

PHẠM LUẬN

PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH
PHỔ PHÂN TỬ

NHÀ XUẤT BẢN BÁCH KHOA HÀ NỘI

Bản quyền thuộc về Nhà xuất bản Bách Khoa Hà Nội.

Mọi hình thức xuất bản, sao chép mà không có sự cho phép bằng văn bản của nhà xuất bản là vi phạm pháp luật.

Mã số: 546 – 2014/CXB/03 – 07/BKHN

Biên mục trên xuất bản phẩm của Thư viện Quốc gia Việt Nam

Phạm Luận

Phương pháp phân tích phổ phân tử / Phạm Luận. - H. : Bách khoa Hà Nội, 2014. - 492tr. :
hình vẽ, bảng ; 27cm

Thư mục cuối mỗi phần. - Phụ lục: tr. 420-478

ISBN 978-604-911-986-6

1. Hoá phân tích 2. Phân tích quang phổ

543.5 - dc23

BKK0017p-CIP

LỜI TỰA

Hóa học phân tích là ngành khoa học có sự tích hợp cao của nhiều ngành khoa học tự nhiên như: hóa học, vật lý, toán học, tin học, sinh học, môi trường,... Nhiệm vụ cơ bản của hóa học phân tích bao gồm phân tích định tính để xác định thành phần hay cấu trúc của mẫu, phân tích định lượng hay để phân tách các chất và điều chế các hợp chất siêu tinh khiết... Vì thế hóa học phân tích luôn đóng vai trò quan trọng trong khoa học, kỹ thuật, trong nghiên cứu, trong xã hội như công tác điều tra, phát triển tiềm năng, khai thác tài nguyên khoáng sản, đánh giá chất lượng sản phẩm,...

Các phương pháp và kỹ thuật trong hóa học phân tích ở nước ta đã được phát triển và ứng dụng từ nhiều năm nay. Tại các phòng thí nghiệm của các đơn vị đào tạo, viện nghiên cứu và nhà máy sản xuất đều được trang bị các hệ thống thiết bị phân tích trong và ngoài nước, từ cổ điển đến hiện đại, từ đơn giản đến phức tạp. Tuy nhiên các tài liệu tiếng Việt giới thiệu đầy đủ về cơ sở lý thuyết của các phương pháp phân tích và hướng dẫn cụ thể về từng kỹ thuật phân tích thì vẫn chưa có hoặc chưa đầy đủ nên là một thực tế khó khăn cho việc đào tạo, ứng dụng và phát triển ngành Hóa học phân tích hiện nay ở nước ta.

Xuất phát từ thực tế đó, Nhà xuất bản Bách khoa Hà Nội xin giới thiệu cùng bạn đọc Bộ sách chuyên ngành về “HÓA HỌC PHÂN TÍCH HIỆN ĐẠI” gồm 6 cuốn:

1. Phương pháp phân tích phổ nguyên tử.
2. Phương pháp phân tích phổ phân tử.
3. Các phương pháp phân tích sắc ký và chiết tách.
4. Phương pháp xử lý và chuẩn bị mẫu phân tích.
5. Hóa học phân tích cơ sở.
6. Phương pháp phân tích điện hóa.

Tác giả của bộ sách này là Nhà giáo Ưu tú – GS. TS. Phạm Luận, người đã nhiều năm giảng dạy, nghiên cứu và làm việc trong lĩnh vực Hóa học phân tích. Bộ sách là một phần thành tựu của tác giả – người luôn tâm huyết với việc biên soạn các cuốn sách chuyên ngành để lưu truyền lại cho xã hội những kiến thức và kinh nghiệm quý báu đã được đúc kết trong sự nghiệp của ông. Tôi tin rằng Bộ sách này sẽ là công cụ đặc biệt hữu ích, là cẩm nang kiến thức về lý thuyết và thực hành “HÓA HỌC PHÂN TÍCH HIỆN ĐẠI” cho các sinh viên, giảng viên, nghiên cứu viên và các cán bộ làm việc liên quan đến lĩnh vực phân tích.

Nhân dịp ra mắt 3 cuốn đầu tiên của Bộ sách, trước tiên tôi xin trân trọng cảm ơn tác giả – NGƯT.GS. TS. Phạm Luận tuy đã ở tuổi 76 nhưng vẫn dành toàn bộ tâm huyết và công sức để hoàn thiện bản thảo của Bộ sách này. Tôi cũng xin cảm ơn các cán bộ của Nhà xuất bản Bách khoa Hà Nội đã rất nỗ lực và tận tâm để thực hiện xuất bản Bộ sách. Đặc biệt tôi xin chân thành cảm ơn ông Hoàng Anh Tuấn – Phó Chủ tịch Hội các Phòng thí nghiệm Việt Nam – VINALAB, đã giúp đỡ và đóng góp kinh phí để biến các ý tưởng, kế hoạch ban đầu của chúng tôi thành những cuốn sách được xuất bản rất đẹp và có giá trị khoa học – xã hội cao.

Bộ sách có thể còn có thiếu sót hay hạn chế nào đó, chúng tôi rất mong nhận được sự góp ý từ bạn đọc để tác giả; Nhà xuất bản tiếp thu và bổ sung cho những lần xuất bản tiếp theo.

Xin trân trọng giới thiệu cùng bạn đọc!

GIÁM ĐỐC – TỔNG BIÊN TẬP
NHÀ XUẤT BẢN BÁCH KHOA HÀ NỘI
TS. PHÙNG LAN HƯƠNG

LỜI NÓI ĐẦU

Các phương pháp phân tích quang phổ, như phương pháp phổ phát xạ và hấp thụ nguyên tử, phổ hấp thụ phân tử, phổ huỳnh quang, phổ hồng ngoại và phổ khối lượng,... là những kỹ thuật phân tích hóa lý hiện đại đã và đang được phát triển và ứng dụng rất rộng rãi trên toàn thế giới trong nhiều ngành khoa học kỹ thuật, vật lý, hóa học, trong sản xuất công nghiệp, nông nghiệp, y dược, địa chất, môi trường,... Đặc biệt ở các nước phát triển, các phương pháp phân tích phổ đã trở thành một hệ thống các phương pháp phân tích công cụ có hiệu quả trong việc xác định lượng nhỏ và vết các chất vô cơ, hữu cơ, kim loại trong nhiều đối tượng khác nhau như đất, nước, không khí, thực phẩm, kim loại, hợp kim,...

