمونه.



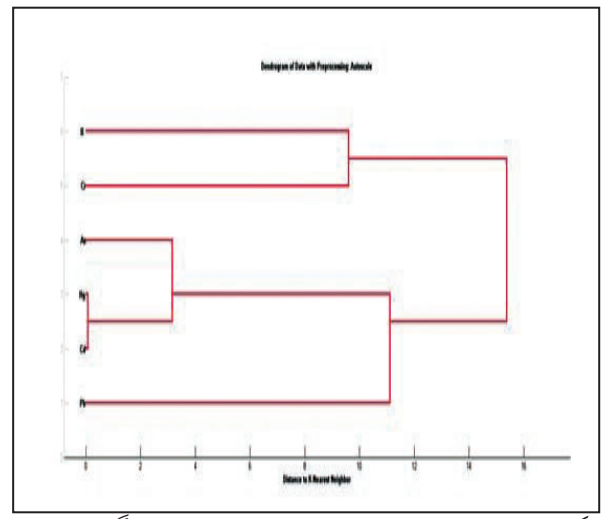
شکل ۱۴- نمودار همبستگی عناصر مورد تجزیه در این مطالعه.



شکل ۱۳- نمودار Biplot برای بررسی تأثیر نوع عناصر بر نمونه‌های مناطق بهاباد، بنستان و آسفیح.

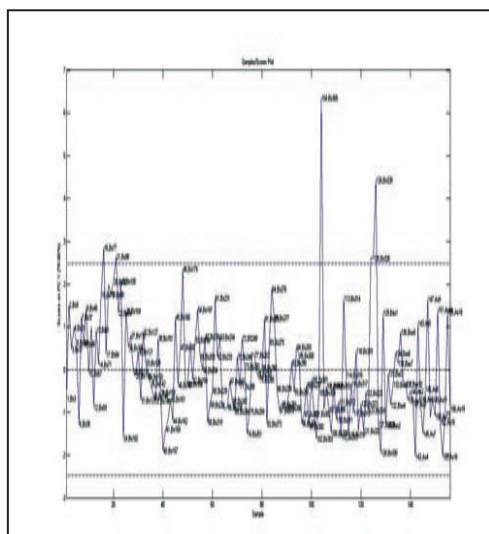


شکل ۱۶- نمودار PC1 بر پایه PC2 برای مطالعه اورانیم و توریم در منطقه بهاباد.

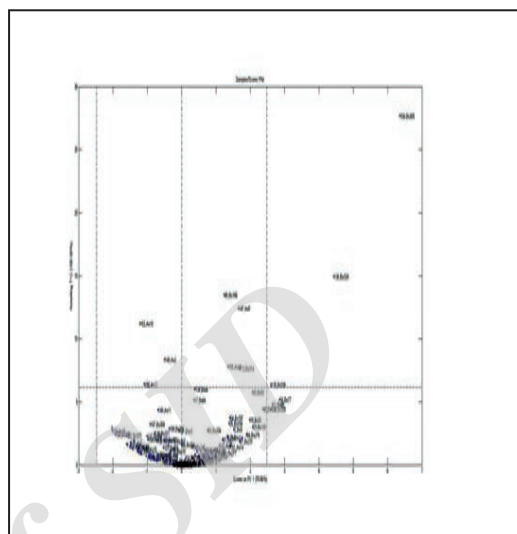


شکل ۱۵- نمودار خوشه‌ای بر پایه روش KNN برای بررسی همبستگی فلزات مورد مطالعه.





شکل ۱۸- نمودار مقادیر PCI بر پایه شماره نمونه.


 شکل ۱۷- نمودار آزمون  $T^2$  برای بررسی معنی دار بودن پراکندگی نمونه‌های خاکی مناطق بهاباد، بنستان و آسفنج.

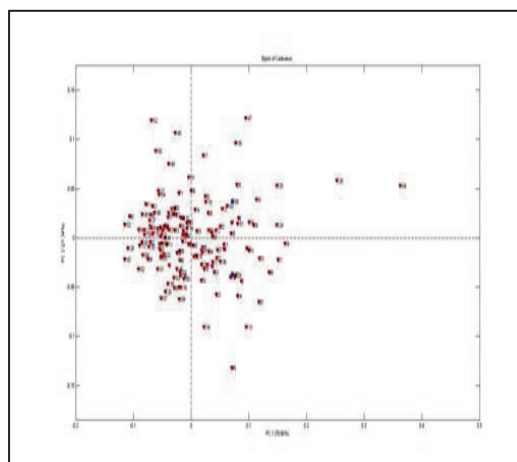
جدول ۱- متغیرهای روش و شرایط آزمایشگاهی دستگاه ICP-MS ELAN 9

RF Power	1000 Watts
Plasma Gas Flow	15 L min <sup>-1</sup>
Auxiliary Gas Flow	1 L min <sup>-1</sup>
Nebulizer Gas Flow	0.81 L min <sup>-1</sup>
Solution Pump Rate	1.50 mL min <sup>-1</sup>
Sample Introduction System	Cross-flow with Scott spray chamber
Rinse Time	35 seconds @ 48 rpm
Sample Uptake Time	25 seconds @ 48 rpm
Equilibration Time	10 seconds @ 24 rpm
Detector Mode	Dual Mode
Lens	6.25
Sampler/Skimmer Cones	Nickel
Scanning Mode	Peak Hopping

جدول ۲- متغیرهای روش و شرایط آزمایشگاهی دستگاه

طیف‌سنج نشری پلاسمای جفت شده القایی مدل Varian 735 ES.

