

HỒ VIỆT QUÝ

# CƠ SỞ HOÁ HỌC PHÂN TÍCH HIỆN ĐẠI

TẬP 1

**CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH HOÁ HỌC**



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

GS. TS. HỒ VIỆT QUÝ

---

---

CƠ SỞ  
HOÁ HỌC PHÂN TÍCH  
HIỆN ĐẠI

---

---

TẬP 1

CÁC PHƯƠNG PHÁP  
PHÂN TÍCH HOÁ HỌC

*(Tái bản lần thứ hai)*

NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

---

Mã số: 01.01.78/869 - ĐH 2008

## LỜI NÓI ĐẦU

Hoá học phân tích hiện đại thực chất là ngành phân tích hiện đại đóng vai trò rất quan trọng trong khoa học, kỹ thuật và đời sống, trong nghiên cứu khoa học; phát triển nền kinh tế quốc dân, điều tra cơ bản để khai thác tiềm năng, tài nguyên khoáng sản của đất nước; đánh giá chất lượng sản phẩm; tăng tiềm lực và phương tiện để bảo vệ Tổ quốc.

Hoá học phân tích ngày nay dựa trên hệ thống các phương pháp có sử dụng thành tựu của nhiều ngành khoa học có liên quan như: Hoá học, Vật lý, Toán học - Tin học, Sinh học, môi trường, vũ trụ, Hải dương học, Địa chất, Địa lý, v.v. Đây là một ngành khoa học tổng hợp có sự tích hợp cao của nhiều ngành khoa học tự nhiên mà mục đích cuối cùng là đem lại lợi ích tối đa cho khoa học, đời sống và sự phát triển, phồn vinh của đất nước.

Cơ sở của hoá học phân tích hiện đại bao gồm: phân tích hoá học (phân tích cổ điển); phân tích lý - hoá; phân tích vật lý, toán học và tin học ứng dụng trong hoá học; phân tích môi trường, phân tích các sản phẩm công, nông nghiệp, thực phẩm; phân tích sinh hoá, địa hoá. v.v.

Nhiệm vụ cơ bản của hoá học phân tích ngày nay là phân tích định tính, định lượng, xác định cấu trúc, đánh giá kết quả và chất lượng sản phẩm, tách, phân chia làm sạch, điều chế các hợp chất siêu tinh khiết. v.v.

Hoá học phân tích còn có nhiệm vụ điều tra, đánh giá, khai thác tài nguyên của đất nước.

"Cơ sở của hoá học phân tích hiện đại" là giáo trình chủ yếu được dùng cho các loại hình đào tạo đại học, cao học, nghiên cứu sinh các hệ chính quy, tại chức, từ xa. Đây cũng là nguồn giáo trình dùng trong các trường Cao đẳng về hoá học phân tích. Giáo trình này còn là nguồn tài liệu tham khảo tốt cho giáo viên PTTT để dạy tốt môn hoá học, tham khảo cho kỹ sư, kỹ thuật viên ở các phòng thí nghiệm, cán bộ nghiên cứu, sinh viên, học viên cao học và nghiên cứu sinh để hoàn thành các luận án, đề tài NCKH.v.v.

Trong quá trình biên soạn bộ giáo trình này, tác giả đã cố gắng tập hợp chọn lọc tư liệu và cập nhật của những ngành khoa học có ứng dụng trong phân tích hoá học để nội dung giáo trình có thể đề cập một cách cơ bản về hệ thống các phương pháp được sử dụng trong hoá học phân tích hiện đại.

Ngày nay hoá học phân tích bao gồm một hệ thống các phương pháp của ngành phân tích hiện đại nhằm phục vụ cho các mục đích phân tích đã nêu trên.

Bộ giáo trình "Cơ sở hoá học phân tích hiện đại" được viết trên tinh thần giáo trình cốt lõi, chủ yếu có sự tích hợp giữa khoa học cơ bản và nghiệp vụ sư phạm nhằm phục vụ đào tạo đại học, trên đại học và làm tài liệu tham khảo cho nhiều đối tượng trong học tập, giảng dạy, NCKH về hoá học phân tích.

Để tiện cho việc sử dụng, bộ giáo trình này được phân làm 4 tập dựa trên cơ sở về nội dung khoa học, phương pháp giảng dạy và nghiên cứu. Độc giả quan tâm có thể sử dụng bộ giáo trình hoặc từng tập riêng. Bốn tập của bộ giáo trình được viết theo một thể thống nhất, tuần tự để có thể sử dụng, bổ sung cho nhau.