Hiện nay, trong công tác nghiên cứu bảo vệ môi trường, an toàn thực phẩm,... các phương pháp phân tích phổ là những công cụ tốt phục vụ đắc lực cho công việc phát hiện và xác định các kim loại nặng độc hại trong các đối tượng đất, nước, không khí, thực phẩm và sinh học. Đến nay trên thế giới đã có hàng trăm quy trình phân tích tiêu chuẩn dựa trên cơ sở của các kỹ thuật phân tích phổ này trong các lĩnh vực phân tích thực phẩm, phân tích các đối tượng môi trường (đất, nước, không khí và sinh học).

Ở nước ta, các kỹ thuật phân tích quang phổ cũng đã phát triển và đang được ứng dụng trong khoảng hai chục năm gần đây. Một số phòng thí nghiệm đã được trang bị các hệ thống máy đo phổ phát xạ và hấp thụ nguyên tử, phổ hấp thụ UV/VIS, phổ huỳnh quang, phổ hồng ngoại và phổ khối lượng. Những thiết bị này do nhà nước ta đầu tư, hoặc do viện trợ của nước ngoài theo các chương trình hợp tác nghiên cứu khoa học kỹ thuật khác nhau. Nhờ đó, chúng ta đã có máy đo phổ phát xạ và hấp thụ nguyên tử của nhiều hãng, nhiều model khác nhau từ đơn giản đến hoàn chỉnh. Một số cán bộ khoa học kỹ thuật của các Viện, các trường Đại học đã được ra nước ngoài (Anh, Pháp, Đức, Hà Lan, Nga) để học tập, nghiên cứu và đào tạo. Song đại đa số những cán bộ khác không có điều kiện đó và họ cũng rất cần được cung cấp kiến thức về các kỹ thuật phân tích quang phổ để phục vụ cho công việc hiện tại của mình. Mặt khác, hầu hết các tài liệu và sách về các kỹ thuật phân tích này lại chỉ có bằng tiếng Anh, Pháp, hoặc Nga. Trong những năm qua, nước ta đã dịch rất nhiều quy trình phân tích để áp dụng phục vụ cho khoa học và kinh tế. Tuy nhiên chúng ta chưa có cuốn sách cơ sở lý thuyết nào viết bằng tiếng Việt về kỹ thuật phân tích phổ để phục vụ đào tạo, hay giúp các cán bộ của chúng ta học tập và nâng cao tay nghề, phục vụ cho nhu cầu phân tích của các ngành khoa học và kinh tế hiện nay đang từng ngày phát triển và đổi mới, đòi hỏi chất lượng cao cùng với sự phát triển kinh tế thế giới. Vì thế tác giả đã mạnh dạn biên soạn cuốn sách “**Phương pháp phân tích phổ phân tử**” được xem như là một tài liệu cơ sở lý thuyết của kỹ thuật phân tích quang phổ. Cuốn sách này sẽ rất có ý nghĩa đối với công tác đào tạo, nghiên cứu và ứng dụng thực tế trong ngành Hóa học phân tích của Việt Nam, phục vụ cho nhiều đối tượng bạn đọc: từ sinh viên, học viên cao học, nghiên cứu sinh đến các kỹ thuật viên, chuyên gia và cán bộ giảng dạy lĩnh vực Hóa phân tích.

Nội dung cuốn sách gồm năm phần như sau:

1. Phương pháp phân tích phổ hấp thụ phân tử (UV–VIS).
2. Phương pháp phân tích phổ hồng ngoại (IR).
3. Phương pháp phân tích phổ huỳnh quang (FLS).
4. Phương pháp phân tích phổ khối lượng phân tử (MMS).
5. Phụ lục.

Đây là cuốn sách đầu tiên về các kỹ thuật phân tích phổ phân tử thuộc bộ sách “**Các phương pháp phân tích hiện đại**” được viết bằng tiếng Việt, nên không thể tránh khỏi một số hạn chế nhất định, vì thế chúng tôi rất mong nhận được sự đóng góp ý kiến của các bạn bè, đồng nghiệp và bạn đọc gần xa có quan tâm, để tác giả có thêm điều kiện hoàn chỉnh cho lần xuất bản tiếp sau.

Nhân dịp này, chúng tôi cũng xin chân thành gửi lời cảm ơn đến GS. TS. J. F. M. Maesen, GS. TS. Kragton, GS. TS. J. Bak, GS. TS. J. C. Kraak, Kỹ sư hóa nghiệm H. Balker, Kỹ sư J. W. Elgersma thuộc Khoa Hóa học trường Đại học tổng hợp Amsterdam, GS. TS. Trịnh Xuân Giản (Viện Hóa học, Viện Khoa học công nghệ Việt Nam), GS. TS. Nguyễn Đức Huệ, PGS. TS. Nguyễn Văn Ri, TS. Nguyễn Hoàng (Khoa Hóa, Đại học Quốc gia Hà Nội), GS. TS. Phạm Gia Huệ (Đại học Dược Hà Nội), PGS. TS. Ngô Huy Du (Viện Hóa học công nghệ Việt Nam) và các bạn đồng nghiệp trong Bộ môn Hóa Phân tích, Khoa Hóa học, Đại học Quốc Gia Hà Nội đã có nhiều ý kiến đóng góp cho nội dung của cuốn sách.

Xin cảm ơn.

