



国家级精品课程教材  
国家级精品资源共享课程教材

# 复杂物质剖析技术

第二版

董慧茹 王志华 主编



化学工业出版社



国家级精品课程教材  
国家级精品资源共享课程教材

# 复杂物质剖析技术

**第二版**

董慧茹 王志华 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本教材共分十一章，第一章绪论介绍了剖析工作的特点及作用，剖析工作的一般程序。第二章介绍了复杂样品的分离与纯化。其余九章系统地介绍了表面活性剂的剖析，染料剖析，感光材料剖析，涂料剖析，新型化学品、助剂、添加剂等的剖析，高分子材料的剖析，药物剖析，环境样品的剖析，食品剖析。

本书可作为高等院校化学、化工类专业学生的教材、也可供从事新材料和精细化工产品等开发研究及与分析相关领域中的工程技术人员和科研工作者参考。

### 图书在版编目 (CIP) 数据

复杂物质剖析技术/董慧茹, 王志华主编. —2 版. —北京:  
化学工业出版社, 2015. 5

国家级精品课程教材 国家级精品资源共享课程教材  
ISBN 978-7-122-23134-5

I. ①复… II. ①董…②王… III. ①复杂混合物-  
分离-高等学校-教材 IV. ①0658

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 039236 号

---

责任编辑: 赵玉清

文字编辑: 魏 巍

责任校对: 陶燕华

装帧设计: 关 飞

---

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷: 北京云浩印刷有限责任公司

装 订: 三河市瞰发装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 20 字数 501 千字 2015 年 6 月北京第 2 版第 1 次印刷

---

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

---

定 价: 49.00 元

版权所有 违者必究

# 前言

《复杂物质剖析技术》是北京化工大学应用化学专业的专业课教材，以培养跨世纪化学化工人才为出发点，具有理工科特色，完全适应当前高等学校化学课程教学改革的需要。全书选材紧密结合化学工业实际，既有必要的理论，又着重于实践，对学生日后从事科研和生产实践工作，具有借鉴与指导作用。本教材从2004年投入使用以来，历经了10年的教学实践，取得了很好的教学效果，受到了主讲教师和学生的的好评。

本书于2007年获北京市高等教育精品教材称号。复杂物质剖析课程分别获得2010年国家级精品课程，2010年北京市高等学校精品课程，并于2013年获得国家级精品资源共享课程称号。

本教材自2004年5月出版发行后，在全国多家书店销售，并被多所高校选做教学参考书，现根据我们在使用本教材进行教学的一些体会，并吸收了兄弟院校对本书提出的宝贵意见和建议，对第一版作了修订。根据原作者的意见及授权，这次修订工作由董慧茹和王志华共同完成。

这次修订主要进行下述两方面工作。

① 对原书内容做了较大幅度的修订，增加了一些最新的剖析前处理技术和剖析案例，如固相萃取、各种微萃取技术、加速溶剂萃取、超临界流体萃取、高速逆流色谱、毛细管电泳、膜分离技术等；增加了环境样品中重金属元素的形态分析，以及各种联用技术的实际应用案例；并增加了编者近年来的一些剖析方面的科研成果。为了保持本书简明这一特点，增加的内容也力求精练。

② 对原书的一些不当之处做了修订和适当的调整，对一些陈旧的内容进行了删除，使之能紧跟剖析技术的发展前沿，如对原“食品剖析”一章的内容进行了重新编写；并将“复杂样品的分离与纯化”单独作为一章，使全书更趋合理，更加实用。

本书由董慧茹、王志华主编，柯以侃参编。由于我们的水平有限，这次修订仍会有些不能令人满意的地方，不当之处，恳请读者批评指正。

编者

2014年12月

# 第一版前言

凡是涉及化学的领域几乎都离不开剖析，剖析作为分析科学中的一个重要学科分支，在生产实践和科学研究中的地位日益重要，得到了分析科学界的共识，并广泛应用于化学、化工、农业、医药、材料科学、生命科学和环境科学等各个领域。

剖析作为分析科学的前沿学科之一，不仅有独特的工艺技术，而且有其基础理论体系。国内有关复杂物质剖析方面的专著，除洪少良写的《有机物剖析技术基础》和王敬尊等写的《复杂样品的综合分析——剖析技术概论》外，目前尚很少见。本书的写作目的有两个，一是作为高等学校工业分析专业学生的专业课教材，二是为分析工作者提供一本有实用价值的参考书。