**Tập 1: Các phương pháp phân tích hoá học.**

**Tập 2: Các phương pháp phân tích lí - hoá.**

**Tập 3: Các phương pháp tách, phân chia, cô đặc và các phương pháp tổ hợp giữa phân chia - xác định các chất.**

**Tập 4: Các phương pháp vật lý và toán học thống kê ứng dụng trong hoá học.**

Để tiện cho việc vận dụng trong học tập và giảng dạy, cuối mỗi chương có đưa ra hệ thống câu hỏi, bài tập và đáp số. Do phạm vi đề cập trong bộ giáo trình khá rộng, nhiều lĩnh vực, nội dung khá phong phú, lần đầu tiên biên soạn nên không thể tránh được thiếu sót, tác giả xin chân thành cảm ơn sự góp ý của bạn đọc để nội dung của bộ giáo trình được hoàn chỉnh hơn, phục vụ tốt hơn cho các nhiệm vụ đào tạo và nghiên cứu.

*Tác giả: Hồ Viết Quý*

# **CHƯƠNG 1**

## **CÁC ĐẶC ĐIỂM CỦA HOÁ HỌC**

### **PHÂN TÍCH HIỆN ĐẠI**

#### **1.1. MỤC ĐÍCH, NHIỆM VỤ**

##### **1.1.1. Hoá học phân tích hiện đại**

Hoá học phân tích hiện đại - đây là ngành khoa học về các phương pháp nhận biết các hợp chất hoá học, về các nguyên tắc và các phương pháp xác định thành phần hoá học các chất và cấu tạo hoá học của chúng [1]. Ở đây, thành phần hoá học được hiểu là thành phần về nguyên tố, phân tử, pha và đồng vị. Các phương pháp mà hoá học phân tích đã tạo ra cho phép ta trả lời các câu hỏi: hợp chất được tạo ra từ nguyên tố nào; các chất nào tham gia vào thành phần của nó. Các phương pháp phân tích thường cho khả năng biết được cấu tử đã cho có mặt trong chất ở dạng nào, ví dụ nó ở trạng thái oxi hoá nào. Cũng có khi ta có thể đánh giá được sự phân bố không gian của các cấu tử - đây là lĩnh vực phân tích vùng. Chính hoá học phân tích nghiên cứu được các phương pháp nêu trên hay nó sử dụng được các ý định của các ngành khoa học có liên quan và lúc đó nó sẽ đưa được các ý định khoa học này vào việc phục vụ cho các mục đích của nó.

Hoá học phân tích nghiên cứu các cơ sở lý luận của các phương pháp, xác định các giới hạn ứng dụng của các phương pháp, các đặc tính về phương pháp và các đặc tính khác, đề xuất các phương pháp phân tích các đối tượng khác nhau.

Phân tích hoá học là phép phân tích cụ thể các đối tượng xác định với sự sử dụng các phương pháp của hoá học phân tích. Lĩnh vực phân tích hoá học có thể không có liên quan với công trình về phương pháp luận mà có liên quan đến sự hoàn thiện các phương pháp phân tích hoá học.

Tuy nhiên, sự phân chia trên không thật rõ ràng. Các nhà nghiên cứu, các nhà phân tích trong nhiều trường hợp nghiên cứu và hoàn thiện các phương pháp của họ về một nhóm đối tượng phân tích nào đó, hoặc chỉ nghiên cứu một nhóm nào đó. Các nhà thực hành phân tích thường xuyên gặp phải các đối tượng mới, phức tạp, khi không tìm được các điều chỉ dẫn cần thiết trong các tài liệu thì nhiều khi họ phải tự nghiên cứu lấy các vấn đề này.

Phương pháp và đối tượng phân tích - đây là một sự thống nhất biện chứng và không thể tách rời khỏi nhau. Do vậy mà tiếp tục ta không nên phân biệt hoá học phân tích và phép phân tích hoá học. Phù hợp với các mục đích đặt ra, hoá học phân tích được phân ra: phân tích định tính và phân tích định lượng, Phép phân tích định tính cho biết đối tượng phân tích tạo ra từ các chất nào, phân tích định lượng cho ta các thông báo về hàm lượng định lượng của tất cả hay các cấu tử riêng mà người phân tích quan tâm. Khi xác định các vết vi lượng thì ranh giới giữa các dạng phân tích này có khi bị xoá nhoà.

