Лекция 15. Химиялық талдау дамуының тенденциялары мен болашағы.

Аналитикалық химия – әртүрлі қосылыстар мен заттардың құрамын анализдеу әдістері туралы ғылым. Олай болса, аналитикалық химияның пәні ретінде анализдің жаңа әдістерін жасауды, анализді практика жүзінде қолдануды және анализ әдістерін терең зерттеу арқылы олардың теориялық негізін қалыптастыруды айтуға болады.

Аналитикалық химия бұл білімді қалыптастырып және оны бір жүйеге келтіретін пән ғана емес, ол қоғам өмірінде практикалық мәні өте зор ғылым.

Химиялық анализді тиімді түрде жүргізбейінше табиғатты қорғау және денсаулық сақтау жүйелері мен қауіпсіздік комплекстерін іске қосу және жандыру, оларды одан әрі дамыту мүмкін болмайды.

Аналитикалық химияда қолданылатын әдістер табиғи зат неден тұрады, оның құрамына қандай компоненттер кіреді, олардың сандық мөлшерлері мен концентрациялары қандай деген сұрақтарға толық жауап бере алады. Сонымен қатар аналитикалық химияның мақсаты анализ әдістерінің қолданылу мүмкіншіліктері мен метрологиялық аспектілерін анықтау және әртүрлі объектілер анализінің әдістемесін жасау болып табылады. Аналитикалық химия бұл таңғажайып ғылыми ізденістердің үлкен бір орталығы деуге де болады.

Демек, аналитикалық химия заттың химиялық құрамын анықтауға қажетті химиялық анализ әдістерін жасап, сол әдістерді жүзеге асырумен және олардың теориялық негіздерін зерттеумен шұғылданатын химия ғылымының бір саласы.

Аналитикалық химия студенттердің ойлау қабілеттерін қалыптастыра отырып, химиялық анализді және әртүрлі ғылыми-зерттеу тәсілдерін жүргізуді үйретеді.

Жоғары оқу орындарында оқу жоспары бойынша аналитикалық химияға бөлінетін уақыт көбінесе лабораториялық практикумға беріледі. Алайда студент жұмыстың теориялық негізін жетік білмесе лабораториялық жұмыс бойынша анализдің жеке сатыларын тек механикалық жолмен ғана жүргізуі мүмкін. Бұндай жағдайда терең білімді қалыптастыру мүмкін болмайды. Аналитикалық химияның теориялық негіздерін жақсы меңгергенде ғана химиялық процестерді саналы түрде жүргізіп, зерттелетін зат компонеттерінің сапалық және сандық құрамын анықтауға қажетті жағдайларды жасауға болады.

Оқулықта аналитикалық химияның теориялық та, практикалық та маңыздылығын ескере отырып, ерітіндіде жүретін әртүрлі гомогендік және гетерогендік тепе-теңдіктер, оларды ескеру және есептеу мәселелеріне, соның ішінде ерітіндіде бір уақытта бірнеше реакция қатар жүргендегі тепе-теңдіктерге ерекше көңіл бөлінді. Химиялық және физика-химиялық әдістердің теориялық негіздері, олардың ерекшеліктері мен қолданылу мүмкіншіліктері де кең түрде қарастырылды.

**АНАЛИТИКАЛЫҚ ХИМИЯНЫҢ АЛАТЫН ОРНЫ**

**ЖӘНЕ ОНЫҢ НЕГІЗГІ ДАМУ КЕЗЕҢДЕРІ**

1. **Аналитикалық химия пәні және оның алатын орны**

Аналитикалық химия заттың химиялық құрамы мен құрылымын анықтау әдістері туралы ғылым. Әрине бұл анықтама оның мәнін толық ашып көрсетеді деуге болмайды. Аналитикалық химияның мақсаты – анализдеу әдістерін жасау және оны тәжірибе жүзінде қолдану, сонымен бірге аналитикалық әдістердің теориялық негіздерін кеңінен зерттеу болып табылады. Атап айтқанда, әртүрлі орталарда және түрлі агрегаттық күйлерде болатын элементтер мен олардың қосылыстарын зерттеу, координациялық қосылыстардың құрамы мен тұрақтылығын, заттың оптикалық, электрохимиялық және басқа да сипаттамаларын анықтау, химиялық реакциялардың жылдамдықтарын зерттеу, әдістердің метрологиялық сипаттамаларын анықтау және т.б. көптеген сұрақтар. Әсіресе анализдің жаңа әдістерін іздеу және ғылым мен техниканың заманауи жетістіктерін аналитикалық мақсаттарда қолдануға қазіргі кезде қатты көңіл бөлінеді.