Tác giả
GS. TS. PHẠM LUẬN

MỤC LỤC

Lời tựa	3
Lời nói đầu	5
Bảng các chữ viết tắt	13
 Chương 1. CƠ SỞ LÝ THUYẾT CỦA PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH PHỔ HẤP THỤ QUANG PHÂN TỬ UV-VIS.....	21
1.1. Sự xuất hiện của phổ hấp thụ phân tử UV-VIS	21
1.1.1. Sự hấp thụ quang vùng UV-VIS	21
1.1.2. Định luật hấp thụ quang (hấp thụ ánh sáng)	28
1.1.3. Những nguyên nhân gây sai lệch định luật hấp thụ quang.....	41
1.1.4. Phổ hấp thụ quang và cấu trúc phân tử chất.....	44
1.1.5. Điểm đẳng quang của sự hấp thụ	47
1.1.6. Ví dụ về cấu trúc phân tử và phổ hấp thụ UV-VIS	48
1.1.7. Màu sắc vật thể và sự tương tác của ánh sáng	55
1.2. Nguyên tắc của phép đo phổ UV-VIS	57
1.3. Trang bị của phép đo phổ hấp thụ quang UV-VIS	58
1.3.1. Nguồn sáng	59
1.3.2. Hệ quang học	62
1.3.3. Bộ detector (Sensor quang học).....	63
1.4. Phản ứng và thuốc thử trong phép đo quang UV-VIS.....	65
1.4.1. Các yêu cầu chung của thuốc thử	65
1.4.2. Các loại thuốc thử trong phép đo phổ hấp thụ UV-VIS.....	67
1.4.3. Độ bền của phức trong phép đo trắc quang	74
1.5. Các yếu tố ảnh hưởng trong phép đo quang UV/VIS.....	75
1.5.1. Ảnh hưởng của sự chen lẫn phổ	75
1.5.2. Ảnh hưởng của pH (hay nồng độ axit)	78
1.5.3. Thời gian bền của phức đo phổ.....	81
1.5.4. Ảnh hưởng của lượng thuốc thử dư.....	82
1.5.5. Yếu tố ảnh hưởng nhiệt độ.....	83
1.5.6. Ảnh hưởng của chất nền của mẫu	84
1.5.7. Ảnh hưởng của dung môi hữu cơ	85
1.5.8. Ảnh hưởng của các ion lạ khác.....	86

1.6. Phân tích định lượng bằng phổ hấp thụ UV-VIS.....	87
1.6.1. Các phương pháp đơn giản	87
1.6.2. Các phương pháp định lượng	89
1.6.3. Phương pháp một mẫu chuẩn.....	94
1.7. Xác định thành phần phức.....	94
1.7.1. Phương pháp biến đổi liên tục một thành phần.....	95
1.7.2. Phương pháp đồng phân tử gam	96
1.8. Xác định hằng số phân ly của phức chất.....	98
1.8.1. Phương pháp đường chuẩn	98
1.8.2. Phương pháp dãy đồng phân tử gam	99
1.8.3. Phương pháp biến đổi một thành phần	99
1.9. Chuẩn độ đo quang.....	99
1.9.1. Nguyên tắc chung.....	99
1.9.2. Mục đích.....	100
1.9.3. Dạng của đường cong chuẩn độ đo quang	100
1.9.4. Khả năng áp dụng của chuẩn độ đo quang	102
1.10. Các thuật toán dùng trong phép đo quang UV/VIS	103
1.10.1. Giải phương trình có n phương trình với n ẩn số	103
1.10.2. Phép đo phổ đạo hàm	103
1.11. Phạm vi ứng dụng của phép đo phổ UV-VIS.....	108
1.12. Phổ phản xạ quang vùng UV-VIS.....	108
1.12.1. Sự xuất hiện phổ phản xạ quang vùng UV-VIS	108
1.12.2. Nguyên tắc và trang bị của phép đo	109
1.12.3. Kỹ thuật đo phổ phản xạ quang.....	110
1.12.4. Ứng dụng của phổ phản xạ quang vùng UV-VIS.....	112
1.13. Phổ hấp thụ UV/VIS trong phân tích định dạng	112
1.14. Ví dụ một số máy phổ UV/VIS	114
1.15. Câu hỏi ôn tập	117
Tài liệu tham khảo	118
 Chương 2. CƠ SỞ LÝ THUYẾT CỦA PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH PHỔ HỒNG NGOẠI.....	 119
2.1. Cơ sở lý thuyết của phổ hồng ngoại	119
2.1.1. Sự xuất hiện của phổ hồng ngoại.....	119
2.1.2. Phổ hồng ngoại và cấu trúc phân tử chất.....	143
2.2. Nguyên tắc và trang bị của phép đo phổ hồng ngoại	148
2.2.1. Nguyên tắc chung.....	148
2.2.2. Hệ máy, trang thiết bị của phép đo phổ IR	148
2.2.3. Mẫu và cuvet đựng mẫu để đo phổ	153

