

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Список сокращений .....	3
Введение .....	4
<b>РАЗДЕЛ I. ПРАВИЛА ВЫПОЛНЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА</b>	
<b>Глава 1. Метрология химического анализа .....</b>	<b>14</b>
1.1. Химический анализ как метрологическая процедура .....	14
1.2. Основные понятия, постулаты и принципы метрологии .....	15
1.2.1. Физические величины и их измерение .....	15
1.2.2. Принцип единства измерений. Единицы физических величин. Единицы концентрации .....	17
1.2.3. Постулаты метрологии .....	19
1.2.4. Понятия погрешности и неопределенности результата измерения .....	20
1.2.5. Средства измерений, метод и методика выполнения измерений (анализа), субъекты измерений .....	21
1.3. Классификация измерений, результатов измерений и погрешностей .....	23
1.3.1. Классификация измерений .....	23
1.3.2. Классификация результатов измерений. Характеристики результатов измерений .....	24
1.3.3. Классификация погрешностей измерений .....	25
1.3.4. Сущность и проявление случайных и систематических погрешностей в химическом анализе .....	27
1.4. Случайные погрешности в химическом анализе .....	28
1.4.1. Случайные величины и их свойства. Доверительный интервал и доверительная вероятность .....	28
1.4.2. Генеральные и выборочные параметры распределения случайных величин .....	31
1.4.3. Основные виды распределения случайных величин .....	33
1.4.4. Определение вида распределения случайных величин .....	39
1.4.5. Обнаружение и исключение выбросов (промахов) .....	41
1.4.6. Результат анализа и оценка его случайной погрешности .....	42
1.4.7. Обработка результатов нескольких серий измерений (параллельных определений) .....	43
1.4.8. Статистическая оценка предела обнаружения методик количественного химического анализа. Диапазон определяемых концентраций .....	46
1.5. Систематические погрешности в химическом анализе .....	49

1.5.1. Классификация и причины возникновения систематических погрешностей .....	49
1.5.2. Расчетный способ оценки систематических погрешностей на основе общей теории погрешностей .....	51
1.5.3. Средства измерений в химическом анализе и вносимые ими систематические погрешности. Мерная посуда. Эталоны и стандартные образцы .....	52
1.5.4. Систематическая погрешность процедуры (метода) анализа .....	57
1.5.5. Расчет суммарной систематической и общей погрешностей результатов анализа .....	58
1.5.6. Форма представления результатов химического анализа и правила их округления .....	59
1.6. Метрологические аспекты разработки методик химического анализа .....	60
1.6.1. Основные принципы минимизации систематических погрешностей химического анализа .....	60
1.6.2. Обнаружение факторов, влияющих на результаты анализа, на основе дисперсионного анализа .....	61
1.6.3. Построение методик выполнения измерений .....	63
1.6.4. Оценка прецизионности, правильности и точности методик количественного химического анализа .....	64
1.6.5. Контроль точности методик количественного химического анализа .....	69
1.7. Принципы применения метрологии в химическом анализе .....	70
1.7.1. Проведение химического анализа при выполнении научных исследований .....	70
1.7.2. Проведение химического анализа объектов аналитического контроля с использованием аттестованных методик .....	71
<b>Глава 2. Правила пробоотбора .....</b>	<b>73</b>
2.1. Пробоотбор как первая стадия химического анализа.	
Виды проб .....	73
2.2. Отбор проб твердофазных объектов .....	76
2.3. Отбор жидких проб .....	88
2.4. Отбор проб газов .....	94
2.4.1. Общие сведения .....	94
2.4.2. Активный пробоотбор .....	94
2.4.3. Пассивный пробоотбор .....	99
<b>Глава 3. Математические методы и компьютеры</b>	
<b>в химическом анализе .....</b>	<b>102</b>
3.1. Компьютеры и области их применения в химическом анализе .....	102
3.2. Основные узлы и принципы функционирования компьютеров .....	103
3.3. Программное обеспечение компьютеров .....	104
3.4. Компьютерные сети .....	105
3.5. Базы аналитических данных .....	106
3.6. Электронные таблицы .....	108