Практикалық мақсаттарда әрдайым толық химиялық анализ жүргізу қажет бола бермейді. Көп жағдайда материалдың сапасын, технологиялық сипаттамаларын, эксплуатациялық қасиеттерін, кейде екі-үш немесе төрт-бес аса маңызды компоненттерді ғана анықтаумен шектеледі.

Қойылған мақсаттарға, талданатын заттың қасиеттеріне және тағы да басқа шарттарға байланысты заттардың құрамы әртүрлі өрнектеледі. Заттың химиялық құрамы элементтердің немесе олардың оксидтерінің, болмаса басқа да қосылыстарының массалық үлесімен (%), сонымен бірге үлгіде шын мәнінде кездесетін химиялық қосылыстардың немесе фазалардың, изотоптардың және т.б. болуымен сипатталады. Құймалардың құрамы әдетте құрамдас элементтердің массалық үлесімен (%) сипатталады; тау жыныстарының, рудалардың, минералдардың және т.б. құрамы олардың қандай да бір қосылыстарына, көбінесе оксидтеріне шаққандағы элементтердің құрамымен анықталады. Талданатын үлгіде кездесетін қандайда бір элементтің жеке химиялық қосылыстар, формалар түрінде сынақта болуын анықтау мақсатындағы фазалық немесе заттық анализ әлдеқайда күрделі. Органикалық қосылыстарды анализдеу кезін­де жеке элементтерді (көміртегі, сутегі, азот және т.б.) анықтаумен қатар молекулярлы және функционалды анализ жиі жүргізіледі (яғни жеке химиялық қосылыстар, функционалды топтар және т.б. анықталады).

Аналитикалық химияның теориялық негізін Д.И. Менделеевтің периодтық заңы, зат массасы мен энергияның сақталу заңдары, зат құрамының тұрақтылығы, әрекеттесуші массалар заңдары сияқты жаратылыстанудың негізгі заңдары құрайды. Аналитикалық химия физикамен, бейорганикалық, органикалық, физикалық және коллоидтық химиямен, электрохимиямен, химиялық термодинамикамен, ерітінділер теориясымен, метрологиямен, ақпарат теориясымен және басқа көптеген ғылымдармен тығыз байланысты. Мысалы, анализдің спектралды әдістері физикалық теориялар негізінде қарқынды дамуда, электроаналитикалық әдістерде теориялық электрохимия мен ерітінділер термодинамикасының ұстанымдары негізге алынады. Заманауи аналитикалық химияны координациялық қосылыстар, кванттық-химиялық әдістер және зат құрылысы теориясы, реакциялар кинетикасы және т.б. негізгі ілімдерсіз елестету мүмкін емес. Осындай ғылымдардың жетістіктерін қолдану арқылы аналити­калық химияның теориялық негізі байып, оның мүмкіндіктері кеңейіп, жаңа міндеттерді шешуге мүмкіндік алады. Сонымен қатар аналитикалық химияда жоғарыда айтылған ғылымдардың және өндірістің тұтас бір салаларының дамуына маңызды әсерін тигізеді, оларға анализдің жетілдірілген әдістерін ұсынып, дамудың жаңа мүмкіндіктерін ашады.

Аналитикалық химияның басқа ғылымдармен, әсіресе өндіріс салаларымен тығыз байланысты болуы оның маңызды ерекшеліктерінің бірі болып табылады. Аналитикалық химия­дағы анализ бен синтездің бір-бірімен тығыз байланысты екенінде айта кеткен дұрыс. Анализ түсінігі әдетте заттарды құрамдас бөліктерге бөлумен ассоциацияланады, бірақ химия­лық анализ бұл көбінесе өзіне тән бояуы бар, нашар еритін және кристалдарының өзіне тән пішіні бар қосылыстардың синтезіне негізделеді. Сонымен бірге, синтездің нәтижесі әдетте анализ арқылы бақыланатындығы да анализ бен синтездің бірлігін көрсетеді.

