Химиялық талдаудың жалпы принциптері (сапалық және сандық). Бейорганикалық қосылыстардан алынған дәрілік заттар

Дәріс оқытушысы:
PhD, қауымд. профессор
Оңалбек Дамира Дүйсембекқызы
d.ongalbek@satbayev.university

Кіріспе

Химиялық талдау – заттардың құрамын, құрылымын және қасиеттерін анықтайтын ғылым саласы. Ол аналитикалық химияның негізгі мазмұнын құрайды және табиғи, биологиялық, фармацевтикалық, өнеркәсіптік үлгілерді зерттеуде маңызды орын алады.

Химиялық талдаудың басты мақсаты – белгісіз заттың қандай компоненттерден тұратынын (сапалық талдау) және олардың мөлшерін (сандық талдау) анықтау.

Химиялық талдаудың мақсатына қарай жіктелуі

Сапалық химиялық талдау

- Мақсаты – заттың құрамында қандай элемент, ион немесе қосылыс барын анықтау.
- Нәтижесі – «бар/жоқ» принципі.
- Мысалы: күміс иондарының бар-жоғын хлорид ионымен тұндыру арқылы анықтау.

Сандық химиялық талдау

- Мақсаты – заттың құрамындағы компоненттердің нақты мөлшерін есептеу.
- Нәтижесі – сандық мән (массалық үлес, моль/л, пайыз, мг/л).
- Мысалы: қышқылдың концентрациясын NaOH ерітіндісімен титрлеу арқылы анықтау.

Химиялық талдаудың жіктелуі

Анықталатын компонент санына қарай

Жеке (монокомпонентті) талдау – тек бір ғана компонентті анықтау.

- Мысалы: судың қаттылығын кальций иондары бойынша анықтау.

Көп компонентті (поликомпонентті) талдау – бірнеше компонентті қатарынан анықтау.

- Мысалы: топырақ құрамындағы Ca^{2+}, Mg^{2+}, K^{+}, Na^{+} иондарын анықтау.

Химиялық талдаудың жіктелуі

Үлгінің массасына қатысты

Макроталдау – зат массасы ондаған граммнан көп болса (≥ 0,1 г).	Дәстүрлі химиялық реакциялар қолданылады.
Микроталдау – зерттелетін үлгі массасы аз (мг деңгейінде).	Жоғары сезімталдықтағы әдістер қолданылады.
Ультрамикроталдау – зат мөлшері өте аз (мкг, нг деңгейінде).	Спектроскопия, масс-спектрометрия, радиохимиялық әдістер.

Химиялық талдаудың жіктелуі

Қолданылатын әдістеріне қарай

Химиялық (классикалық) әдістер

•**Гравиметриялық талдау** – зат массасын өлшеу арқылы (тұнба, булану).

•**Титриметриялық талдау** – белгілі концентрациядағы ерітіндімен титрлеу.

Физикалық әдістер

•Салмақтық (тығыздық, масс-спектрометрия).

•Оптикалық (спектроскопия, фотометрия, рефрактометрия).

•Электрлік (өткізгіштік, потенциометрия).

Физика-химиялық әдістер

•Хроматография (қоспаларды бөлу және анықтау).

•Электрофорез.

•Поляриметрия.

•Ионометрия.

Химиялық талдаудың жіктелуі

Өлшеу дәлдігіне қарай

Шамамен (жартылай сандық) талдау

- Заттың мөлшері жуық түрде анықталады.
- Мысалы: индикатор арқылы pH-ты анықтау.

Дәл талдау

- Заттың нақты мөлшері жоғары дәлдікпен анықталады (±0,1%).
- Мысалы: стандартты ерітінділермен титрлеу.

Химиялық талдаудың жіктелуі

Уақытына қарай

- **Жедел (экспресс) талдау** – тез нәтиже алу қажет болғанда қолданылады (экология, медицинада).
- **Толық талдау** – ұзақ уақыт алатын, бірақ жоғары дәлдікті қамтамасыз ететін әдістер.

Арнайы түрлері

- **Құрылымдық талдау** – молекуланың кеңістіктегі құрылымын анықтау (ЯМР, рентгеноструктуралық талдау).
- **Изотоптық талдау** – изотоптардың мөлшерін анықтау (ядролық зерттеулерде).
- **Биохимиялық талдау** – биологиялық объектілердегі (қан, фермент, витамин) құрамды анықтау.
- **Экологиялық талдау** – ауа, су, топырақтағы зиянды заттардың мөлшерін анықтау.

Сапалық химиялық талдау

Сапалық химиялық талдау – үлгінің құрамында қандай зат, ион, элемент немесе функционалдық топ бар екенін анықтауға арналған әдістер жиынтығы.
Бұл талдаудың басты мақсаты – үлгінің **құрамын анықтау**, яғни:

- қандай катиондар мен аниондар барын,
- қандай органикалық функционалдық топтар немесе қосылыстар кездесетінін табу.