2.3. Các yếu tố ảnh hưởng trong phép đo phổ IR	156
2.4. Ví dụ về phổ hồng ngoại của một số hợp chất hữu cơ	162
2.5. Phổ hồng ngoại của các hợp chất vô cơ.....	192
2.6. Phổ hồng ngoại của một số hợp chất phức kim loại	195
2.7. Kỹ thuật hồng ngoại chuyển hóa FOURIER, Ft-IR	198
2.7.1. Nguyên tắc cấu tạo và hoạt động của Ft-IR	198
2.7.2. Phương trình của giao thoa kế Michell	200
2.7.3. Cấu tạo máy phổ hồng ngoại chuyển hóa Furie	202
2.8. Phân tích các nhóm chức và định tính	203
2.9. Phân tích định lượng theo phổ IR	206
2.9.1. Phương trình định lượng	206
2.9.2. Các phương pháp định lượng	208
2.10. Phạm vi ứng dụng của phổ hồng ngoại	212
2.11. Ví dụ một số máy phổ IR	213
2.12. Câu hỏi ôn tập	215
Tài liệu tham khảo	216
 Chương 3. CƠ SỞ LÝ THUYẾT CỦA PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH	
 PHỔ HUỖNH QUANG PHÂN TỬ.....	217
3.1. Khái quát chung về phổ huỳnh quang.....	217
3.1.1. Phổ huỳnh quang là gì.....	217
3.1.2. Sự phát xạ huỳnh quang của chất.....	222
3.2. Nguyên lý chung của phép đo phổ huỳnh quang.....	232
3.3. Phổ huỳnh quang phân tử	236
3.3.1. Sự xuất hiện của phổ huỳnh quang phân tử	236
3.3.2. Cường độ chùm tia phát xạ huỳnh quang	243
3.3.3. Cấu trúc phân tử chất và sự phát huỳnh quang	247
3.3.4. Trang bị của phép đo phổ huỳnh quang phân tử.....	248
3.3.5. Nguồn sáng kích thích phổ huỳnh quang phân tử	249
3.3.6. Hệ quang học của máy phổ huỳnh quang	251
3.3.7. Thuốc thử huỳnh quang	253
3.3.8. Độ nhạy của phổ huỳnh quang phân tử	259
3.3.9. Các yếu tố ảnh hưởng đến phổ HQPT	260
3.3.10. Phân tích định tính.....	271
3.3.11. Phân tích định lượng bằng phổ HQPT	271
3.3.12. Phạm vi ứng dụng của phổ huỳnh quang	277
3.4. Phổ huỳnh quang hóa học	277
3.4.1. Sự xuất hiện của phổ huỳnh quang hóa học	277

3.4.2. Cường độ của chùm tia phát xạ huỳnh quang hóa học.....	282
3.4.3. Điều kiện và trang bị của phép đo huỳnh quang hóa học.....	283
3.4.4. Phân tích định lượng bằng phổ huỳnh quang hóa học.....	283
3.4.5. Phạm vi ứng dụng của phổ huỳnh quang hóa học	283
3.5. Phổ lân quang.....	284
3.5.1. Sự xuất hiện của phổ lân quang.....	284
3.5.2. Cường độ của chùm tia lân quang	284
3.5.3. Các điều kiện để phân tích phổ lân quang	285
3.6. Ví dụ một số máy phổ huỳnh quang	286
3.7. Câu hỏi ôn tập	287
Tài liệu tham khảo	288

Chương 4. CƠ SỞ LÝ THUYẾT CỦA PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH PHỔ KHỐI LƯỢNG

PHÂN TỬ (Molecular Mass Spectrometry, MMS).....	289
4.1. Khái quát về phổ khối lượng	289
4.1.1. Khái quát chung về phổ khối lượng.....	289
4.1.2. Sự xuất hiện phổ khối lượng phân tử (MMS)	293
4.1.3. Cơ chế của sự phân mảnh (tách mảnh).....	295
4.1.4. Nguồn ion hóa	300
4.1.5. Cường độ pic phổ khối	306
4.1.6. Bộ phân giải phổ khối lượng.....	309
4.1.7. Hệ thu nhận phát hiện phổ khối.....	314
4.1.8. Các cách và nguồn nạp mẫu vào buồng ion hóa.....	316
4.2. Nguyên tắc của phép đo phổ khối phân tử	319
4.3. Cấu tạo của máy đo phổ khối phân tử.....	319
4.3.1. Nguyên tắc cấu tạo chung.....	319
4.3.2. Các loại máy phổ khối lượng.....	320
4.4. Cơ sở lý thuyết của sự phân giải phổ khối lượng	320
4.4.1. Máy phổ khối dùng trường tứ cực, loại Q-MS	320
4.4.2. Máy phổ khối loại trường bay TOF	326
4.4.3. Máy phổ khối loại cung từ (Máy loại MS/ES/ICP-MS)	327
4.5. Hệ bơm chân không.....	329
4.6. Ví dụ phổ khối của một số hợp chất.....	330
4.7. Các yếu tố ảnh hưởng.....	337
4.7.1. Chọn số khối m/Z đại diện để phát hiện và định lượng chất	337
4.7.2. Các thông số của máy đo phổ.....	339
4.7.3. Các điều kiện nạp mẫu	340

4.7.4. Điều kiện hóa hơi và ion hóa chất tạo ra ion M^{1+}	340
4.7.5. Ảnh hưởng của phổ.....	340
4.7.6. Ảnh hưởng của thành phần mẫu.....	340
4.7.7. Ảnh hưởng của quá trình chuẩn bị mẫu	341
4.7.8. Quá trình ghi phổ và đánh giá phổ	341
4.8. Tối ưu hóa các điều kiện phân tích	341
4.9. Phân tích định tính.....	343
4.9.1. Nguyên tắc chung.....	343
4.9.2. Cách tiến hành	344
4.10. Phân tích định lượng	346
4.10.1. Nguyên tắc chung và phương trình cơ bản	346
4.10.2. Các phương pháp phân tích.....	347
4.11. Các ứng dụng của phổ khối lượng	351
4.12. Ghép nối máy phổ khối với các hệ tách sắc ký	352
4.13. Sắc ký khối phổ phân tích các HCBVTV	355
4.14. Máy khối phổ ứng dụng trong phân tích định dạng.....	408
4.14.1. Phân tích định dạng thủy ngân (Hg)	409
4.14.2. Phân tích định dạng Pb	414
4.14.3. Định dạng Sn.....	417
4.15. Câu hỏi ôn tập	418
Tài liệu tham khảo	419
Chương 5. PHỤ LỤC	420
5.1. Phần chung.....	420
5.2. Phổ hấp thụ quang UV–VIS.....	425
5.3. Phổ hồng ngoại	436
5.4. Phổ huỳnh quang.....	460
5.5. Phổ khối lượng phân tử	465
Một số thiết bị minh họa	471
Chỉ mục	479