Nếu như dùng các phương tiện và phương pháp mà hoá phân tích đã sử dụng để làm cơ sở phân loại thì hoá học phân tích được chia thành các phương pháp phân chia và các phương pháp xác định (các chất, các cấu phân v.v.). Các phương pháp phân chia gồm có: tất cả các dạng sắc ký, chiết, kết tủa và cộng kết, điện di và điện phân, chưng cất và nhiều phương pháp khác.

Các phương pháp xác định được quy ước phân thành các phương pháp hoá học, lí - hoá và vật lý. Thuộc nhóm các phương pháp hoá học là các phương pháp phân tích khối lượng và các phương pháp phân tích thể tích (phân tích chuẩn độ); thuộc nhóm các phương pháp lí - hoá, chủ yếu gồm các phương pháp điện hoá, trắc quang và huỳnh quang; thuộc nhóm phân tích vật lý gồm các phương pháp phân tích quang phổ, vật lý hạt nhân và các phương pháp khác.

Sự quy ước về cách phân chia này được thấy rõ trong ví dụ của các phương pháp dùng các phần khác nhau của phổ điện từ:

phép đo phổ hồng ngoại và phép đo phổ Ronghen thuộc nhóm các phương pháp vật lý, còn phép đo màu quang điện và phổ trắc quang dựa trên việc dùng vùng phổ khả kiến và tử ngoại gần thì thuộc nhóm các phương pháp phân tích lí - hoá. Điều này do: trong các phương pháp so màu quang điện và quang phổ thường dùng các phản ứng hoá học để tạo ra các hợp chất hấp thụ ánh sáng [1:3].

Các phương pháp tổ hợp tách và xác định (được phát triển mạnh trong những năm gần đây) là rất lý thú. Một ví dụ điển hình là phép sắc ký khí. Trong một máy, ở đây tổ hợp cột sắc ký đảm bảo cho sự phân chia các chất và một detector (đầu dò) để xác định hàm lượng các chất này [1].

Các phương pháp của hoá học phân tích dựa trên các nguyên tắc khác nhau thường từ các lĩnh vực của một ngành khoa học cách xa nó. Hoá học phân tích hiện đại thường sử dụng được các thành tựu của nhiều ngành khoa học có liên quan để dùng cho các mục đích của nó. Phương pháp luận như một phần cơ sở của hoá học phân tích hiện đại được chú ý nhiều.

Những đòi hỏi (yêu cầu) cơ bản của hoá học phân tích hiện đại là: độ đúng, độ lặp tốt của các kết quả phân tích, giới hạn phát hiện thấp, độ chọn lọc cao, tốc độ phân tích nhanh, phép phân tích đơn giản, khả năng tự động hoá dễ dàng [1]. Trong các trường hợp đặc biệt cần dùng phép xác định điểm (xác định trên một tiết diện nhỏ), phân tích ở một khoảng cách xa (phân tích từ xa) không có sự tiếp xúc trực tiếp với đối tượng phân tích) và phép phân tích không có sự phá huỷ mẫu (nói chính xác, có sự phá huỷ một lượng mẫu vô cùng nhỏ). Đối với các phép xác định đại trà thì yếu tố kinh tế có ý nghĩa quan trọng. Ta cần hiểu rằng không phải tất cả các yêu cầu này được đáp ứng ngay cho một phương pháp, nhưng chúng phản ánh những xu thế cơ bản của việc phát triển của hoá học phân tích hiện đại.

Việc hoàn thành các yêu cầu nêu trên có thể được thực hiện trên cơ sở công cụ hoá rộng rãi phép phân tích hoá học, nói chính



xác hơn, do kết quả của việc sử dụng các phương pháp vật lý và lí - hoá hiện đại. Xu hướng tăng vai trò của các phương pháp phân tích công cụ là hiển nhiên, mặc dù các phương pháp hoá học (cổ điển) vẫn đóng một vai trò quan trọng. Một trong các đặc tính quan trọng của sự phát triển của khoa học là sự toán học hoá trong thời đại ngày nay và hoá học phân tích cũng không phải là trường hợp ngoại lệ. Ở đây các cách sử dụng toán học là rất đa dạng: xử lý thống kê các kết quả, ứng dụng lý thuyết thông báo khi xét các cơ sở về phương pháp của phân tích hoá học, kế hoạch hoá các thực nghiệm, tính các cân bằng ion nhờ các máy tính điện tử (MTĐT), đặc biệt có sự tạo ra các cấu trúc tổ hợp máy phân tích - máy tính điện tử. Các phương pháp toán học, tính toán đã thâm nhập thực sự vào thực hành của công việc phòng thí nghiệm.