3.7. Компьютерное моделирование .....	108
3.8. Сбор данных с использованием компьютеров .....	110
3.9. Методы предварительной обработки аналитического сигнала .....	112
3.10. Численные методы обработки аналитического сигнала .....	117
3.11. Метод нейронных сетей в решении задач аналитической химии .....	123
3.11.1. Основные понятия .....	123
3.11.2. Модели нейронных сетей .....	126
3.11.3. Особенности применения нейронных сетей в аналитической химии .....	127
3.11.4. Применение нейронных сетей для идентификации (классификации) оптических спектров .....	127

## РАЗДЕЛ II. ВИДЫ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

<b>Глава 4. Качественный и количественный, разведочный и подтверждающий химический анализ .....</b>	<b>130</b>
4.1. Качественный химический анализ (идентификация аналитов) .....	130
4.1.1. Основные понятия .....	130
4.1.2. Уровни идентификации органических веществ .....	131
4.1.3. Особенности идентификации с применением хроматографических методов анализа .....	133
4.2. Количественный химический анализ .....	137
4.2.1. Абсолютные и относительные методы количественного химического анализа .....	137
4.2.2. Основные схемы количественного химического анализа с использованием относительных методов .....	138
4.2.3. Стандартные образцы состава веществ и аттестованные смеси .....	145
4.2.4. Стандартные растворы .....	148
4.2.5. Стандартные газовые смеси .....	150
4.3. Разведочный и подтверждающий химический анализ .....	152
<b>Глава 5. Элементный, молекулярный и вещественный анализ .....</b>	<b>156</b>
5.1. Элементный анализ .....	156
5.1.1. Общие подходы к выбору методов элементного анализа .....	156
5.1.2. Элементный анализ органических веществ .....	160
5.2. Молекулярный и вещественный анализ .....	163
5.2.1. Общие понятия .....	163
5.2.2. Наиболее важные методы молекулярного и вещественного анализа .....	164
5.2.3. Анализ хиральных объектов .....	166
<b>Глава 6. Фазовый и структурный анализ .....</b>	<b>170</b>
6.1. Общие представления .....	170
6.2. Химические и электрохимические методы фазового анализа .....	171
6.3. Исследование кристаллических фаз методами оптической спектроскопии .....	173

6.3.1. Физические основы методов оптической спектрометрии .....	173
6.3.2. Общая схема измерительных систем .....	175
6.3.3. Методы абсорбционной спектрометрии и спектрометрия комбинационного рассеяния света .....	176
6.3.4. Люминесцентные методы .....	181
6.3.5. Методы, основанные на поляризационных и фазовых эффектах .....	183
6.4. Фазовый анализ методом рентгеновской дифракции .....	184
6.4.1. Общие принципы метода .....	184
6.4.2. Количественный рентгеноструктурный фазовый анализ .....	190
6.5. Фазовый анализ методом мёссбауэровской спектроскопии .....	191
<b>Глава 7. Изотопный анализ .....</b>	<b>195</b>
7.1. Общие представления .....	195
7.2. Определение относительного содержания стабильных изотопов .....	195
7.2.1. Общая характеристика методов .....	195
7.2.2. Масс-спектральный изотопный анализ .....	198
7.2.3. Спектральный изотопный анализ .....	201
7.3. Радиоизотопный анализ .....	204
7.3.1. Традиционная схема радиоизотопного анализа .....	204
7.3.2. Экспрессные методы радиоизотопного анализа .....	204

### **РАЗДЕЛ III. ОБЩИЕ ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**

<b>Глава 8. Автоматизация химического анализа .....</b>	<b>211</b>
8.1. Цели автоматизации и подходы к ее осуществлению .....	211
8.2. Методы проточного анализа как общий подход к автоматизации химического анализа .....	213
8.2.1. Общие представления .....	213
8.2.2. Непрерывный проточный анализ .....	214
8.2.3. Проточно-инжекционный анализ .....	216
8.2.4. Последовательный инжекционный анализ .....	220
8.2.5. Перспективные направления развития проточного анализа .....	222
8.2.6. Методы разделения и концентрирования, применяемые в проточном анализе .....	227
8.2.7. Выбор проточного метода для автоматизации химического анализа .....	230
<b>Глава 9. «Анализ уходит из лабораторий» .....</b>	<b>233</b>
9.1. Куда и как «уходит анализ из лабораторий» .....	233
9.2. Химические тест-методы как основа анализа on site .....	234
9.2.1. Общие представления .....	234
9.2.2. Индикаторные реакции и способы иммобилизации реагентов на носителях .....	235