BẢNG CÁC CHỮ VIẾT TẮT

Viết tắt	Viết đầy đủ tiếng Việt (tiếng Anh)
MS	Phổ phân tử (Molecular spectroscopy)
MSD	Detector phổ phân tử (Molecular spectroscopy detector)
UV	Tử ngoại (Ultraviolet)
UVD	Detector hấp thụ quang tử ngoại (Ultraviolet detector)
VIS	Khả kiến, nhìn thấy (Visible)
VISD	Detector hấp thụ quang khả kiến (Visible detector)
UV-VIS	Tử ngoại-khả kiến (Ultraviolet Visible)
UV-VISD	Detector hấp thụ quang tử ngoại-khả kiến (Ultraviolet Visible Detector)
MFS	Phổ huỳnh quang phân tử (Molecular fluorescence spectroscopy)
MFSD	Detector phổ huỳnh quang phân tử (Molecular spectroscopy fluorescence detector)
A	Độ hấp thụ (Absorbance)
T	Độ truyền qua (Transmission)
ACN	Axetonitril (Acetonitril)
APDC	Amoni-pyrolidin-Dithio-cacamat (Amonium-pyrolidin-Dithio-carbamate)
Na-APDC	Natri-pyrolidin-Dithio-cacamat (Sodium-pyrolidin-Dithio-carbamate)
Dx-Para	Dẫn xuất thế vị trí para
Dx-Meta	Dẫn xuất thế vị trí meta
Dx-Octo	Dẫn xuất thế vị trí octo
Xe-Lamp	Đèn hồ quang Xenon (Xenon arc lamp)
D2-Lamp	Đèn hồ quang Dotri (Detrium arc lamp)
W-Lamp	Đèn hồ quang Wolfram (Tungsten arc lamp)
NGL	Đèn phát sáng mạnh (Nernst Glower Lamp)
Cell	Cuvet đựng mẫu đo (Sample Cell)
PAD	Detector mảng diot phát quang (Photo diode array detector)

H ₂ Dz	Ditizon (Dithyzone)
R	Thuốc thử, hay tác nhân (Reagent)
PAR	Thuốc thử hữu cơ 4-(2-pyridiazo)-rezorsin
PAN	Thuốc thử hữu cơ 1-(2-pyridiazo)-naphtol
BX	Thuốc thử hữu cơ Briang-xanh (Blue Brian reagent)
MIBK	Metyl iso butyl xeton (Methyl iso butyl ketone)
Al-Al ₃ S	Phức nhôm alizarin-S (Aluminium Alizarin-S complex)
Sal hay H ₂ Sal	Axit salisilic (Salysilic acid)
Me	Kim loại (Metal)
EDTA hay H ₄ Y	Complexon II, Triplex II (Ethylen-diamin-tetra-Acetic Acid)
Na ₂ H ₂ Y	Complexon III, hay Trilon B, hay Triplex III (Di-sodium Ethylen-diamin-tetra-Acetic Acid)
NP-HPLC	Sắc ký lỏng hiệu năng cao pha thường (Normal phase high performance Liquid Chromatography)
RP-HPLC	Sắc ký lỏng hiệu năng cao pha ngược (Reversed phase high performance Liquid Chromatography)
IEx-HPLC	Sắc ký lỏng hiệu năng cao trao đổi ion (Ion-Exchange high performance Liquid Chromatography)
IC	Sắc ký ion (Ion Chromatography)
HPCE	Điện di mao quản hiệu năng cao (High performance Capillary Electrophoresis)
HPCEC	Sắc ký điện di mao quản hiệu năng cao (High performance Capillary Electrophoresis Chromatography)
MEC	Sắc ký rây phân tử
hay SEC	(Molecular Exclusion Chromatography) hay (Gel-Filtration high performance Chromatography)
PaGC	Sắc ký khí cột nhồi (Packed Column Gas Chromatography)
CaGC	Sắc ký khí cột mao quản (Capillary Column Gas Chromatography)
Gel-GC	Sắc ký khí rây (sàng lọc) phân tử (Gel-Filtration Gas Chromatography)
IFS	Phổ huỳnh quang đồng vị (Isotope Fluorescence Spectroscopy)
ISF	Sàng lọc ion theo kích thước (Ion Size Filtration)

SDSP	Sodium disulfur phosphate
CSV	Von-ampe hoà tan catot (Cathode Stripping Voltammetry)
ASV	Von-ampe hoà tan anot (Anode Stripping Voltammetry)
DPCSV	Von-ampe hoà tan catot xung vi phân (Differential pulse Cathode Stripping Voltammetry)
DPASV	Von-ampe hoà tan anot xung vi phân (Differential pulse Anode Stripping Voltammetry)
AAS	Phổ hấp thụ nguyên tử (Atomic Absorption Spectroscopy)
AFS	Phổ huỳnh quang nguyên tử (Atomic Fluorescence Spectroscopy)
OES	Phổ phát xạ quang học (Optical Emission Spectroscopy)
ICP-OES	Phổ phát xạ quang học nguồn ICP (ICP Optical Emission Spectroscopy)
ICP-AES	Phổ phát xạ nguyên tử nguồn ICP (ICP Optical Emission Spectroscopy)
ICP	Nguồn cao tần cảm ứng (Inductively Coupled Plasma)
MP	Plasma sóng ngắn (Micro Plasma)
NNA	Phân tích hạt nhân kích hoạt neutron (Neutron Nuclear Activation Analysis)
NAA	Phân tích kích hoạt neutron (Neutron activation Analysis)
CNA	Chemical Nuclear Analysis
ACN	Axetonitril
EnSymA	Phân tích Enzym (Enzym Analysis)
AntBA	Phân tích kháng khuẩn (AntiBio Analysis)
IR, hay IFS	Phổ hồng ngoại (Infrared Spectroscopy)
Ft	Chuyển hoá Fourie (Fourier Transform)
Ft-IR	Phổ hồng ngoại chuyển hoá Fourie (Fourier Transform Infrared Spectroscopy)
ν_s	Tần số dao động đối xứng (Symmetrical vibration Frequency)
ν_a	Tần số dao động bất đối xứng (Asymmetrical vibration Frequency)
ν_{bd} hay ν_{var}	Tần số dao động biến dạng (Alterationing vibration Frequency)
C-Me	Các bon kim loại (Carbon Metal)
ht-dx	Hoá trị đối xứng
ht-kdx	Hóa trị không (bất) đối xứng
bd	Biến dạng
bd-dx	Biến dạng đối xứng