剖析研究中的样品通常是组成复杂的混合体系，它们广泛来源于材料、能源、环境和生命等科学领域中的一些实际样品。不同的样品体系，其剖析程序、分离纯化及结构分析方法亦不完全相同。本书拟把一些体系和性质相近的样品归纳为一类，从各类复杂物质剖析的特点和要求入手探讨其剖析过程的特点，并以一些典型样品的剖析为例展示剖析工作的思路，揭示各种分离及结构鉴定方法的选用规律，供剖析工作者参考。

本书的特点之一是系统地介绍了各类复杂物质的剖析特点、剖析思路、剖析程序和剖析方法，具有可操作性，读者可从中获得启发与借鉴；特点之二，本书从材料科学、环境科学、能源科学和生命科学等领域中选取了大量典型的实际样品作为剖析实例，介绍其剖析技术的特点，提供剖析工作的一般程序，以期对分析学科中的一些综合分析难题，特别是材料科学和新产品的开发研究、引进产品的国产化研究等课题的解决，达到举一反三的功效。

因高等学校化学化工类专业普遍设置仪器分析课程，所以本书对气相色谱、高效液相色谱及用于结构鉴定的各种波谱分析方法不再单独进行介绍，而是直接用于各类复杂物质的剖析中。有关这一部分内容，读者可参阅有关专著。

本书共分十章。第一章、第二章、第三章、第四章（第一节、第二节）、第六章（第一节、第三节～第六节、第十节）、第八章、第九章、第十章由董慧茹编著；第四章（第三节）、第五章、第六章（第二节、第七节～第九节）由柯以侃编著；第七章由王志华编著。

本书可作为高等院校工业分析、应用化学、精细化工、高分子材料和环境化学等专业的教材，也可供从事新材料和精细化工产品等开发研究及与分析相关领域中的工程技术人员和科研工作者参考。

本书引用的剖析实例部分来自文献，在这里，仅对这些文献的所有作者表示衷心的感谢。

感谢!

本教材是北京化工大学 2003 年校级教材立项项目。

由于编者水平所限，书中可能存在着错误和疏漏之处，恳请读者批评指正。

**编者**  
**于北京化工大学**  
**2004 年 1 月**

# 目 录

|                             |           |
|-----------------------------|-----------|
| <b>第一章 绪论</b>               | <b>1</b>  |
| <b>第一节 剖析工作的现状、特点、作用及展望</b> | <b>1</b>  |
| 一、剖析工作的现状                   | 1         |
| 二、剖析工作的特点                   | 2         |
| 三、剖析工作的作用                   | 3         |
| 四、剖析工作的局限性                  | 4         |
| 五、剖析工作的展望                   | 4         |
| <b>第二节 剖析工作的一般程序</b>        | <b>5</b>  |
| 一、对样品有关信息的了解                | 5         |
| 二、对样品的一般性质考察                | 5         |
| 三、样品的分离                     | 7         |
| 四、纯度鉴定                      | 8         |
| 五、样品中各组分的定性及结构分析            | 8         |
| 六、样品中各组分的定量分析               | 11        |
| 参考文献                        | 11        |
| <b>第二章 复杂样品的分离与纯化</b>       | <b>12</b> |
| <b>第一节 复杂样品的分离方法</b>        | <b>12</b> |
| 一、物理、化学分离法                  | 12        |
| 二、色谱分离法                     | 15        |
| 三、各种新型的分离方法                 | 20        |
| 四、分离方法的选择及一般程序              | 38        |
| <b>第二节 联用技术</b>             | <b>40</b> |
| 一、GC-MS 联用                  | 40        |
| 二、HPLC-MS 联用                | 41        |
| 三、CE-MS 联用                  | 42        |
| 四、GC-FTIR 联用                | 43        |

|                      |    |
|----------------------|----|
| 五、HPLC-FTIR 联用 ..... | 44 |
| 六、HPLC-NMR 联用 .....  | 44 |
| 参考文献 .....           | 45 |

