

- vedná disciplína, ktorá sa zaoberá zložením a štruktúrou látok, stavia na poznatkoch iných chemických disciplín
- delí sa na:
 - **kvantitatívna**
 - identifikácia látok = **dôkaz**
 - **kvalitatívna**
 - zistenie m alebo c analytu = **stanovenie**
- **analyt**
 - prvok, zlúčenina, ktorá sa má stanoviť
- **interferent**
 - prvok, zlúčenina, ktorá istým spôsobom ovplyvňuje, ruší stanovenie
- **matrixefekt (matricový efekt)**
 - súhrnný vplyv hlavných zložiek vzorky na odozvu (signál) patriaci analytu
- **analytická metóda**
 - súhrn poznatkov o využití určitého princípu (chemická rovnováha, optické vlastnosti...)
- **analytická metodika**
 - pracovný postup pre analýzu zvolenou alebo udanou metódou

Výkonnosť analytickej metódy

- hodnotiace parametre
 - **presnosť (precision)**
 - **správnosť (accuracy)**
 - **dôkazuschopnosť**
 - **ekonomické parametre:**
 - rýchlosť (vzorka/čas)
 - náklady (personálne, investičné, prevádzkové)
 - možnosť automatizácie

Dôkaz, stanovenie

- **selektivita**
 - dôležité kritérium zvolenej analytickej metódy
 - vyjadruje schopnosť analytickej metódy určovať látky na základe jednej alebo viac vlastností
- **analytické reakcie**
 - **skupinové**
 - umožňujú dôkaz celej skupiny podobných analytov a ich oddelenie zo zmesi (využitie skupinových činidiel)
 - **selektívne**
 - dôkaz, stanovenie jednej zložky v zmesi
 - zvýšenie selektivity úpravou reakčných podmienok (napr. pH)
 - **špecifické**
 - ideálna selektívna reakcia
- **citlivosť**

- vyjadruje závislosť sledovanej analytickej vlastnosti látky od m alebo c analytu

Kvalitatívna analýza – citlivosť dôkazu

- **medza postrehu (P)**
 - najnižšia m analytu vo vzorke, pri ktorej je dôkaz tohto analytu ešte pozitívny
 - v μg
- **medzné zriedenie (D)**
 - najvyššie možné zriedenie roztoku analytu, pri ktorom je dôkazová reakcia pozitívna
 - $D = P \cdot V^{-1} \cdot 10^{-6} \text{ (g} \cdot \text{ml}^{-1}\text{)}$
 - $pD = -\log D$ čím vyššie je pD , tým vyššia je citlivosť reakcie

Kvantitatívna analýza

- meranou veličinou je **analytický signál** (môže to byť m , V , I , U ...)
- čím je metóda citlivejšia, tým viac sa mení signál s hmotnosťou
 - citlivosť metódy je daná smernicou závislosti signálu od hmotnosti (resp. koncentrácie)
$$y = f(m) \quad y = f(c)$$
- **medza detekcie (LOD – limit of detection)**
 - určuje aké minimálne množstvo (resp. koncentrácia) látky sa danou metódou môže ešte dokázať
- **medza stanovenia (LOQ – limit of quantification)**
 - určuje minimálne množstvo analytu vo vzorke, ktoré môže byť kvantitatívne určené s určitou presnosťou a správnosťou

Rozdelenie analýz

- **podľa charakteru výsledkov**
 - *kvalitatívna*
 - *semikvantitatívna* (nie detailne, presne)
 - *kvantitatívna*
- **podľa charakteru vzorky**
 - *anorganická*
 - *organická*
 - *biochemickoklinická*
- **podľa skupenstva vzorky**
 - *analýza tuhých látok*
 - *analýza roztokov (kvapalín)*
 - *analýza plynov*
 - *analýza povrchov*
- **podľa požiadaviek na výkonnosť metódy**
 - *prevádzková* (kontrolná, sériová)
 - *štandardná* (rozhodovacia)
 - *exaktná* (veda, výskum, vývoj)
- **podľa stanovených entít**
 - *prvková*

- *iónová*
- *stanovenie molekúl*
- *fázová*
- *štruktúrna*
- **podľa množstva vzorky**
 - *gramová (makro)* >0,1g
 - *centigramová (semimakro)* $10^{-1}\text{g} - 10^{-2}\text{g}$
 - *miligramová (mikro)* $10^{-4}\text{g} - 10^{-2}\text{g}$
 - *mikrogramová (ultramikro)* $<10^{-4}\text{g}$
- **podľa obsahu analytov**
 - *hlavné zložky* 1 – 100%
 - *vedľajšie zložky* 0,01 – 1%
 - *stopové zložky* <0,01%
- **podľa kalibrácie** (či poskytuje priamo výsledok alebo treba uskutočniť kalibráciu)
 - *priame metódy* (bez kalibrácie) (gravimetria, odmerná analýza)
 - *nepriame metódy*