قدرت RF ژنراتور	۱۱۰۰ Watts
قدرت RF بازتابی	<۵ Watts
میزان ارتفاع سیم‌پیچ از تورچ	۱۵ mm
منفذ لوله ورودی (Injector)	۱ mm
آرگون مورد استفاده	آرگون مایع
فشار آرگون	۴۰ psi
سرعت گاز آرگون خنک کننده	۱۹ L/min
سرعت جریان گاز آرگون حامل آنروسل	۶۲۰ mL/min
سرعت گاز آرگون کمکی	۳۰۰ mL/min
سرعت نمونه مکیده شده	۱ mL/min/۲



شکل ۱۹- نمودار Biplot برای بررسی تأثیر اورانیم و توریم نمونه‌های مناطق بهاباد، بنستان و آسفنج.

## کتابکاری

- برزین، م.، خیرآبادی، ح. و م. افیونی، ۱۳۹۴- بررسی آلودگی برخی فلزات سنگین خاک‌های سطحی استان همدان با استفاده از شاخص‌های آلودگی، مجله علوم و فنون کشاورزی و منابع طبیعی، علوم آب و خاک، سال نوزدهم، شماره هفتاد و دوم.
- بلاغی، ز.، صادقیان، م.، قاسمی، ح. و خانعلی‌زاده، ع.، ۱۳۸۷- پترولوژی و ژئوشیمی سنگ‌های آذرین جنوب بهاباد (بافق-یزد)، مجله بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران، شماره شانزدهم.
- دهقانی‌زاده، م. و فلاح، ح.، ۱۳۹۱- بررسی و تحلیل جایگاه استان‌های کشور به لحاظ شاخص‌های بخش صنعت و معدن (با تاکید بر استان یزد)، دوفصلنامه برنامه و بودجه شماره ۱۰۷.
- سمایی، ز. و میرطاهری، ف. س.، ۱۳۹۳- تأسیرات توسعه شهری بر محیط زیست و نقشه پایدار برکاهش آلودگی محیط زیست، هفتمین همایش ملی و نمایشگاه تخصصی مهندسی محیط زیست، دانشگاه تهران.
- شریف‌نژاد، م. و امید، ا.، ۱۳۹۳- ارزیابی میزان توسعه یافتگی شهرستان‌های استان یزد بین سال‌های ۱۳۸۱ تا ۱۳۹۱، همایش ملی شهرسازی فرهنگ گرا، دانشگاه شیخ بهایی، اصفهان.
- عبودی، ع.، ایوب سخاوتی، س.، کریمی، م. و امیری، ع.، ۱۳۹۰- سنگ‌شناسی و کانی‌شناسی معدن سرب و روی کرن‌تانه گیجرکوه (بهاباد-یزد)، چهارمی همایش ملی زمین‌شناسی اقتصادی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد خوارسگان، خوارسگان.