### **第三章 表面活性剂的剖析** 48

|                                 |    |
|---------------------------------|----|
| <b>第一节 概述</b> .....             | 48 |
| 一、表面活性剂的分类 .....                | 48 |
| 二、表面活性剂的定性鉴定 .....              | 49 |
| <b>第二节 表面活性剂的分离与纯化</b> .....    | 51 |
| 一、萃取法 .....                     | 51 |
| 二、离子交换法 .....                   | 52 |
| 三、色谱法 .....                     | 53 |
| <b>第三节 表面活性剂的结构分析</b> .....     | 56 |
| 一、紫外光谱法 .....                   | 56 |
| 二、红外光谱法 .....                   | 57 |
| 三、核磁共振光谱法 .....                 | 59 |
| 四、质谱法 .....                     | 60 |
| <b>第四节 表面活性剂样品剖析实例</b> .....    | 60 |
| • 实例 1 Kieralon OL 净洗剂的剖析 ..... | 60 |
| • 实例 2 增稠剂的剖析 .....             | 64 |
| • 实例 3 进口合成纤维油剂的剖析 .....        | 68 |
| 参考文献 .....                      | 75 |

### **第四章 染料剖析** 76

|  |    |
|--|----|
| <b>第一节 染料分类</b> .....                  | 76 |
| <b>第二节 染料的分离与纯化</b> .....              | 77 |
| <b>第三节 染料的结构及定性定量分析</b> .....          | 78 |
| 一、染料的结构分析 .....                        | 78 |
| 二、染料的定性定量分析 .....                      | 80 |
| <b>第四节 染料剖析实例</b> .....                | 81 |
| • 实例 1 Resoline Red F3BS 染料的结构剖析 ..... | 81 |
| • 实例 2 Lanaset Violet B 染料的剖析 .....    | 83 |
| • 实例 3 活性黄 LS 的结构剖析 .....              | 87 |
| 参考文献 .....                             | 91 |

### **第五章 感光材料剖析** 92

|                              |    |
|------------------------------|----|
| <b>第一节 感光材料剖析的一般过程</b> ..... | 92 |
|------------------------------|----|

|            |                                   |     |
|------------|-----------------------------------|-----|
| <b>第二节</b> | <b>感光材料中各种组分的分离与纯化</b> .....      | 93  |
|            | 一、柱色谱法 .....                      | 93  |
|            | 二、薄层色谱法 .....                     | 94  |
| <b>第三节</b> | <b>感光材料剖析实例</b> .....             | 95  |
|            | · 实例 1 计算机彩色静电复印液体显影剂剖析 .....     | 95  |
|            | · 实例 2 医用 X 光片涤纶片基蓝色分散染料的剖析 ..... | 103 |
|            | · 实例 3 偏光片中的染料剖析 .....            | 108 |
|            | 参考文献 .....                        | 110 |

## **第六章 涂料剖析** **111**

|            |                                |     |
|------------|--------------------------------|-----|
| <b>第一节</b> | <b>概述</b> .....                | 111 |
|            | 一、涂料的组成 .....                  | 111 |
|            | 二、涂料的分类 .....                  | 112 |
| <b>第二节</b> | <b>涂料的分离与纯化</b> .....          | 112 |
|            | 一、涂料中溶剂的分离与鉴定 .....            | 113 |
|            | 二、无机颜料与高聚物的分离及纯化 .....         | 114 |
|            | 三、涂料中助剂的分离 .....               | 115 |
|            | 四、涂料中各组分的定量分析 .....            | 116 |
| <b>第三节</b> | <b>涂料的红外光谱特征</b> .....         | 116 |
|            | 一、涂料中常用无机填料和颜料的红外光谱特征 .....    | 116 |
|            | 二、几种常用涂料的红外光谱特征 .....          | 117 |
| <b>第四节</b> | <b>涂料剖析实例</b> .....            | 119 |
|            | · 实例 1 舰用 235 多功能环氧涂料的剖析 ..... | 119 |
|            | · 实例 2 紫外光固化清漆的剖析 .....        | 122 |
|            | · 实例 3 一种未知涂料的化学成分剖析 .....     | 126 |
|            | 参考文献 .....                     | 128 |

## **第七章 新型化学品、助剂、添加剂等的剖析** **129**

|            |                             |     |
|------------|-----------------------------|-----|
| <b>第一节</b> | <b>纺织助剂的剖析</b> .....        | 129 |
|            | 一、织物上整理剂的剖析 .....           | 129 |
|            | 二、煮练助剂剖析 .....              | 130 |
|            | 三、染色助剂剖析 .....              | 131 |
|            | 四、纺织助剂剖析实例 .....            | 131 |
|            | · 实例 1 氨基硅油柔软剂的剖析 .....     | 131 |
|            | · 实例 2 通用油剂 CKS 的剖析 .....   | 133 |
| <b>第二节</b> | <b>石油制品中添加剂的剖析</b> .....    | 137 |
|            | 一、石油制品中添加剂的分离、纯化及结构鉴定 ..... | 137 |
|            | 二、石油制品中添加剂的剖析实例 .....       | 138 |