Негізгі сұрақ: *«Не бар?»*

Сапалық талдаудың міндеттері

1

Белгісіз затты анықтау, сипаттау.

2

Қоспадағы жеке компоненттерді ң бар-жоғын тексеру.

3

Химиялық реакциялар арқылы затты сәйкестендіру .

4

Зерттелетін нысанның (су, ауа, биологиялық сұйықтық, дәрілік зат) құрамын бақылау.

Сапалық талдаудың принциптері

Селективтілік – реакция тек бір затқа тән болуы керек.

1

Сезімталдық – заттың аз мөлшерін анықтау мүмкіндігі.

2

Жүйелілік – барлық мүмкін иондарды белгілі бір реттілікпен зерттеу.

3

Бақылау реакцияларының айқындылығы – түс, иіс, тұнба, газ бөліну сияқты көзге көрінетін белгілердің болуы.

Сапалық талдаудың кезеңдері

Үлгіні дайындау

- Қатты затты ұнтақтау, еріту, сүзу.
- Ерітінділерді сұйылту.

Жалпы сынақтар

- Сыртқы белгілер: түсі, иісі, агрегаттық күйі.
- Физикалық қасиеттері: еруі, балқу температурасы.

Жеке реакциялар

- Негізгі иондарды анықтау үшін арнайы реактивтер қолдану.
- Мысалы:
  - $Ag^{+} \rightarrow HCl$ қосқанда ақ тұнба AgCl;
  - $Fe^{3+} \rightarrow KSCN$ қосқанда қызыл кешен.

Жүйелі талдау

- Катиондар мен аниондарды топтарға бөлу.
- Топтық реактивтер қолдану.

Сапалық талдауда қолданылатын әдістер

Дәстүрлі химиялық әдістер

- **Тұндыру реакциялары** – иондарды тұнба түрінде бөліп шығару.
- **Түсті реакциялар** – кешен түзіп, айқын түстердің пайда болуы.
- **Газ бөліну реакциялары** – газдардың бөлінуін бақылау (CO_2, NH_3).

Физикалық әдістер

- **Жалындық сынақ (спектроскопияның қарапайым түрі)** – кейбір катиондар жалынды белгілі түске бояйды:
  - Na^+ – сары,
  - K^+ – күлгін,
  - Ba^{2+} – жасыл,
  - Cu^{2+} – көк-жасыл.
- **Спектроскопия** – заттың сәуле жұту немесе шығару қабілетіне негізделеді.

Физика-химиялық әдістер

- **Хроматография** – қоспаларды бөлу және сәйкестендіру.
- **Электрофорез** – иондардың электр өрісінде қозғалуына негізделген.

Сапалық талдау жүйесі

Катиондарды анықтау

- Катиондар 5 топқа бөлінеді (топтық реактивтерге негізделген):
- Топ – Ag^{+}, Pb^{2+}, Hg_2^{2+} (топтық реактив: HCl).
- Топ – Cu^{2+}, Cd^{2+}, Bi^{3+}, Hg^{2+} (топтық реактив: H_2S қышқыл ортада).
- Топ – Fe^{3+}, Al^{3+}, Cr^{3+} (топтық реактив: NH_4OH).
- Топ – Zn^{2+}, Mn^{2+}, Ni^{2+}, Co^{2+} (топтық реактив: H_2S сілтілі ортада).
- Топ – Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+} (топтық реактив: $(NH_4)_2CO_3$).

- **Аниондарды анықтау**
- Аниондар да бірнеше топтарға бөлінеді:
- Карбонаттар (CO_3^{2-}), сульфиттер (SO_3^{2-}) → қышқылмен әрекеттескенде газ бөледі.
- Сульфаттар (SO_4^{2-}) → Ba^{2+} ионымен тұнба береді.
- Галогенидтер (Cl^{-}, Br^{-}, I^{-}) → Ag^{+} ионымен түрлі түсті тұнба береді.

- **Мысалдар**
- **Cl^{-} ионын анықтау:**

$NaCl + AgNO_3 \rightarrow AgCl\downarrow$ (ақ тұнба)

- **Fe^{3+} ионын анықтау:**

$FeCl_3 + KSCN \rightarrow [Fe(SCN)]^{2+}$ (қанық қызыл кешен)

- **NH_4^{+} ионын анықтау:**

- $NH_4Cl + NaOH \rightarrow NH_3\uparrow + H_2O$

(Аммиактың иісі байқалады, индикатор қағаз көк түске боялады).



Сапалық талдаудың қолданылуы

Фармацевтикада – дәрілік препарат құрамындағы қоспаларды анықтау.

Экологияда – су мен ауаның құрамындағы зиянды иондарды табу.