## References

- Adams, M. J., 1995- Chemometrics in Analytical Spectroscopy. The royal Society of chemistry, Cambridge.
- Amr, M. A., Helal, A. F., Al-Kinani, A. T. and Balakrishnan, P., 2016- Journal of Environmental Radioactivity, 153; 73-87.
- Antonio D'Archivio, A., Giannitto, A., Incani, A. and Nisi, S., 2014- Food Chemistry 157; 485-489.
- Chatfield, C. and Collins, A. J., 1980- An introduction to multivariate Analysis. Chapman & Hall, London.
- Cruz, S. M., Schmidt, L., Dalla Nora, F. M., Pedrotti, M. F., Bizzi, C. A., Barin, J. S. and Flores, E. M. M., 2015- Microchemical Journal 123; 28-32.
- Dados, A., Kartsiouli, E., Chatzimitakos, Th., Papastephanou, C. and Stalikas, C. D., 2014- Talanta 130; 142-147.
- Demetriades, A. and Birke, M., 2015- Urban geochemical mapping manual: Sampling, Sample preparation, Analysis, Quality control check, Statistical processing and Map plotting. EuroGeoSurveys, Brussels.
- Duan, X., Zhang, J. and Bu, F., 2015- Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 111; 87-91.
- Flury, B. and Riedwyl, H., 1988- Multivariate Statistics- A practical Approach. Chapman & Hall, London.
- Guoxin, G., Lai, Chen, G. and Chen, T., 2016- Food Chemistry 190; 158-163.
- Kruzlicova, D., Fiket, Ž. and Kniewald, G., 2013-Food Research International 54; 621-626.
- Labrecque, Ch., Lebed, P. J. and Larivière, D., 2016- Journal of Environmental Radioactivity 155–156 ( ) 15-22.
- Liu, C., Hua, Zh., Bai, Y. and Liu, Y., 2014- Forensic Science International 239; 37-43.
- Luis, G., Rubio, C., Revert, C., Espinosa, A., González-Weller, D., Gutiérrez, A. J. and Hardisson, A., 2015- Journal of Food Composition and Analysis 39; 48-54.
- Maher, W., Krikowa, F. and Foster, S., 2016- Microchemical Journal 126 ( ) 92-95.
- Manly, B. F. J., 1994- Multivariate Statistical Methods - A Primer. 2nd Edn. Chapman & Hall, London .
- Martens, H. and Neas, T., 1989- Multivariate Calibration. John Wiley and Sons Ltd, Chichester.
- Martin, T. D. and Martin, E. R., 1990- Method 2007, Revision 3.0.
- Martin, T. D., Brockhoff, C. A. and Creed, J. T., 1991- S.E. Long (Technology Applications Inc.) Method 200.7, Revision 3.3.
- Martin, T. D., Brockhoff, C. A. and Creed, J. T., 1994- EMMC Methods Work Group - Method 200.7, Revision 4.4.
- Nakata, K., Okamoto, Y., Ishizaka, S. and Fujiwara, T., 2016- Talanta 150; 434-439.
- Niazi, A. and Veyseh, S., 2015- 5th Iranian Chemometrics, Tehran University, Iran.
- Otto, M., 1999- Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. Wiley- VCH, Weinhein.
- Pietilä, H., Perämäki, P., Piispanen, J., Starr, M., Nieminen, T., Kantola, M. and Ukonmaanaho, L., 2015- Chemosphere, 124; 47-53.
- Pornwilard, M. M., Hansawek, R., Shiowatana, J. and Siripinyanond, A., 2011- International Journal of Mass Spectrometry 306; 57– 62.
- Silva, S. G., Nóbrega, J. A., Jones, B. T. and Donati, G. L., 2014- Microchemical Journal 117; 250-254.
- Sinkov, N. A., Sandercock, P. M. L. and Harynk, J. J., 2014- Forensic Science International 235. 24–31.
- Standard method by code number of D 4698-92.
- USEPA-ICP Users Group (Edited by T.D. Martin and J.F. Kopp) - Method 2007, Revision 1.
- Vandeginste, B. G. M., Massart, D. L., Buydens, L. M. C., De Jong, S., Lewi, P. L. and Smeyers-Verbeek, J., 1998- Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part B., Elsevier, Amsterdam.
- Varmuza, K., Filzmoser, P., Hilchenbach, M., Krüger, H. and Silén, J., 2014- Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 138; 64-71.
- Yamashita, Y. and Wakahara, T., 2016- Pattern Recognition 52; 459-470.
- Yang, X., Chi, M., Wang, Q. and Zhang, W., 2015- Analytica Chimica Acta 869; 11-20.
- Zhuang, H., Ni, Y. and Kokot, S., 2014- Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 135; 183-191.

## Investigation of soil samples distribution in Bahabad area by ICP-MS, ICP-OES and geochemometrics analysis

S. Veysheh<sup>1\*</sup>, A. Niazi<sup>2</sup> and J. Ghassemi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ph.D., Department of Chemistry, Islamic Azad University, Arak Branch, Arak, Iran

<sup>2</sup>Professor, Department of Chemistry, University of Tehran, Tehran, Iran

Received: 2016 February 08

Accepted: 2016 May 08

### Abstract

In this research, distribution and effect of elements on soil samples in Bahabad, Yazd Province, is presented according to analysis of different elements using ICP-MS, ICP-OES, AF and methods of Geochemometrics. For this purpose, 156 samples were taken from Bahabad, Asfij and Banestan areas and analyzed after sample preparation. In order to investigate distribution of soil samples in the area and the role of effective elements in this distribution, the study was performed in three separate phases, including base elements (Zn, Cu, Sn, Ni, Co, W, Fe, Pb), heavy elements (Cd, Hg, As, Cr, B), and Uranium and Thorium. To explore soil sample distributions, Geochemometrics methods were used, which are defined as computerized, statistical, mathematical and graphical approaches to better understand geoscience data. Therefore, Principal Component Analysis (PCA), which is a factor analysis method, was used to determine the distribution and effect of elements on samples. It is worth mentioning that some of the most important results of PCA are score and loading of Biplot diagram that are used for proper interpretation of data. Also, K-Nearest Neighbor method (KNN) was used to classify and obtain correlation of the studied elements. Results are applicable to aspects such as Medical Geology, Environmental Geology and Mineral Exploration in order to perform better classification of elements, understanding pollution or mineral sources, and exploring anomalies. Geochemometrics was presented for the first time in this article.

**Keywords:** Geochemometrics, Classification, Parallel factors analysis, K\_Nearrest Neighbor (KNN), Soil sample, ICP-MS, ICP-OES.

For Persian Version see pages 245 to 254

\*Corresponding author: S. Veysheh; E-mail: somayeh.veysheh@gmail.com

Archive of SID