|            |                                    |     |
|------------|------------------------------------|-----|
| · 实例 1     | 润滑油黏度指数改进剂的剖析                      | 138 |
| · 实例 2     | 合成航空润滑油的组成剖析                       | 142 |
| <b>第三节</b> | <b>进口车蜡的剖析</b>                     | 143 |
|            | 一、不挥发物的分离及结构鉴定                     | 144 |
|            | 二、可挥发物的分离及结构鉴定                     | 146 |
|            | 三、剖析结果                             | 146 |
| <b>第四节</b> | <b>蒸汽驱油用高温发泡剂 SD1020 的剖析</b>       | 147 |
|            | 一、发泡剂的组成元素                         | 147 |
|            | 二、样品的分离与提纯                         | 147 |
|            | 三、样品的定性定量分析                        | 148 |
|            | 四、结论                               | 150 |
| <b>第五节</b> | <b>进口水溶性助焊剂的剖析</b>                 | 150 |
|            | 一、样品的分离与鉴定                         | 150 |
|            | 二、定量分析                             | 153 |
|            | 三、剖析结果                             | 153 |
| <b>第六节</b> | <b>水泥泡沫剂的剖析</b>                    | 153 |
|            | 一、水泥泡沫剂的初步试验                       | 154 |
|            | 二、试样中各组分的分离                        | 154 |
|            | 三、结论                               | 158 |
| <b>第七节</b> | <b>TRET-O-LITE DS-690 原油破乳剂的剖析</b> | 158 |
|            | 一、样品的分离                            | 159 |
|            | 二、定性分析及结构鉴定                        | 159 |
|            | 三、结论                               | 161 |
| <b>第八节</b> | <b>抛光剂的剖析</b>                      | 162 |
|            | 一、样品的分离                            | 162 |
|            | 二、各组分的结构鉴定                         | 162 |
|            | 三、结论                               | 164 |
| <b>第九节</b> | <b>塑料抛光膏的剖析</b>                    | 164 |
|            | 一、抛光膏的初步试验                         | 164 |
|            | 二、抛光膏的分离与鉴定                        | 165 |
|            | 三、结论                               | 167 |
| 参考文献       |                                    | 167 |

## **第八章 高分子材料的剖析** **169**

|            |                     |     |
|------------|---------------------|-----|
| <b>第一节</b> | <b>高分子材料的简单定性分析</b> | 169 |
|            | 一、高分子材料的分类          | 169 |
|            | 二、高分子材料的用途和外观       | 170 |
|            | 三、高分子材料的燃烧试验        | 170 |

|            |                                   |            |
|------------|-----------------------------------|------------|
|            | 四、高分子材料的干馏试验 .....                | 172        |
|            | 五、高分子材料的溶解性试验 .....               | 172        |
| <b>第二节</b> | <b>高分子材料的分离与纯化 .....</b>          | <b>173</b> |
|            | 一、溶解沉淀法 .....                     | 173        |
|            | 二、萃取法 .....                       | 174        |
|            | 三、高分子复合材料的分离 .....                | 174        |
|            | 四、各种添加剂的分离与鉴定 .....               | 174        |
| <b>第三节</b> | <b>高分子材料的结构分析 .....</b>           | <b>175</b> |
|            | 一、红外光谱法 .....                     | 176        |
|            | 二、裂解气相色谱法 .....                   | 180        |
|            | 三、闪蒸气相色谱法 .....                   | 181        |
|            | 四、化学降解法 .....                     | 181        |
|            | 五、质谱法 .....                       | 182        |
|            | 六、核磁共振光谱法 .....                   | 183        |
| <b>第四节</b> | <b>高分子材料剖析实例 .....</b>            | <b>183</b> |
|            | • 实例 1 一种聚酰亚胺复合材料制件的剖析 .....      | 183        |
|            | • 实例 2 聚酰亚胺中溶剂成分的剖析 .....         | 185        |
|            | • 实例 3 一高分子弹性体的剖析 .....           | 186        |
|            | • 实例 4 轮胎硫化胶的剖析 .....             | 189        |
|            | • 实例 5 英国不饱和聚酯玻璃纤维增强模塑料剖析研究 ..... | 193        |
|            | • 实例 6 液态密封胶的剖析 .....             | 196        |
|            | • 实例 7 某航空橡胶密封材料的剖析 .....         | 197        |
|            | • 实例 8 聚醚砜/微纳纤维素复合膜材料的剖析 .....    | 199        |
|            | 参考文献 .....                        | 202        |