Биологияда – фермент, витамин, ақуыз құрамын зерттеу.

Өнеркәсіпте – шикізаттың сапасын бағалау.

Сандық химиялық талдау

Сандық химиялық талдау – үлгінің құрамындағы заттардың мөлшерін (масса, көлем, концентрация, моль саны, пайыздық үлесі) анықтауға арналған әдістер жиынтығы.
Негізгі сұрақ: *«Қанша?»*
Сандық талдаудың міндеттері
1.Қоспадағы жеке компоненттердің мөлшерін анықтау.
2.Дәрілік, тағамдық, биологиялық өнімдердің сапасын тексеру.
3.Шикізаттың немесе дайын өнімнің стандарттарға сәйкестігін бақылау.
4.Технологиялық процестерді есептеу және реттеу.

Сандық талдаудың принциптері

1.Дәлдік – анықталған мөлшердің нақты шын мәнге сәйкес болуы.

2.Қайталанғыштық – бір үлгіні бірнеше рет талдағанда бірдей нәтиже шығуы.

3.Селективтілік – әдіс тек қажетті компонентті ғана анықтауы тиіс.

4.Сезімталдық – өте аз мөлшердегі затты анықтау мүмкіндігі.

5.Стандарттау – нәтижені салыстыру үшін эталондық ерітінділер мен үлгілер қолдану

Сандық талдаудың әдістері

1. Классикалық химиялық әдістер

а) Гравиметриялық әдіс

•**Мәні:** анықталатын зат тұнбаға немесе газға айналдырылады, кейін оның массасы өлшенеді.

•**Мысалы:** сульфат-иондарын анықтау үшін ерітіндіге $BaCl_2$ қосылады, $BaSO_4$ тұнбасы түзілген соң кептіріліп, өлшенеді.

•**Артықшылығы:** жоғары дәлдік, қарапайымдылық.

•**Кемшілігі:** ұзақ уақыт алады, қателік көзі көп.

ә) Титриметриялық әдіс

•**Мәні:** концентрациясы белгілі ерітінді (титрант) зерттелетін ерітіндіге қосылып, реакция соңына дейін жеткізіледі.

•**Индикатор** немесе аспап арқылы анықталады.

Негізгі титрлеу түрлері:

1.Қышқыл-негіздік титрлеу (NaOH – HCl).

2.Тотығу-тотықсыздану титрлеу ($KMnO_4$, $K_2Cr_2O_7$).

3.Комплексометриялық титрлеу (EDTA арқылы металл иондарын анықтау).

4.Тұнбамен титрлеу ($AgNO_3$ – Cl^-).

Сандық талдаудың әдістері

2. Физикалық әдістер

•**Салмақтық әдіс** (үлгінің массасын дәл өлшеу).

•**Оптикалық әдістер** – спектрофотометрия (жарық жұтылуы), рефрактометрия (сыну көрсеткіші).

•**Жалын фотометриясы** – сілтілік металл иондарын анықтау (Na^+, K^+).

3. Физика-химиялық әдістер

•**Потенциометрия** – электрод потенциалын өлшеу (pH-метрия).

•**Кондуктометрия** – ерітіндінің электрөткізгіштігін өлшеу.

•**Полярография** – электродқа түсетін ток күшін өлшеу.

•**Хроматография** – қоспаларды бөлу және мөлшерін анықтау.

•**Электрофорез** – зарядталған бөлшектердің қозғалысын зерттеу.

Сандық талдау

Талдаудың (заманауи) әдістері

- **Атомдық абсорбциялық спектроскопия (ААС)** – металдардың іздік мөлшерін анықтау.
- **ИҚ және УК спектроскопия** – органикалық және бейорганикалық қосылыстарды талдау.
- **ЯМР (ядролық магниттік резонанс)** – құрылымдық талдау, сандық мәлімет те береді.
- **Масс-спектрометрия** – заттың молекулалық массасын және изотоптық құрамын анықтау.





Сандық талдау кезеңдері

1.Үлгіні алу – зерттелетін масса жалпы объектіні толық сипаттауы тиіс.

2.Үлгіні дайындау – ұнтақтау, еріту, сүйылту, қажетсіз қоспаларды бөлу.

3.Негізгі тәжірибелік жұмыс – титрлеу, тұндыру, өлшеу жүргізу.

4.Есептеу – реакция теңдеуін пайдаланып зат мөлшерін есептеу.

5.Нәтижені бағалау – қателіктерді талдау, стандарттармен салыстыру.

Мысалдар

1.NaOH концентрациясын HCl арқылы анықтау:
$HCl + NaOH \rightarrow NaCl + H_2O$

- 0,1 M HCl ерітіндісін титрлеу арқылы NaOH ерітіндісінің нақты концентрациясы табылады.