Kvantitatívne zloženie vzorky a spôsob jeho vyjadrenia

- **roztok**
 - homogénna zmes 2 alebo viacerých látok, z ktorých látka v nadbytku je rozpúšťadlo
- **nasýtený roztok**
 - heterogénna zmes, v ktorej je v rovnováhe nerozpustená látka so svojím roztokom
- **zloženie roztokov** môže byť vyjadrené:
 - **koncentrácia látkového množstva (mólová koncentrácia) – c**
 - $c = \frac{n}{V} \text{ (mol. dm}^{-3}\text{)}$
 - **hmotnostná koncentrácia – ρ**
 - vyjadruje hmotnosť látky A rozpustenej v jednom litri roztoku
 - $\rho_A = \frac{m_A}{V}$
 - aditívna veličina pre všetky zložky roztoku
 - ρ bez indexu vyjadruje hustotu (hmotnosť danej látky na jej vlastný objem)
 - **hmotnostný zlomok – w**
 - vyjadruje podiel hmotnosti rozpustenej látky z celkovej hmotnosti roztoku
 - $w_A = \frac{m_A}{m} \quad \sum w_i = 1$
 - udáva sa percentuálny obsah – hmotnosť zložiek v % alebo ppm (parts per million)
 - **1ppm** = $10^{-4}\%$
 - **objemový zlomok – φ**
 - vyjadruje podiel objemu zložky zmesi k celkovému objemu roztoku (zmesi kvapalín, plynov)
 - $\varphi_A = \frac{V_A}{V}$
 - **mólový zlomok – x**
 - vyjadruje pomer látkového množstva analytu a látkového množstva celej sústavy

- $x_A = \frac{n_A}{n}$
- **molalita – \underline{m}**
 - je definovaná ako pomer látkového množstva analytu a hmotnosti rozpúšťadla
 - $\underline{m}_A = \frac{n_A}{m_s} \text{ (mol. kg}^{-1}\text{)}$

Koncentrácia zmiešaných roztokov

- zmiešanie 2 roztokov tej istej látky s rôznou koncentráciou
 - vychádzame zo vzťahu: $n_A = n_{1A} + n_{2A}$
- ak zložky reagujú
 - $aA + bB \rightarrow cC + dD$
 - $\frac{n_A}{n_B} = \frac{a}{b}$ (počítať cez rozsah)
 - látkové množstvo v prebytku n_A'
 - $n_A' = n_A - \frac{a}{b}n_B$

Druhy chemických reakcií a ich využitie v analytickej chémii

- **chemická rovnováha**
 - väčšina reakcií v analytickej chémii sú vratné, t.j. prebiehajú len do určitého rovnovážneho stavu, keď je rýchlosť priamej a spätnej reakcie rovnaká
 - $aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$

$$v_1 = k[A]^a[B]^b$$

$$v_2 = k[C]^c[D]^d$$

v rovnovážnom stave $v_1 = v_2$
 - $K = \frac{k_1}{k_2} = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} = K_C$ (zdanlivá rovnovážna konštanta) Guldberg-Waagov zákon (rýchlosť chemickej reakcie je priamo úmerná koncentrácii reaktantov)
 - c_A – celková analytická koncentrácia (počiatočná koncentrácia)
 - $[A]$ – rovnovážna analytická koncentrácia
 - koncentrácie sa využívajú kvôli zjednodušeniu, normálne by mali byť nahradené aktivitou a

$$K_a = \frac{a_C^c \cdot a_D^d}{a_A^a \cdot a_B^b} \text{ (termodynamická rovnovážna konštanta)}$$
 - $a_A = \gamma_A \cdot c_A$ (koncentráciu možno nahradiť mólovým zlomkom) kde γ – stredný aktivitný koeficient, ktorého hodnota závisí od iónovej sily I , t.j. od celkovej koncentrácie všetkých iónov v roztoku:

$$I = 0,5 \sum_{i=1}^k c_i z_i^2 \text{ (} c_i \text{ – koncentrácia iónu, } z_i \text{ – nábojové číslo iónu)}$$
 - ak je koncentrácia veľmi nízka, $\gamma = 1$
- **disociácia elektrolytov**
 - ióny vo vodnom roztoku vznikajú disociáciou elektrolytu pôsobením rozpúšťadla
 - **disociačný stupeň α**
 - $\alpha = \frac{\text{počet disociovaných molekúl}}{\text{celkový počet molekúl}}$
 - určiť disociačný stupeň sa dá napr. meraním elektrickej vodivosti
 - úplne disociujú silné kyseliny a silné zásady – **silné elektrolyty**
 - čiastočne disociujú slabé kyseliny a slabé zásady – **slabé elektrolyty**

- **disociačný stupeň slabých kyselín (zásad)**
 - $AB \rightleftharpoons A^+ + B^-$
 - $[A^+] = [B^-] = c \cdot \alpha$ $[AB] = c(1 - \alpha)$
 - $K = \frac{[A^+][B^-]}{[AB]} = \frac{c \cdot \alpha^2}{1 - \alpha}$ (K – disociačná konštanta)
 - ak $1 - \alpha \approx 1$ potom $K = c \cdot \alpha^2$ a $\alpha = \sqrt{\frac{K}{c}}$
 - $\alpha = \frac{-K \pm \sqrt{K^2 + 4Kc}}{2c}$
- podľa druhu rovnováh možno reakcie v analytickej chémii rozdeliť na:
 - **protolytické**
 - **oxidačno-redukčné**
 - **zrážacie**
 - **komplexotvorné**