## **第九章 药物剖析** **203**

|            |                          |            |
|------------|--------------------------|------------|
| <b>第一节</b> | <b>样品的前处理 .....</b>      | <b>204</b> |
|            | 一、溶剂萃取法 .....            | 204        |
|            | 二、固相萃取技术 .....           | 206        |
| <b>第二节</b> | <b>药物成分的分离与纯化 .....</b>  | <b>206</b> |
|            | 一、系统溶剂分离 .....           | 207        |
|            | 二、沉淀分离 .....             | 208        |
|            | 三、色谱分离 .....             | 209        |
| <b>第三节</b> | <b>药物成分的定性鉴别方法 .....</b> | <b>210</b> |
|            | 一、理化法 .....              | 210        |
|            | 二、色谱法 .....              | 210        |
|            | 三、红外光谱法 .....            | 218        |
|            | 四、色谱-质谱联用技术 .....        | 225        |

|  |     |
|--|-----|
| <b>第四节 药物剖析实例</b> .....                    | 227 |
| • 实例 1 肉苁蓉挥发性化学成分的剖析 .....                 | 227 |
| • 实例 2 苦黄注射液中乙酸乙酯萃取物的剖析 .....              | 229 |
| • 实例 3 山柰挥发油的剖析 .....                      | 232 |
| • 实例 4 竹节人参中氨基酸和皂苷特征组分的分析鉴别 .....          | 234 |
| • 实例 5 UPLC-MS 分析侧柏叶中黄酮类化合物 .....          | 236 |
| • 实例 6 黄芩及复方野马追胶囊中黄酮类成分的 LC-MS/MS 分析 ..... | 239 |
| 参考文献 .....                                 | 241 |

## **第十章 环境样品的剖析** **242**

|                                    |     |
|------------------------------------|-----|
| <b>第一节 环境样品的前处理</b> .....          | 242 |
| 一、环境样品前处理的传统方法 .....               | 242 |
| 二、环境样品前处理的新技术与新方法 .....            | 246 |
| <b>第二节 环境样品中有机污染物的分离及鉴定</b> .....  | 247 |
| 一、环境样品的色谱分离及鉴定 .....               | 247 |
| 二、环境样品中常用的联用技术 .....               | 249 |
| <b>第三节 环境样品中重金属元素的形态分析</b> .....   | 250 |
| 一、天然水中重金属的形态分析方法 .....             | 251 |
| 二、土壤或沉积物中重金属的形态分析方法 .....          | 253 |
| 三、大气颗粒物中重金属的形态分析方法 .....           | 254 |
| <b>第四节 环境样品剖析实例</b> .....          | 255 |
| • 实例 1 成都地区大气颗粒物中复杂有机物的剖析 .....    | 255 |
| • 实例 2 大气挥发性有机物的剖析 .....           | 257 |
| • 实例 3 广州市饮用水中挥发性有机物的剖析 .....      | 258 |
| • 实例 4 鄱阳湖枯水期有机污染物的剖析 .....        | 261 |
| • 实例 5 九江炼油厂污水中有机污染物的剖析 .....      | 264 |
| • 实例 6 北京近郊土壤中痕量半挥发性有机污染物的剖析 ..... | 268 |
| • 实例 7 长沙市夏季大气颗粒物中重金属的形态剖析 .....   | 271 |
| 参考文献 .....                         | 275 |

## **第十一章 食品剖析** **277**

|                              |     |
|------------------------------|-----|
| <b>第一节 食品样品的前处理</b> .....    | 277 |
| 一、样品的制备 .....                | 277 |
| 二、样品前处理的传统方法 .....           | 278 |
| 三、样品前处理的新方法 .....            | 279 |
| <b>第二节 食品成分的分离分析方法</b> ..... | 280 |
| 一、食品成分的分类 .....              | 280 |
| 二、食品成分的分离及鉴定方法 .....         | 283 |