Аналитикалық химияның ғылыми және тәжірибелік маңызы өте зор. Негізгі химиялық заңдардың барлығы дерлік осы аналитикалық химияның әдістерінің көмегімен ашылған. Әр түрлі материалдардың, бұйымдардың, рудалардың, минералдар­дың, ай топырағының, алыс планеталар мен басқа да аспан денелерінің құрамы аналитикалық химия әдістерімен анықталған. Периодтық жүйенің толық бір қатарының ашылуы аналитикалық химияның нақты әдістерін қолдану арқылы ғана мүмкін болғандығы белгілі.

Заманауи химиялық зерттеулердің ешқайсысы, жаңа заттарды синтездеу, жаңа технологиялық тізбекті жасау немесе өндірісті интенсивтендіру болсын, өнімнің сапасын арттыру және т.б. болсын, аналитикалық химия әдістерінсіз олардың іске асуы мүмкін емес.

**3. Аналитикалық химияда қолданылатын әдістер**

Қысқаша айтқанда, аналитикалық химия – химиялық жүйе­нің құрамын анықтау әдістері жөніндегі ғылым. Химиялық жүйе – бұл жеке қосылыс, заттар қоспасы немесе қандай да болмасын бір материал. Заттың сапалық және сандық құрамы болады. Сапалық құрам – зат құрамындағы белгілі бір элемент­тердің, функционалдық топтардың, иондардың бар екендігін көрсетеді. Сандық құрам – зат құрамындағы белгілі бір бөлшектердің мөлшерін көрсетеді. Сапалық және сандық құрамдарды химиялық анализ әдістері арқылы анықтайды. Химиялық анализ әдістері: 1) химиялық; 2) физикалық; 3) физика-химиялық; 4) биологиялық; 5) гибридті деп топтастырылады.

Химиялық әдістер – химиялық реакцияларға негізделген, анализдің эффектісін визуальды түрде көзбен көріп байқауға болады.

Физикалық әдістер – заттардың физикалық қасиеттерін өлшеуге негізделген, бұл әдісте химиялық реакциялар қолданылмайды. Мысалы: поляризациялану кеңістігінің ауысуы, жарық сәулесінің ерітінде сынуы, заттардың оптикалық спектрлері.

Физика-химиялық әдістер – химиялық немесе электрохимиялық реакциялардың жүруі барысында заттардың физикалық қасиеттерінің өзгеруін байқауға негізделген әдістер.

Физикалық және физика-химиялық әдістерді біріктіріп, құралдық (интрументальды) әдістер деп атайды, өйткені оларды жүзеге асыру үшін міндетті түрде әртүрлі құрылғылар мен қондырғылар қолданылады.

Биологиялық әдістер – әртүрлі объектілердің биологиялық активтілігін зерттеуге негізделген және химиялық реагенттердің биологиялық объектілерге әсерін зерттеуге негізделген әдістер.

Аналитикалық химияда бөлу әдістері және анықтау әдістері бар. Бөлу әдістерінің негізгі мақсаты кедергі келтіретін компоненттерді бөлу немесе анықталатын компоненттерді сандық жағынан анықтауға қолайлы түрде бөліп алу болып табылады. Бірақ, көбінесе, қызықтыратын компонентті анықтау алдын-ала бөлусіз, сынақтың өзінде-ақ жүргізіледі. Кейбір жағдайларда бөлу және анықтау әдістері бір-бірімен тығыз байланыста болып, толық бір әдісті құрайды. Осындай әдіске газды хроматография жатады. Хроматография процесінде қос­паны жеке компоненттерге бөледі және олардың сандық құрамы анықталады. Анализдің мұндай әдістері бөлу мен анықтаудың бір-бірімен тығыз байланысты екенін көрсетеді және олар гибридті әдістер деп аталады.

Аналитикалық химияның әдістері әртүрлі принциптер негізінде классификацияланады. Оларды анализге алынған заттың массасына, анықтау негізіне жататын заттың қасиетіне, заттың класына, анализдің мақсаттық бағытталуына және т.б. байланысты бөлуге болады.