9.2.3. Регистрация аналитического сигнала в тест-методах .....	237
9.2.4. Применение тест-методов .....	238
9.3. Химические сенсоры .....	240
9.3.1. Общие представления .....	240
9.3.2. Биосенсоры .....	241
9.3.3. Оптические сенсоры .....	242
9.3.4. Гравиметрические и термометрические сенсоры .....	243
9.4. Анализ on line .....	245
9.4.1. Общие представления .....	245
9.4.2. Общие схемы анализа on line на примере автоматизированных систем контроля для судовых экоаналитических комплексов .....	248
9.4.3. Системы анализа on line для технологического контроля .....	253
<b>Глава 10. Миниатюризация аналитических систем .....</b>	<b>255</b>
10.1. Общие принципы и направления миниатюризации аналитических систем .....	255
10.1.1. Основные понятия .....	255
10.1.2. Микрочипы и их аналитические возможности .....	256
10.1.3. Изготовление микрофлюидных чипов .....	258
10.1.4. Создание микрофлюидных потоков в микрочипах .....	260
10.1.5. Детектирование в микроаналитических системах .....	262
10.2. Области применения микроаналитических систем в химическом анализе .....	266
10.2.1. Основные направления применения микрочипов .....	266
10.2.2. Капиллярный электрофорез и мицеллярная электрокинетическая хроматография в каналах микрочипа .....	267
10.2.3. Хроматографический анализ в микрочипах .....	269
10.2.4. Анализ в потоке .....	272
10.2.5. Разделение и концентрирование в микрочипах .....	273
10.2.6. Биохимический и молекулярно-генетический анализ .....	275
 <b>РАЗДЕЛ IV. ВАЖНЕЙШИЕ ОБЪЕКТЫ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА</b>	
<b>Глава 11. Анализ минерального сырья и продукции металлургических производств .....</b>	<b>277</b>
11.1. Общая характеристика объектов и методов анализа минерального сырья .....	277
11.2. Вскрытие минеральных образцов .....	279
11.2.1. Вскрытие сплавлением .....	279
11.2.2. Вскрытие в растворах кислот .....	280
11.3. Аналитический контроль качества продукции черной металлургии .....	281
11.4. Аналитический контроль качества продукции цветной металлургии .....	283
<b>Глава 12. Анализ газовых сред .....</b>	<b>286</b>
12.1. Особенности анализа газовых сред .....	286
12.1.1. Общая характеристика объектов анализа .....	286
12.1.2. Основные схемы анализа газовых сред .....	289

12.2. Лабораторный анализ газовых сред .....	291
12.2.1. Пробоподготовка .....	291
12.2.2. Основные группы аналитов и методы их определения .....	297
12.3. Автоматический анализ газовых сред on line и in situ .....	304
12.3.1. Общие сведения о газоанализаторах и сигнализаторах .....	304
12.3.2. Газоанализаторы на принципах оптических методов .....	306
12.3.3. Электрохимические газоанализаторы .....	309
12.3.4. Газоанализаторы других типов .....	310
12.3.5. Основные типы сигнализаторов .....	312
12.4. Экспресс-анализ газовых сред on site .....	313
<b>Глава 13. Анализ воды и водных сред .....</b>	<b>315</b>
13.1. Общая характеристика объектов анализа .....	315
13.2. Определение примесного состава вод .....	320
13.2.1. Природные и сточные воды .....	320
13.2.2. Воды высокой чистоты .....	323
<b>Глава 14. Анализ объектов органической и биохимической природы .....</b>	<b>326</b>
14.1. Нефть и нефтепродукты .....	326
14.1.1. Общая характеристика объектов анализа .....	326
14.1.2. Определение компонентного состава нефтей и нефтепродуктов .....	328
14.2. Биологические объекты .....	329
14.2.1. Общая характеристика объектов анализа .....	329
14.2.2. Пробоподготовка .....	329
14.2.3. Методы анализа .....	331
14.3. Пищевые продукты .....	333
14.3.1. Общая характеристика объектов анализа .....	333
14.3.2. Пробоподготовка .....	336
14.3.3. Определение показателей качества пищевых продуктов .....	336
Приложения .....	341
Словарь терминов .....	346
Предметный указатель .....	348
Список литературы .....	356