|            |  |     |
|------------|--|-----|
| <b>第三节</b> | <b>食品样品剖析实例</b> .....  | 288 |
| • 实例 1     | 多菌种发酵无醇饮料中氨基酸的剖析 .....   | 288 |
| • 实例 2     | 新鲜草莓中水溶性维生素的剖析 .....   | 289 |
| • 实例 3     | 高效毛细管电泳法测定香菇多糖中单糖的组成 .....   | 290 |
| • 实例 4     | 鸭骨架的营养成分剖析 .....   | 293 |
| • 实例 5     | 顶空固相微萃取-气相色谱-质谱法测定北极虾虾头的挥发性成分 .....  | 295 |
| • 实例 6     | HPLC 同时测定食品中黄曲霉毒素 B <sub>1</sub> 、黄曲霉毒素 B <sub>2</sub> 、黄曲霉毒素 G <sub>1</sub> 和黄曲霉毒素 G <sub>2</sub> ..... | 298 |
| • 实例 7     | 气相色谱法测定蔬菜中菊酯类农药残留 .....  | 302 |
| • 实例 8     | 中药保健食品中有机氯农药残留分析 .....   | 303 |
| 参考文献       | .....  | 305 |

## 第一节 剖析工作的现状、特点、作用及展望

在现代分析科学中,面临的最困难课题之一,就是对复杂体系样品的分析。所谓复杂体系,是指样品组分的多样性,如无机与有机化合物共存一体,高分子、大分子与小分子化合物共存一体,生命与非生命物质共存一体等。要对这种复杂体系的样品提供全面、准确的结构与成分表征信息,采用简单的分析方法和操作过程已不能胜任。要圆满完成一个复杂体系样品的全分析,几乎囊括了全部的现代分析方法,这就是所谓的综合分析(comprehensive analysis),也简称为剖析。剖析是分析科学中的一个专业术语,也是分析科学中的一个学科。

剖析这个术语在材料科学,特别是商品生产领域中已广泛使用。据悉国内外许多企业的开发研究系统中,都利用剖析技术注视和跟踪本行业的最新研究成果与发展动态,以提供准确的科技情报与市场信息。剖析也是直接取得国外第一手先进技术资料的途径之一,各个企业要谋求生存和发展,一是要使产品质量稳步上升,二是要使产品品种不断更新换代,以适应市场竞争的需求。而发展新产品、新材料的多快好省的途径就是剖析工作先行。

### 一、剖析工作的现状<sup>[1]</sup>

#### 1. 分析化学教学中的盲点

在现代中外分析化学教科书中大都是以单一分析方法为章节,如:电化学分析、色谱、原子光谱、分子光谱、核磁共振波谱、质谱、X射线衍射分析、电子能谱分析等。作为分析化学知识的系统教学,使学生掌握相关的理论知识,无疑是非常重要的。但对如何综合应用这些分析技术去解决复杂体系的样品分析问题却很少涉及,因此当遇到一些复杂的实际样品分析时,对于应该选择什么仪器,采用什么分析程序,则显得束手无策。

#### 2. 分析技术研究中的弱点

对复杂体系样品的剖析,只靠某一种分析仪器或某一种分析方法,往往是无法完成的;此时就需要将几种分析方法或几种分析仪器结合起来作为一种专门的分析技术,才能胜任。催化、材料、石油、环境等研究课题中所遇到的分析问题,大多是几种分析技术的组合。如:元素分析需采用各种原子光谱和离子色谱等;形态分析需采用X射线衍射分析,电子能谱和分子光谱等;表面与微区分布分析需采用电子能谱、红外光谱、拉曼光谱、电子探针等;分离分析需采用精馏分离、萃取分离、离心分离、色谱分离、膜分离、电泳分离等;结构分析包括分子结构分析、晶体结构分析、离子结构分析、空间结构分析,对不同的结构分

析需采用不同的分析技术。

### 3. 分析应用研究中的难点

生命、材料、能源和环境科学中的许多实际样品是复杂的多组分体系，分析者首先了解到的是样品的来源、用途和形态等信息。虽然某些同类样品的剖析方法有一些共同的特点，如染料、高分子材料、表面活性剂、中草药等未知样品的剖析已有一些文章和专著发表，但很难总结出一种分析方法适用于所有未知样品的剖析。所以，对每种样品的剖析都是一个综合分析研究课题。剖析结果大多是一种“推论”，通常还需要合成、加工和应用来确证。一个好的剖析专家，不仅应精通综合分析，还应熟悉与剖析对象有关的学科，如结构、组成、合成方法、加工应用等。

## 二、剖析工作的特点

剖析研究中的样品，通常是组成复杂的混合体系，现代分析方法中没有一种方法能独立完成这些复杂的分析课题，必须采用多种方法进行综合分析，由此构成了剖析技术的一些鲜明特点。