Анализде қолданылатын реакцияны орындау үшін алына­тын заттың мөлшеріне байланысты, яғни алынатын нақты мөлшерге байланысты химиялық анализдің мынадай түрлерін ажыратады. Макроанализ (грамм-әдіс): заттың 1-10 граммы, жартылаймикроанализ (сантиграмм-әдіс): 0,05-0,5 граммы, микроанализ (миллиграмм-әдіс): 10-3-10-6 граммы, ультра­микроанализ (микрограмм-әдіс): 10-6-10-9 граммы және суб­микроанализ (нанограмм-әдіс): 10-9 -10-12 граммы алынады.

Химиялық лабораторияда оқыту мақсатында жарты­лаймикроанализ жүргізіледі. Жартылаймикроанализде сезімталдығы жоғары реакциялар қолданылады. Бұндай реакциялар анықталатын ерітіндідегі бөлшектердің өте азғантай мөлшерін анықтауға мүмкіндік береді. Реакциялар микрокристаллоскопиялық немесе тамшылы әдістермен орындалады.

Микрокристаллоскопиялық әдісте реакциялар әдетте заттық шыныда жүргізіледі. Анықталатын ионның бар-жоғын кристал­дар формасын микроскоп арқылы қарап болжайды.

Тамшылы әдісте ерітінді түсін өзгерте жүретін немесе нәти­жесінде түсті қосылыстар немесе түсті тұнба түзілетін анали­тикалық реакциялар қолданылады. Бұндай реакциялар көбінесе фильтр қағазында орындалады.

Аналитикалық реакция – бұл нәтижесінде аналитикалық эффект немесе аналитикалық сигнал пайда болатын реакциялар. Аналитикалық реакциялар «құрғақ» және «ылғал» жолмен орындалады. «Құрғақ» реакциялар қосымша роль атқарады және алдын-ала жүргізілетін зерттеулерде, сонымен қатар «ылғал» реакция жүргізу мүмкін болмайтын жағдайларда жасалады. Көбіне көп «ылғал» реакциялар қолданылады. Оларды жүзеге асыру үшін алдымен затты ерітеді. Еріткіш ретінде әдетте су, кейде қышқылдар мен сілті қолданады.

Бейорганикалық заттардың сапалық анализінде негізінен тұздар, қышқылдар және сілтілер ерітінділерімен жұмыс жасайды. Бұл заттар электролиттер болып табылады, яғни олар сулы ерітінділерінде иондарға диссоциацияланады. Сондықтан реакция иондар арасында жүреді, яғни сапалық анализде элементтерді емес, иондарды ашу реакциялары жасалады.

Белгілі бір аналитикалық реакцияны орындау үшін белгілі бір жағдай жасау қажет:

1) ерітінді ортасы (рН), мысалы кейбір тұнбалар қышқыл­дарда жақсы ериді, сондықтан орта қышқыл болса, онда тұнба түзілмейді немесе кейбір тұнбалар сілтілерде жақсы ериді, яғни бұндай тұнба сілтілі ортада түзілмейді. Ал кейбіреулері қыш­қыл­дарда да, сілтілерде де ериді, оны тек бейтарап ортада ғана алуға болады. Демек, реакция толық жүруі үшін қажетті орта болуы керек.

2) ерітінді температурасы. Кейбір реакцияларды салқын ортада жүргізу керек болады немесе керісінше, ал ерігіш тұнбалар температура артқан сайын ери түседі.

3) ерітіндідегі анықталатын ионның концентрациясы жеткілікті түрде мейлінше үлкен болуы керек. Концентрация өте аз болса реакция дұрыс жүрмейді. Мысалы, тұнба ерігіш болса, тұнба түзетін ион концентрациясы тұнбаның ерігіштігінен жоғары болған жағдайда ғана тұнба түзіледі. Ал қиын еритін тұнба үшін аз ғана концентрацияның өзі жеткілікті болады.

Химиялық анализде қолданылатын реакцияларға мынадай талаптар қойылады: 1) реакция тез орындалатын және қайтымды болуы; 2) аналитикалық сигналы (түстің болуы, тұнбаның түзілуі, газдың бөлінуі) бар реакциялар болуы; 3) сезімталдығы жоғары реакциялар болуы; 4) таңдамалылығы жоғары реакциялар болуы керек.