bd-kdx	Biến dạng không (bất) đối xứng
X-Ray	Tia X
X-RayS	Phổ tia X (X-Ray Spectroscopy)
XFS	Phổ huỳnh quang tia X (X-Ray Fluorescence Spectroscopy)
RS	Phổ Raman (Raman Spectroscopy)
MF	Huỳnh quang phân tử (Molecular Fluorescence)
AFE	Sự phát xạ huỳnh quang nguyên tử (Atomic Fluorescence Emission)
MFE	Sự phát xạ huỳnh quang phân tử (Molecular Fluorescence Emission)
MFS	Phổ huỳnh quang phân tử (Molecular Fluorescence Spectroscopy)
AFS	Phổ huỳnh quang nguyên tử (Atomic Fluorescence Spectroscopy)
SFE	Sự phát xạ huỳnh quang của vật rắn (Solid Fluorescence Emission)
MFD	Detector huỳnh quang phân tử (Molecular Fluorescence Detector)
HQ	Huỳnh quang
FR, hay FRe	Thuốc thử huỳnh quang (Fluorescence Reagent)
FSAM	Phương pháp phân tích phổ huỳnh quang (Fluorescence Spectroscopy Analysis Method)
MFSAM	Phương pháp phân tích phổ huỳnh quang phân tử (Molecular Fluorescence Spectroscopy Analysis Method)
AFSAM	Phương pháp phân tích phổ huỳnh quang nguyên tử (Atomic Fluorescence Spectroscopy Analysis Method)
Vit-E	Vitamin E (Vitamin E)
LOD	Giới hạn phát hiện (Limit of Detection)
LOQ	Giới hạn định lượng (Limit of Quantitative)
HCL	Đèn catot rỗng (Hollow Cathode Lamp)
E _{Ex}	Năng lượng kích thích (Excitation Energy)
E _{Em}	Năng lượng phát xạ (Emission Energy)
Φ_x , hay Φ	Hệ số phát xạ huỳnh quang (Fluorescence Emission Coefficient)
W _{Ex} , hay W	Công suất phát xạ huỳnh quang (Fluorescence Emission Power)
B1	Vitamin B1, hay Thiamin
Calc	Calcein (thuốc thử huỳnh quang)

HPLC/MFD	Sắc ký lỏng hiệu năng cao với detector huỳnh quang phân tử (High Performance Liquid Chromatography with Molecular Fluorescence Detector)
HPCE/MFD	Điện di mao quản hiệu năng cao với detector huỳnh quang phân tử (High Performance Capillary Electrophoresis with Molecular Fluorescence Detector)
CFS	Phổ huỳnh quang hóa học, Hóa huỳnh quang (Chemical Fluorescence Spectroscopy)
CLS	Phổ huỳnh quang hóa học (Chemical–Luminescence Spectroscopy)
PS	Phổ lân quang (Phosphorescence Spectroscopy)
RSD	Độ lệch chuẩn tương đối (Relative Standard Deviation)
RE	Sai số tương đối (Relative Error)
MMS	Phổ khối lượng phân tử (Molecular Mass Spectroscopy)
MMSD	Detector phổ khối lượng phân tử (Molecular Mass Spectroscopy Detector)
Da	Dalton, đơn vị đo số khối m/Z (Dalton)
AMS	Phổ khối lượng nguyên tử (Atomic Mass Spectroscopy)
ICP	Nguồn plasma cao tần cảm ứng (Inductivity Coupled Plasma)
EI	Sự ion hóa bằng nguồn electron (Electron Ionization)
ESI	Sự ion hóa bằng nguồn mù electron (Electron–Spray Ionization)
CI	Sự ion hóa bằng nguồn hóa học (Chemical Ionization)
PCI	Sự ion hóa bằng nguồn hóa học ion dương (Positive Chemical Ionization)
NCI	Sự ion hóa bằng nguồn hóa học ion âm (Negative Chemical Ionization)
TI	Sự ion hóa bằng nguồn nhiệt năng (Thermal Ionization)
FI	Sự ion hóa bằng trường điện từ (Field Ionization)
FDI	Sự ion hóa bằng trường điện từ giải hấp (Field desorption Ionization)
TSI	Sự ion hóa bằng nguồn mù nhiệt năng (Thermo–Spray Ionization)
FAB	Bắn phá bằng nguyên tử nhanh (Fast Atomic Bombardment)
PD	Sự ion hóa bằng plasma giải hấp (Plasma Desorption Ionization)
LDI	Sự ion hóa bằng lade giải hấp (Laser Desorption Ionization)