### 1. 剖析样品的复杂性和多样性

剖析样品的复杂性和多样性主要表现在下述 5 个方面。

(1) 剖析对象的多样性 随着科学技术的发展，剖析研究的对象必须面对用途广泛的市场商品及材料科学、环境科学、生命科学、能源科学等诸多领域中的多种多样的样品，而且剖析的样品通常是组成复杂的混合体系，如许多复合材料常是由无机、有机和高分子等多种成分构成。即使对于种类已知的样品如橡胶，其中除含橡胶主体外、通常还可能含有抗氧剂、光稳定剂、增塑剂、软化剂、填充剂、硫化剂、阻燃剂、抗静电剂等各种组分。对这些复杂样品的剖析，已主要不是元素的组成，而是各种元素的连接与组合方式，即物质的分子结构、元素的价态和相态等的分析。

(2) 样品中各组分的含量变化悬殊 在复杂体系的样品中，各组分的含量常相差悬殊，有些样品常量、微量与痕量组分共存一体。材料中的微量、痕量组分可能对材料的性能起关键的作用，如半导体中掺入微量杂质导致晶格缺陷才使它具有特殊功能，人们感兴趣的往往就是其中的这些微量、痕量的组分。

不同含量的组分，要求不同的分析方法和分析过程，样品中大量的物质可能会干扰、掩蔽少量物质的分析，使得微量、痕量物质的测定变得非常困难，其结果是只能剖析出主要组分，不能剖析出复杂物质的所有组分。因此，就会出现剖析后合成的材料性能远不如原来好的现象。

(3) 样品取样量的限制 剖析的各种样品，根据其要求和条件所限，有时样品取样量会受到严格的限制。如兴奋剂检查，取样量有规定，且只能一次取样，这就要求剖析的程序要合理，提供的数据要全面可靠。

(4) 样品组分的稳定性不同 样品中的某些组分在加工、贮存或应用过程中，可能会发生某些变化。以涂料为例，在刷涂料前，根据配方把具有不同性质和作用的组分混合在一起，混合均匀后粉刷，最后涂料干燥成膜。此时，从涂料表面刮一层涂料下来分析，得到的是已经发生了某些化学反应后的产物。同样，高分子材料中的抗氧化剂和交联剂等的剖析，通常得到的也是发生某些反应后的产物。通过剖析，需要由此反推其原始物质的状态及含量，这无疑增加了剖析工作的难度。

(5) 复合材料等的分布影响 材料组成完全相同, 却得到性能不同的产品。比如, 高分子材料中分子规则排列成晶区, 无序排列形成非结晶区, 特别是复合材料中各种组分的微区、表面、空间分布等等, 直接影响材料的性能, 这与加工工艺有关。

## 2. 剖析方法的综合性

现代分析科学领域中的许多分析方法, 例如, 常量、微量、痕量分析; 无机分析、有机分析、生化分析; 元素分析、成分分析、结构分析、形态分析; 微区、表面、空间分布分析; 宏观形貌、微观结构分析; 静态、动态分析; 破坏、非破坏分析等方法和相应的仪器, 都可能被剖析工作所利用。为了圆满地完成一个复杂物质剖析, 整个剖析过程几乎囊括全部的现代分析方法。

因此, 剖析研究的鲜明特点是分析方法的综合性, 综合分析是分析科学的前沿学科之一, 既是技术又是科学。

剖析工作者要熟悉和采用最新的分析仪器和方法, 提供更丰富、更准确的结构与成分信息, 以提高剖析工作的效率和准确性, 所以完善的仪器设备和综合分析能力, 是做好剖析工作的重要基础。

## 3. 剖析过程的复杂性

由于样品的来源、组成和状态的多样性, 以及剖析要求的特殊性, 决定了剖析过程的复杂性。剖析工作通常包括三个重要过程: 一是将样品中各组分逐一分开的分离、纯化过程; 二是对分离开的各组分进行定性、定量及结构鉴定的分析过程; 三是对推测的结构进行合成、加工及应用性能验证和评价过程。所以整个剖析过程是把分离分析、结构分析与成分分析相结合的一门综合分析技术, 又是把分析信息与合成加工及应用技术紧密结合的一项系统工程。不同体系样品的剖析程序可能相差很大, 增加了剖析研究过程的复杂性。

# 三、剖析工作的作用

在新产品的开发与国产化研究工作中, 根据剖析给出的结构与组成信息, 再通过自己的合成与加工工艺研究, 一项新产品就可能应运而生。通过合成、加工以及试制品的应用性能评价, 又可进一步检验剖析研究提供的信息是否准确, 剖析结果是否有错误和遗漏, 必要时还需对样品进行再一次剖析。因此剖析是与合成、加工及应用研究密切相关的一门交叉学科, 是与科学和生产实践关系紧密的一种分析技术。