2.Судағы сульфат-иондарын анықтау:
$SO_4^{2-} + BaCl_2 \rightarrow BaSO_4\downarrow$ (тұнба)

- Тұнбаның массасы өлшеніп, сульфаттардың пайыздық мөлшері есептеледі.

Сандық талдаудың артықшылықтары мен кемшіліктері

Артықшылықтары	Кемшіліктері
Жоғары дәлдік береді	Үлкен уақытты қажет етеді
Стандарттармен салыстыруға мүмкіндік береді	Күрделі құрал-жабдық қажет болуы мүмкін
Өндірісте, медицинада, экологияда кең қолданылады	Дайындық пен үлгі дайындау күрделі

Сандық талдаудың қолданылуы

•**Фармацевтикада** – дәрілік заттардың концентрациясын анықтау.

•**Экологияда** – су, ауа, топырақтағы зиянды қоспалардың мөлшерін өлшеу.

•**Медицинада** – қандағы қант, гемоглобин, фермент мөлшерін анықтау.

•**Өнеркәсіпте** – металл қоспаларының құрамын бақылау.



Химиялық талдаудың негізгі принциптері

1. Үлгі алу және үлгіні дайындау принципі

•Зерттелетін үлгі бүкіл объектінің ортақ қасиеттерін сипаттауы тиіс.

•Үлгіні дұрыс алмау → қателіктің басты көзі.

•Дайындау кезеңдері: ұнтақтау, араластыру, гомогенизация, еріту, сүзу, кептіру.

2. Селективтілік принципі

•Әдіс тек қажетті компонентті ғана анықтайтындай болуы қажет.

•Мысалы, Ag^+ ионын анықтау үшін хлорид ионымен реакция жүргізіледі, ал басқа катиондар реакцияға түспейді.

3. Сезімталдық принципі

•Әдістің аз ғана мөлшердегі затты анықтай алу қабілеті.

•Мысалы, спектрофотометрия арқылы 10^{-6}–10^{-9} моль/л концентрациялардағы заттарды анықтауға болады.

4. Дәлдік және қайталанғыштық принципі

•Нәтиже шын мәнге мүмкіндігінше жақын болуы тиіс.

•Бір үлгіні бірнеше рет өлшегенде бірдей немесе өте ұқсас нәтижелер алынуы қажет.

Химиялық талдаудың негізгі принциптері

5. Жүйелілік принципі

•Талдау белгілі бір реттілікпен жүруі тиіс.

•Мысалы, сапалық талдауда катиондар мен аниондарды топтарға бөлу арқылы зерттеу жүргізіледі.

6. Стандарттау принципі

•Сандық талдау кезінде эталондық ерітінділер, стандартты үлгілер қолданылуы қажет.

•Бұл нәтижені басқа зерттеулермен салыстыруға мүмкіндік береді.

7. Қателіктерді бағалау принципі

•Әрбір тәжірибеде кездейсоқ және жүйелік қателіктер болуы мүмкін.

•Қателіктерді талдау нәтижелердің сенімділігін арттырады.

8. Уақыт пен шығын тиімділігі принципі

•Талдау әдісі қысқа уақытта сенімді нәтиже беруі тиіс.

•Әсіресе өндірістік және клиникалық зертханаларда жедел талдау маңызды.

Химиялық талдаудың жалпы принциптерінің маңызы

Ғылыми-зерттеу жұмыстарында сенімді деректер алуға мүмкіндік береді.

Дәрілік заттар мен тағам өнімдерінің сапасын бақылауды қамтамасыз етеді.

Экологиялық мониторингте, медициналық диагностикада және өнеркәсіптік процестерде негізгі әдістемелік негіз болады.

Сапалық талдау бойынша мысалдар

Таблетка құрамындағы темір иондары (Fe^{3+})

Шарт:
Темір торлы препараттың ерітіндісіне KSCN қосқанда ашық-қызыл түсті кешен түзіледі.

Шешу:

•$Fe^{3+} + SCN^- \rightarrow [Fe(SCN)]^{2+}$ (қанық қызыл).

Күтілетін белгілер: ашық-қызыл түске боялу.

Қорытынды: Препаратта **Fe^{3+}** болуы анықталды (темір препараттарының түрін және тазалығын тексеруде маңызды).

Аммиак немесе аммоний тұздарының болуы (фармацевтикалық ерітінді)

Шарт:
Белгісіз дәрілік ерітіндіге NaOH қосқанда аммиак иісі шығып, индикатор кагазы көгереді.

Шешу:

•$NH_4^+ + OH^- \rightarrow NH_3\uparrow + H_2O$.

Күтілетін белгілер: аммиактың өткір иісі, индикатордың (қызыл лакмус) көгере түсуі.

Қорытынды: NH_4^+/аммоний тұздары бар — өнімді сақтау/тұрақтылық аспектілерін бағалау керек.

Назарларыңызға рахмет!