

CHEMOMETRICS VÀ NHỮNG ỨNG DỤNG TRONG LÃNH VỰC HOÁ PHÂN TÍCH TẠI VIỆT NAM

*Nguyễn Phúc Thịnh, Nguyễn Hoàng Phú, Nguyễn Ánh Mai**

Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, ĐHQG-HCM
npthinh@hcmus.edu.vn, nphu@hcmus.edu.vn, namai@hcmus.edu.vn

Tóm tắt

Để bảo đảm chất lượng hàng hoá lưu hành trên thị trường, trong sản xuất việc kiểm tra chất lượng không chỉ thực hiện đối với sản phẩm hoàn tất mà cả nguyên liệu và các sản phẩm trung gian. Với việc mở rộng quan hệ thương mại dẫn đến nguồn hàng hoá, nguyên liệu nhập vào VN rất đa dạng, chưa kể đến nguyên liệu sản xuất trong nước. Để đáp ứng nhu cầu kiểm soát chất lượng hàng hoá với quy mô lớn này cần có những phương pháp phân tích nhanh, chi phí thấp với độ chính xác vừa phải.

Chemometrics, các phương pháp toán và thống kê dùng để phân tích các dữ liệu phổ như NIR, Raman, UV,... đo đạc trực tiếp trên mẫu hay trên các dịch chiết đã được phát triển mạnh mẽ ở nhiều nước đáp ứng được mục tiêu này.

Trong bài này nhóm tác giả trình bày một số ứng dụng của chemometrics trong việc định tính, bán định lượng các đối tượng như dược phẩm và thực phẩm.

Từ khóa: hồi quy đa biến, ứng dụng trong Hóa phân tích, PCA, PLS,...

CHEMOMETRICS AND ITS APPLICATIONS IN THE FIELD OF ANALYTICAL CHEMISTRY IN VIET NAM

Nguyen Phuc Thinh, Nguyen Hoang Phu, Nguyen Anh Mai

Faculty of Chemistry, University of Science, VNU-HCM

npthinh@hcmus.edu.vn, nphu@hcmus.edu.vn, namai@hcmus.edu.vn

Abstract

For better quality of the products and efficiency in production, the quality control must be made not only on final products but also on raw materials and intermediates. In addition, Viet Nam has extended trade relationships with many countries around the world. Consequently, goods, raw material imported or exported into or out of the country increase in quantity and variety. The burden of analysis is therefore, even heavier. To meet the demand fast, simple, low-cost and with moderate accurate methods are of great interest. Chemometrics, employing mathematic and statistic tools, to analyze NIR, Raman, UV, spectra obtained directly on samples without any treatment has been extensively studied to solve the problem.

In this paper we will present some applications of chemometrics combined with spectrophotometry to identify and quantify food and pharmaceutical products.

Key words: chemometrics, apply for analytical chemistry, PCA, PLS,...