Заттың қасиетіне қарай классификациялаған кезде анализ­деу әдісі өлшенетін қасиеттің атын сақтайды. Егер тұнбаның массасы өлшенетін болса, әдіс гравиметриялық деп, егер ерітін­ді түсінің интенсивтігі анықталатын болса – фотометриялық немесе спектрометриялық деп, ал егер электр қозғаушы күші (ЭҚК) өлшенетін болса – потенциометриялық деп аталады және т.б.

Көбінесе анықтау әдістерін анализдің физикалық әдістері­нің тобын айшықтай отырып, химиялық және физика-химиялық деп бөледі. Химиялық немесе классикалық анализ әдістеріне гравиметрикалық және титриметрикалық әдістерді жатқызады. Физика-химиялық және физикалық анализ әдістерінде заттың эмиссионды спектроскопияда спектралды сызығының интенсивтігі, полярографияда диффузионды токтың шамасы сияқты және т.б. қасиеттері байқалады немесе өлшенеді.

Аналитикалық әдістердің басқа да классификациялары бар. Кейде заттардың анықталған кластарын білдіреді: металдарды анализдеу, суды анализдеу, газды анализдеу, силикаттық анализдеу, органикалық қосылыстарды элементтік анализдеу және т.б. Кейде әдістің атында мақсаттық бағытталу байқалады: соттық, өндірістік, арбиторлық және т.б. Сонымен бірге аналитикалық химияның арнайы бөлімдерін айшықтайды: фазалық анализ, мақсаты – гетерогенді жүйенің жеке фазаларын анықтау немесе заттық (рационалды) анализдеу, мақсаты – сынақтағы нақты химиялық қосылысты (мысалы, оксидтерді) анықтау. Аналитикалық химияның заманауи әдістері үшін оптикалық, электрлік және басқа өлшеу құралдарын, соның ішінде автоматты құралдарды (әртүрлі анализаторлар, титраторлар және т.б.) және реттегіш аппаратураларды қолдану тән. Химиялық анализде компьютер мен математикалық әдістерді қолдану айтарлықтай өсіп келеді. Анализдеу әдістерін стандарттау мен унификациялауды, және неғұрлым дәл әрі сенімді әдістерді қолдануды, өнім мен материалдардың сапасына қойылатын талаптарды ресми құжаттарға енгізе отырып, заң жүзінде бекітудің маңызы зор.

**4. Аналитикалық қызмет.**

**Химиялық анализдің маңызы және қолданылу аясы**

Аналитикалық химия басқа ғылым салалары сияқты ғылы­ми және қолданбалы деп бөлінеді. Қолданбалы аналитикалық химия – химиялық анализ немесе аналитикалық қызмет деп те аталады. Бұл екі сфера арасында олардың генетикалық байланыстарымен қатар олардың зерттеу аудандары да тығыз байланысты, яғни олардың ортақ мәселелері мен өзара ортақ сұрақтары да бар.

Көптеген мемлекеттерде аналитикалық қызмет жекелеген мекемелердің аналитикалық қызметінің жиынтығын құрайды, мысалы: өнеркәсіп саласында, геологияда, ауыл шаруашылығында, табиғатты қорғау мен денсаулық сақтау мекемелерінде және т.б. Америка Құрама Штаттарында мемлекеттік деңгейдегі аналитикалық қызметтер бар, мысалы қоршаған ортаны қорғау агенттіктерінде, аэронавтика мен космостық кеңістікті зерттеу бойынша; одан әрі олар бөлімдерге, қызмет көрсетуші корпорацияларға бөлінеді: кейде қызмет көрсетуші аналитикалық орталықтар жоғары оқу орындарында ашылады.

Өнеркәсіпте аналитикалық қызметті технологиялық үдеріс­терді бақылау және шикізат пен дайын өнімді бақылау деп екіге бөледі. Біріншісі, әдетте міндетті түрде жедел болуы керек, көп жағдайда үздіксіз болуы және мүмкіндігінше автомат­тандырылған болуы керек. Екіншісі, кейде үздіксіз бола отырып (мысалы, шикізатты транспортер лентасында оның құрылысын бұзбай ядролы-физикалық әдістермен анализдеу), көп жағдайда әрине дискретті, таңдамалы, бірақ дәлдікті және бірнеше компонентті анықтауды қажет етеді, әрі лабораторияда орындалады.