Ở khắp các nước trên thế giới hoá học phân tích được sự chú ý, đầu tư lớn để phục vụ cho công tác nghiên cứu, kiểm tra sản xuất, đáp ứng nhiều nhu cầu của công nghiệp nguyên tử, điện tử, hoá học, luyện kim đen và màu, đất hiếm, nghiên cứu và khai thác quặng mỏ, phục vụ cho nông nghiệp, phân tích ô nhiễm môi trường, đánh giá chất lượng của sản phẩm.v.v..

### **1.1.2. Các dạng phân tích, giới hạn phát hiện [1;4]**

Khi nói về một phép phân tích hoá học người ta thường hiểu về phép xác định thành phần nguyên tố của mẫu. Đây thực sự là một kiểu phân tích phổ biến nhất. Bằng cách tiến hành phép phân tích nguyên tố ta có thể trả lời câu hỏi: đối tượng phân tích tạo ra từ các nguyên tố nào, nồng độ hay hàm lượng của nó bao nhiêu, ở đây người ta thường phân ra phép phân tích các chất vĩ mô (lượng lớn) và chất vi mô (lượng vết).

Tuy nhiên nhiệm vụ của hoá học phân tích không chỉ giới hạn ở phép phân tích này. Ngoài phép phân tích nguyên tố người ta còn tiến hành các phép phân tích pha (vật chất), phân tử và đồng vị và cả phép xác định các nhóm chức.

Khác với phép phân tích nguyên tố, phép phân tích pha trả lời câu hỏi là: chất mà ta quan tâm ở trong đối tượng phân tích nằm ở dạng nào và hàm lượng của nó là bao nhiêu. Trong trường hợp này thường cần phải xác định các hợp chất tạo được trong đối tượng phân tích ở các pha riêng. Nhiều khi người ta xếp phép xác định các dạng của chất không cho các pha tồn tại độc lập vào loại phân tích pha. Ví dụ đây có thể là các trạng thái khác nhau của sự oxi hoá của nguyên tố.

Một trong các phương pháp phân tích pha là sự hoà tan chọn lọc một dạng của chất cần thiết với một phép phân tích tiếp tục của dung dịch nhận được. Sau đó, nếu cần thì người ta hoà tan một cách chọn lọc dạng thứ hai.v.v.. Tất nhiên, các dung môi chọn lọc, cần được chọn trước. Người ta thường sử dụng sự phân chia điện hoá dựa trên sự khác nhau của các đặc tính điện hoá các dạng riêng biệt, hoạt động của từ trường hay các phương pháp phân chia khác. Một phương pháp khác là phép phân tích vi pha trực tiếp ngay trong đối tượng phân tích. Điều này đạt được bằng cách dùng các phương pháp vật lý của phép phân tích vùng - phép vi phân tích phổ Ronghen, phép vi phân tích quang phổ laze v.v.

Trong phép phân tích các hợp chất hữu cơ và cơ kim, ngoài phép phân tích nguyên tố ta cũng gặp phép phân tích “pha”. Điều này có liên quan đến việc nhận biết các hợp chất, các phân tử. Ta biết được các hợp chất nào có mặt trong đối tượng phân tích và nồng độ của chúng (hay hàm lượng). Phép phân tích này được gọi là phép phân tích phân tử. Một ví dụ phổ biến là phép phân tích các hỗn hợp phức tạp của các hợp chất hữu cơ, ví dụ bằng phương pháp sắc ký khí. Phép phân tích phân tử cũng có, ý nghĩa đối với các đối tượng vô cơ đặc biệt đối với các hỗn hợp hơi. Ví dụ phép xác định các chất cơ bản trong không khí và các vết của oxit cacbon, ozon, các oxit nitơ hay lưu huỳnh - về bản chất đây là phép phân tích phân tử.

Đối với các nhà hoá học hữu cơ một dạng phân tích rất quan trọng, trung gian giữa phân tích nguyên tố và phân tích phân tử là phép xác định các nhóm chức. Trong trường hợp này người ta xác