PBI, hay PBII	Sự ion hóa bằng sự tương tác của chùm hạt (Partical Beam Interface Ionization)
API	Sự ion hóa bằng trường áp suất khí quyển (Atmospheric Presure Ionization)
M ⁺	Ion mẹ, ion phân tử (Mother ion, Molecular Ion)
FI	Mảnh ion, ion mảnh (Fragment Ion)
[M+H] ⁺	Ion mẹ (ion phân tử), được tạo ra khi dùng nguồn CI (Mother ion, Molecular Ion)
[M-H] ⁺	Ion mẹ (ion phân tử), được tạo ra khi dùng nguồn CI (Mother ion, Molecular Ion)
MS	Cung nam châm từ (Magnetic Sector)
ES	Cung nam châm điện (Electrostatic Sector)
QF	Trường tứ cực (Quadrupole Field)
TOF	Thời gian bay (Time of Flight)
CF, hay CyF	Trường ly tâm siêu tốc (Cyclotron Field)
MS-MS	Máy phổ khối cung nam châm từ (Magnetic Sector Mass Spectroscopy)
ES-MS	Máy phổ khối cung nam châm điện (Electriostatic Sector Mass Spectroscopy)
MS/ES-MS	Máy phổ khối cung nam châm từ và nam châm điện (Magnetic-Electriostatic Sector Mass Spectroscopy)
Q-MS	Máy phổ khối trường tứ cực (Quadrupole Mass Spectroscopy)
HQ-MS	Máy phổ khối trường sáu cực (Hexa- Quadrupole Mass Spectroscopy)
DEMD	Detector đa nhân electron dinod (Dynode Electron Multiplier Detector)
EMD	Detector điện tử đa nhân (Electron Multiplier Detector)
SMD	Detector đa nhân phổ kế nhấp nháy (Scinlilator Multiplier Detector)
LC	Sắc ký lỏng (Liquid Chromatograph)
HPLC	Sắc ký lỏng hiệu năng cao (High Performance Liquid Chromatograph)
UHPLC	Sắc ký lỏng siêu hiệu năng cao (Ultra High Performance Liquid Chromatograph)
HPCE	Điện di mao quản hiệu năng cao (High Performance Capilary Electrophoresis)
HPCEC	Sắc ký điện di mao quản hiệu năng cao (High Performance Capilary Electrophoresis chromatography)

EI-MMS	Phổ khối phân tử nguồn EI (Electron Ionization Molecular Mass Spectroscopy)
ESI-MMS	Phổ khối phân tử nguồn ESI (Electron-Spray Molecular Mass Spectroscopy)
CI-MMS	Phổ khối phân tử nguồn ion hóa hóa học (Chemical Ionization Molecular Mass Spectroscopy)
GC/MSD hay GC/MMS	Sắc ký khí với detector khối phổ (Gas Chromatograph with Mass Spectroscopy Detector)
HCBVTV	Hóa chất bảo vệ thực vật (Pesticides)
OC	(Organo-Chlorine Pesticides)
OP	(Organo-Phosphorine Pesticides)
PY	Hợp chất pyro organo-phospho-chlorine (Phospho-Pyrochlorine Compound)
NC	Hợp chất nitro (Nitro Compound)
CBC	Hợp chất cacbamat (Carbamate Compound)
Herb	Hóa chất diệt cỏ dại (Herbicides)
USEx	Chiết siêu âm (Ultrasonic Extraction)
ADI (D ₅₀)	Liều chết 50% (50% Admission Death Dose Interval)
MRL	Giới hạn tối đa cho phép (Maximun Recommend Limit)
DMM	Di-Metyl thủy ngân (DiMethyl Mercury)
MMM, hay MMC	Mono-Metyl thủy ngân (MonoMethyl mercury)
EMM, hay EMC	Etyl-Metyl thủy ngân (EthylMethyl Mercury)
MMA _s	Mono-Metyl arsenic (MonoMethyl Arsenic)
DMA _s	Di-Metyl arsenic (DiMethyl Arsenic)
BA _s	Betaine Arsenic
As-B	Arseno-Betaine
AsC	Arsen-Chline
AsH ₃	Arsin (chất khí, rất độc)
EtMA _s H	Etyl-Metyl Arsin
Me-Hg	Metyl thủy ngân (MethylMercury)
DM-Hg	DiMetyl thủy ngân (DiMethyl Mercury)
Et-Hg	Etyl thủy ngân (EthylMercury)

DEt–Hg	DiEtyl thuỷ ngân (DiEthyl Mercury)
Me–Pb	Metyl chì (Methyl Lead)
DM–Pb	DiMetyl chì (DiMethyl Lead)
Et–Pb	Etyl chì (Ethyl Lead)
DEt–Pb	DiEtyl chì (DiEthyl Lead)
TEt–Pb	Tri–Etyl chì (TriEthyl Lead)
TeEt–Pb	Tetra–Etyl chì (Tetra Ethyl Lead)
Bu	Gốc alkyl Butyl
Me	Gốc alkyl Metyl
Et	Gốc alkyl Etyl
Pr	Gốc alkyl Propyl
Phe	Gốc alkyl Phenyl
BuPr ₃ Sn	Butyl–TriPropyl thiếc (Butyl–TriPropyl Tin)
Bu ₂ Pr ₂ Sn	Di–Butyl–Di–Propyl thiếc (Di–Butyl–Di–Propyl Tin)
Bu ₃ PrSn	Tri–Butyl–Propyl thiếc (Tri–Butyl–Propyl Tin)
Bu ₄ Sn	Tetra–Butyl thiếc (Tetra–Butyl Tin)
Pr ₄ Sn	Tetra–Propyl thiếc (Tetra–Propyl Tin)
MBT	Metyl–Butyl thiếc (Metyl–Butyl Tin)
DBT	Di–Butyl thiếc (Di–Butyl Tin)
TBT	Tri–Butyl thiếc (Tri–Butyl Tin)
TeBT	Tetra–Butyl thiếc (Tetra–Butyl–Tin)