Кәсіпорындардың аналитикалық лабораторияларының қызметі мемлекет үшін өте маңызды.

Өндірістік лабораториялардың басты мақсаты – өндіріске күнделікті қызмет көрсету. Көптеген лабораториялар әдісте­мелік жұмыстарды да атқарады. Тиімді жұмыс атқару үшін аналитикалық-бақылау лабораториялары жаңа әдістер, реактив­тер және әртүрлі құралдар алып, үнемі толықтырылып отыруы қажет. Білікті мамандар мен заманауи жабдықтары бар көптеген қолданбалы лабораториялар ғылыми жұмыстарға да араласады. Ірі лабораторияларда негізгі мақсаты кәсіпорынның талап­тарына немесе әдістерді ұйымдастыру мен анализдеу тәсілдеріне сәйкестендірілген әдістерді жасау, іздеу, жақсарту болып табылатын арнайы әдістемелік топтар құрылады. Осындай ғылыми базаларды кәсіпорындарда жетілдірудің, өндірістік лабораторияларды аналитикалық химия саласындағы зерттеу орталықтарына айналдырудың қазіргі кезде маңызы өте зор.

Зауыттар лабораторияларындағы ғылыми зерттеулерге көмек көрсету үшін ең алдымен ғылыми-зерттеу институт­тарының осы сияқты лабораториялары, сонымен бірге жоғары оқу орындары мен академиялық ғылыми мекемелері жұмылдырылуы қажет. Лабораториялар арасында, әсіресе әр сала бойынша тәжірибе алмасу өте маңызды. Зерттеулерді ұйымдастыру және жүргізу – лаборатория қызметкерлерінің біліктілігін арттырудың ең жақсы жолы екенін ұмытпау керек.

Өнеркәсіптегі барлық химиялық анализдерді нәтижені жазып-тіркеуші және оперативті немесе экспресті анализ деп бөлуге болады. Нәтижені жазып-тіркеуші анализдердің мәліметтерін технологиялық үдеріске тікелей түзету енгізуге қолдануға болмайды, дегенмен мұндай анализдердің нәти­желерін жинақтау технологияның «созылмалы» кемшіліктерін анықтауға мүмкіндік береді. Нәтижені жазып-тіркеуші анализ­дердің мәліметтерін, анализденетін үлгі сияқты, сақтауға, өңдеуге, қайта тексеруге болады. Экспресс анализдердің жөні басқа. Әдетте мұндай анализді қайталау мүмкін емес, бірақ, ең бастысы, нәтижелі мәліметтер қажет болған жағдайда, технологиялық үдеріске өзгеріс енгізу үшін қолдануға болатындай тез алынуы керек. Өндірістік бақылаудың, әсіресе экспресті бақылаудың маңызды мақсаты – оны автоматтандыру.

Өндірістік аналитикалық бақылаудың тағы да бір маңызды аспектісі бар, ол оның экономикасы. Аналитикалық бақылаудың құны әдетте өте үлкен емес. Металлургияда ол өнім құнының 1%-нан аспайды, көбіне 0,3-0,7%-ды құрайды. Химиялық бақылауға кететін қосымша шығын өнім сапасын арттырумен, технологиялық үдерістердің жоғары тұрақтылығына жетумен өтеледі.

Аналитикалық бақылауды ұйымдастырудағы кемшілік­тердің бірі – анализ нәтижелері бойынша қабылдануы қажет болатын шешімдердің екі ұшты және анық болмауы, осыған байланысты анализдердің қайда және қашан, қаншалықты міндетті екендігі де толығымен анық болмайды. Аналитикалық бақылау жаңа өндірісті ашу мен оны игеру кезінде кең көлемде қажет болады. Технологиялық үдерістер игеріліп және тұрақ­талған сайын сынама алу нүктелерінің саны мен анализ жиілігі қысқару керек. Негізінде, бақылау қандайда бір себептерге байланысты заттардың құрамында ауытқулар болған нүктелерде сақталуы керек.