### 1. 在新产品开发和 innovation 研究中的作用

剖析工作与新产品的开发密切相关, 据悉在一些大的产业公司内, 通常都是利用剖析技术密切注视市场最新产品的结构和成分信息, 了解同行的研究动向、最新技术成就, 以确定自己的研究方向。如我国的一些染料新品种就是在剖析基础上研制成功的, 又如我国感光材料工业的发展, 也是剖析应用的成功示例之一。由此可见, 直接取材于市场上流通的优质商品进行剖析, 是快速开发新产品的捷径之一。

### 2. 在引进技术的消化与国产化研究中的作用

在引进国外制造技术中, 与之配套的大批原材料和一些零部件, 通常不含在引进技术的协议中, 因此它们的国产化研究至关重要。通过剖析研究, 了解各种进口原材料的结构、组成, 进一步寻找国内外同类产品, 有利于国际竞争和国产化研究。如我国进口的大型轧钢机械中, 价格昂贵和易磨损的固体自润滑轴承部件, 就是王敬尊<sup>[2]</sup>通过剖析很快实现了国产

化，其产品荣获了国家“金龙”发明奖。

### 3. 在商品质量检验中的作用

在流通领域中的假冒伪劣商品一直困扰着人们，借助于剖析技术可识别各种货物的真伪。如某地曾从国外进口一批正辛醇，但外方提供的却是有侧链的异辛醇，用这种辛醇制造的邻苯二甲酸酯加工的农用塑料薄膜，导致大面积农作物的死苗事故。我方经剖析提出确切的分析数据，逼迫外方给予了应有的经济赔偿。又如通过剖析发现掺了回收废旧塑料的聚乙烯，造成加工材料的强度下降；轰动全国的工业酒精勾兑的白酒，造成数百人致伤、致残、致死的假酒案等。可以说，剖析是鉴别假冒伪劣商品的有效途径之一。

### 4. 在环境污染物鉴定中的作用

在环境污染物的鉴定与治理中，利用剖析技术对污染物的种类进行定性鉴别，一方面可以了解环境的污染程度，另一方面还可以追溯污染物的来源，从而做到从污染源头上进行治理与控制。

### 5. 在考古学研究中的作用

著名的长沙马王堆出土文物中防腐剂、各种织物及颜料的剖析，曾为我国古代灿烂的科学技术与文化提供了有力的证据；采用质子荧光方法对两千多年前的越王勾践的宝剑进行了分析，揭示了我国古代冶金史上的辉煌篇章。

## 四、剖析工作的局限性

剖析工作在生产和科学研究中的重要作用不言而喻，但需指出的是，并不是什么东西都能剖析，也不是任何样品都可准确剖析，在实践中发现人工合成或复配的产品容易剖析，而天然产品（如中草药）的剖析难度就很大。在剖析研究中也并没有常胜将军，任何高明的剖析专家也会遇到解决不了的复杂体系分离和复杂结构鉴定的难题。即使剖析结果很完整、很成功，也可能无法制成预期性能的产品。这可能因为：第一，剖析的样品中，某些关键组分由于在合成、加工或贮存过程中发生了变化或完全消失，已很难从产品中获得准确信息；第二，由于剖析技术与水平所限，某些微量组分可能在分离中丢失，或得到的纯品纯度不够，提供信息不够准确，导致结论有误，或是采用仪器方法的灵敏度、准确度不够高，给出的结果不够全面；第三，许多产品的性能还受其合成、加工工艺的限制，如聚合物的结构规整度、支化度、分子量分布，结晶状态以及加入助剂在整体中的分布等对材料的性质均有很大影响，而这些结构信息又很难通过剖析研究而全部弄清。所以在一些新材料研制中，仅靠剖析技术是不够的，还必须发挥多学科的综合作用。

## 五、剖析工作的展望

近年来，有关剖析工作进展的文章陆续出现，如林鸿波等<sup>[3]</sup>对未知物组分割析技术方法设计及应用前景进行了评述，程静等<sup>[4]</sup>对航空航天材料未知物剖析技术的发展进行了展望。

### 1. 分析学科研究中的重点

目前，剖析工作受到了分析和相关学科研究者的普遍关注。国家自然科学基金曾明确指