Chương 1

CƠ SỞ LÝ THUYẾT CỦA PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH PHỔ HẤP THỤ QUANG PHÂN TỬ UV-VIS

1.1. SỰ XUẤT HIỆN CỦA PHỔ HẤP THỤ PHÂN TỬ UV-VIS

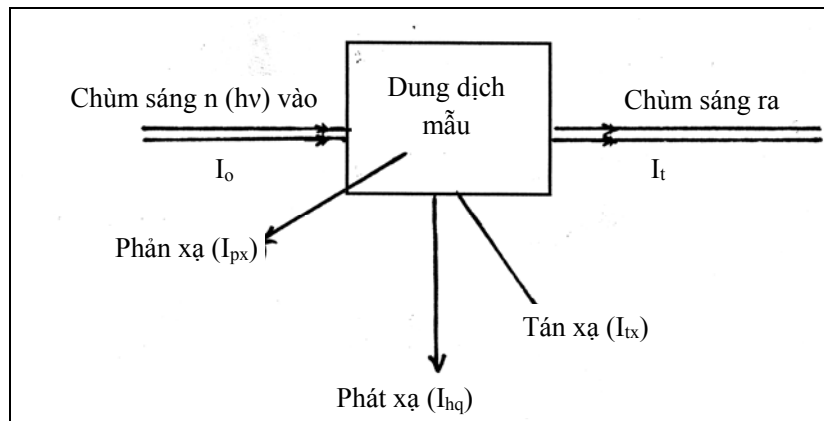
1.1.1. Sự hấp thụ quang vùng UV-VIS

– Phân tử, nhóm phân tử của các chất, đơn chất hay hợp chất, cũng đều được cấu tạo từ các nguyên tử theo những cách, kiểu liên kết hóa học nhất định của các điện tử (electron) hóa trị (các electron ở lớp ngoài cùng) của nguyên tử các nguyên tố. Tuy có muôn vàn các chất khác nhau được tạo thành từ các nguyên tử và phân tử, nhưng trong phân tử của các chất chỉ có ba loại liên kết hóa học, tức là mọi hợp chất (vô cơ và hữu cơ) đều được tạo thành từ các nguyên tử theo các kiểu liên kết hóa học nhất định, đó là:

- 1) Liên kết sigma (σ), liên kết đơn.
- 2) Liên kết pi (π), liên kết đôi và bội pi (2π như ở phân tử axetylen).
- 3) Và liên kết phối trí (liên kết cho nhận).

Ngoài ra, nếu phân tử các chất có chứa các nguyên tố dị tố, như nitơ (N_2), oxy (O_2), lưu huỳnh (S), thì ở nguyên tử của các nguyên tố này có thể còn 1 hoặc 2 đôi điện tử hóa trị tự do chưa tham gia liên kết và được ký hiệu là cặp electron **n**. Ví dụ trong phân tử NH_3 , nguyên tử N có 5 electron hóa trị, mới đem 3 electron hóa trị liên kết với 3 nguyên tử hydro tạo ra 3 liên kết đơn sigma (σ) trong phân tử NH_3 , do đó trong phân tử NH_3 này nguyên tử N còn lại một đôi điện tử tự do **n** (được gọi là cặp electron **n**). Trong phân tử $(C_6H_5)-NH_2$, nguyên tử nitơ trong nhóm $-NH_2$ cũng còn 1 đôi electron **n**, trong phân tử $(C_6H_5)-NO_2$ mỗi nguyên tử oxy vẫn còn 2 đôi electron **n**. Những đôi electron **n** này có thể cho phân tử của chất khác cần electron khi tham gia phản ứng với chất cần đôi điện tử đó để tạo ra liên kết bền, thuộc loại cho – nhận. Ví dụ, trong NH_3 đôi electron **n** này cho ion H^+ tạo ra ion NH_4^+ (là một axit yếu).

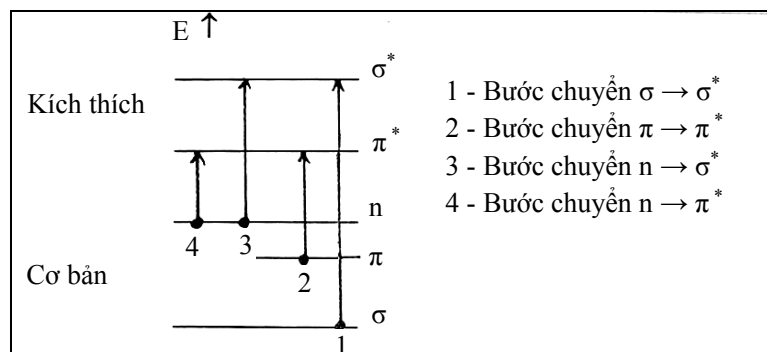
– Các electron hóa trị, khi đi vào liên kết trong phân tử hình thành các liên kết loại σ (liên kết đơn) và π (liên kết đôi). Liên kết σ là của các electron s và p. Các điện tử hóa trị của liên kết π nằm trong các phân lớp p, d, f và đó là các liên kết loại p-p, d-d, f-f, d-p, d-f.



Hình 1.1a. Sơ đồ chiếu sáng dung dịch mẫu có chất.

I_0 : Chùm sáng tới; I_t : Chùm sáng đi qua; I_{px} : Chùm sáng phản xạ;
 I_{hq} : Chùm sáng huỳnh quang; I_{tx} : Chùm sáng tán xạ.

– Trong phân tử, hay nhóm nguyên tử, các liên kết σ có năng lượng liên kết lớn nhất (nó bền nhất), sau đó kém hơn là đến các liên kết π và các đôi điện tử tự do **n** (hình 1.1b).



Hình 1.1b. Sơ đồ chuyển mức E của các đám mây electron liên kết.

1 và 2: Chuyển mức $N \rightarrow Y$; 3 và 4: Chuyển mức $N \rightarrow Q$.

– Các phân tử, nhóm phân tử của các chất, ở điều kiện bình thường chúng tồn tại ở trạng thái cơ bản, trạng thái này bền vững và nghèo năng lượng nhất (có mức năng lượng thấp nhất, E_0) để đảm bảo sự tồn tại của phân tử các chất.

Theo cơ học lượng tử, ở trạng thái cơ bản này phân tử cũng không thu và không phát bức xạ. Nhưng khi có chùm sáng (chùm photon) có năng lượng thích hợp chiếu vào dung dịch mẫu của chất, nó sẽ bị kích thích, các điện tử hóa trị trong các liên kết σ , π và đôi điện tử tự do **n** trong phân tử sẽ hấp thụ năng lượng của chùm sáng (tương tác không đàn hồi) và nó chuyển lên trạng thái kích thích có mức năng lượng cao hơn E_m . Khi phân tử của chất bị kích thích như thế chúng sẽ có các sự chuyển mức năng lượng như sau: