

ROLE ANALYTICKÉ CHEMIE V SOUČASNÉ VĚDĚ A PRAXI

KAREL ŠTULÍK

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Katedra analytické chemie, Albertov 2030, 128 40 Praha 2
stulik@natur.cuni.cz*

Došlo 17.1.08, přijato 3.3.08.

Klíčová slova: analytická chemie, definice, současný stav, požadavky, příklady aplikací

Současné přírodní vědy se vyznačují, podobně jako řada technických disciplín, obrovským objemem konkrétních poznatků, který stále rychleji narůstá. Tento rozvoj je však dán především metodologickým a technologickým pokrokem, spíše než zásadními teoretickými objevy. Základní principy, jako jsou např. kvantová mechanika či teorie relativity, jsou již poměrně letité a rozvíjejí se podstatně pomaleji – kýžená „teorie všeho“, která by harmonicky spojila popis nejmenších součástí hmoty s popisem vesmíru, stále chybí. Nicméně možnosti racionálního uchopení dějů v přírodě a jejich predikce vzrůstají, více a více se ukazuje vzájemné propojení disciplín a jejich společný základ. Poněkud zjednodušeně řečeno je zde pohyb k rostoucí exaktnosti, např. ve směru:

biologie → chemie → fyzika → matematika.

Z tohoto základního stavu věcí vyplývají některé konkrétnější rysy současné přírodovědy. Jsou to např.:

- Prolínají se a vzájemně se využívají teoretické a experimentální obory – teorie poskytuje základ pro experiment a vysvětluje experimentální výsledky, experiment slouží k ověřování a modifikaci teorie.
- Stále větší je úloha matematických, informatických a fyzikálních přístupů v chemii, vědách o zemi, biologii a medicíně.
- Hlavní rozvoj nastává na hranicích klasických disciplín (viz např. biofyziku či biochemii) – to vyžaduje práci ve skupině specialistů a přináší problémy ve vzájemné komunikaci mezi specialisty.
- Obrovský objem experimentálních dat klade stále větší nároky na jejich systematizaci, kritické posouzení a zobecnění. Společenský tlak na vědeckou produktivitu a co nejrychlejší aplikaci a komercializaci činí tyto záležitosti ještě složitějšími.
- Všechny výše uvedené rysy moderní přírodovědy vedou k tomu, že se vědci záhy úzce specializují a je nedostatek lidí s dostatečným nadhledem, schopných zobecnění a propojení konkrétností do větších celků.

Analytická chemie se velmi dobře hodí pro demonstraci výše uvedených tvrzení. Myslím, že i široká veřejnost si uvědomuje důležitost informací o identitě

a množství nejrůznějších látek ve všemožných oblastech života. Není však vůbec jednoduché definovat analytickou chemii, jejímž úkolem je poskytovat tyto informace. Co je nesporné: analytická měření jsou historicky hlavním pilířem, na němž spočívaly základy chemie jako rodící se vědecké disciplíny a v mnohém se o něj opíraly i základy dalších vznikajících přírodních věd. Dále pak analytická chemie je aplikovaný obor, který využívá poznatků prakticky všech přírodovědných oborů a na oplátku jim poskytuje data, která nezbytně potřebují; slouží i široké oblasti nejrůznějších technologických a obecně lidských aktivit. Zde však jednoznačnost končí.

Co tedy je analytická chemie? Na tuto otázku odpovídá německý fyzikální chemik devatenáctého století, Wilhelm Ostwald, slovy: „Analytická chemie je řemeslo, služka“. Druhou krajnost představuje maďarský analytický chemik dvacátého století, Ernő Pungor, který praví: „Analytická chemie je věda o vytváření signálu a jeho interpretaci“ (takto by samozřejmě analytická chemie pohltila značný podíl všech přírodních a technických věd). Osobně se mi nejvíce líbí názor třetí, vyslovený americkým chemikem dvacátého století, Herbertem Laitinenem: „Analytická chemie je věda o chemické charakterizaci a měření“. Tomuto spektru názorů odpovídají i tři názvy disciplíny: „die Analytik“, „Analytical Chemistry“ a „Analytical Science“; myslím, že v současnosti je poslední název nejvýstižnější.

Z těchto představ vychází pokus o definici analytické chemie:

„Analytická chemie je obor přírodních věd, založený nejen na všech chemických disciplínách, ale i na fyzice, biologii, teorii informace a řadě technických oborů. Podává informace o identitě, struktuře a množství chemických species v přírodních i člověkem vytvořených objektech a o distribuci těchto species v prostoru a čase. Spolupracuje s ostatními přírodními vědami při hledání souvislostí mezi chemickým složením látek a jejich vlastnostmi. Je to aplikovaný multidisciplinární obor s mnoha zpětnými vazbami, který akcentuje kolektivní práci při řešení problémů“¹.

Stručnější je definice formulovaná Federací evropských chemických společností:

„Analytical chemistry is a scientific discipline which develops and applies methods, instruments and strategies to obtain information on the composition and nature of matter in space and time“².

Z výše uvedeného vyplývá, že pole působnosti analytické chemie lze zhruba rozdělit do tří částí:

- obecný metodologický výzkum, využívající poznatků širokého spektra vědních a technických disciplín;
- účast na výzkumu i praxi mnoha oborů – chemie, biologie, lékařství, ekologie, věd o zemi, technických disciplín atd.);
- servisní činnost v průmyslu, obchodu, monitorování přírodního a pracovního prostředí, ve zdravotnictví atd.

Z hlediska vědeckého rozvoje jsou jistě zdaleka nejvýznamnější první dvě části. V této souvislosti se často vynořuje otázka, zda analytický chemik má pouze poskytovat data pracovníkům ostatních přírodovědných a tech-

nických oborů, nebo má-li se podílet i na interpretaci těchto dat. Jsem přesvědčen, že by měl setrvat po celou dobu výzkumu i aplikace, jak ostatně vyplývá i z výše uvedených definic analytické chemie. Analytičtí chemici by měli být a věřím, že i jsou, přínosem řešitelským kolektivům při kritickém posuzování významu a spolehlivosti experimentálních dat, protože pojmy reprodukovatelnosti, opakovatelnosti, správnosti a nejistoty měření patří k základním kamenům jejich činnosti. Kdybych chtěl jít až do krajnosti, pak bych řekl, že chemii lze v zásadě rozdělit na pouhé dvě obsáhlé části, chemii analytickou a syntetickou, i když jsem si vědom schématickosti takového rozdělení.

Nyní však k současnému stavu analytické chemie. Myslím, že hlavní faktory současného směřování jsou čtyři:

- nesmírný technologický rozvoj, umožňující složitá, citlivá a spolehlivá měření, často v nanoměřítku;
- obecná fyzikalizace měření (např. prudce narůstající význam hmotnostní spektrometrie, vibrační spektroskopie atd.);
- rozvoj výpočetní techniky a informatiky, který umožňuje softwarová řešení v mnoha případech, donedávna řešitelných pouze hardwarově (např. oddělování signálu od šumu a zlepšování selektivity při elektrochemických a spektroskopických měřeních);
- vzájemná inspirace s biologií – analytická chemie poskytuje obrovské soubory dat pro biology a současně kopíruje či přímo využívá biologické procesy (viz např. rozsáhlé pole biosenzorů či aplikace biospecifických interakcí v afinitních separačních postupech).

Z rychle narůstajících nároků na objem analytických dat, na analýzy stále složitějších systémů, na kvalitu analytických informací (citlivost stanovení, selektivita, současná identifikace a stanovení velkých počtů velmi podobných látek, spolehlivost experimentálních dat) a na přijatelné technické a ekonomické podmínky analytických měření vyplývá řada konkrétnějších vývojových směrů. Především nezbytnou součástí stále většího počtu analýz je vysoce účinný a selektivní separační krok. Dále pak rychle vzrůstající počet analýz vyžaduje použití nikoli jediné měřicí techniky, ale optimalizované kombinace dvou nebo i více vzájemně propojených technik. Takovéto kombinace se s oblibou nazývají „hyphenated techniques“ (hyphen je pomlčka mezi slovy) a typickými příklady jsou chromatografické či elektromigrační separace se současným použitím dvou nebo více detekčních technik, třeba HPLC-UV/VIS-ED (vysokoučinná kapalinová chromatografie následovaná spektrofotometrickou a elektrochemickou detekcí), nebo CE-MS/MS (kapilární elektroforéza s tandemovou hmotnostně spektrometrickou detekcí). Kombinace technik jsou „šity na míru“ danému analytickému problému a mohou být i značně složité, se spojeními měřicích bloků jak sériovými, tak paralelními. Dobrými příklady jsou v posledních letech tak populární molekulárně biologické projekty, genomika, proteomika, cellomika, aj. Veškerá analytická měření se neobejdou bez rozsáhlého použití výpočetních technik, od plánování experimentu, přes optimalizaci navržených experimentálních podmínek, vlast-

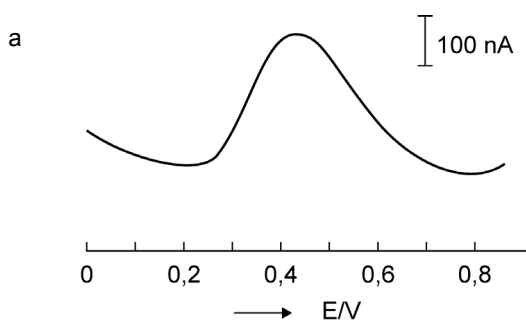
ní měření, až po zpracování a prezentaci naměřených dat.

Hlavní požadavky na analytika lze tedy shrnout takto:

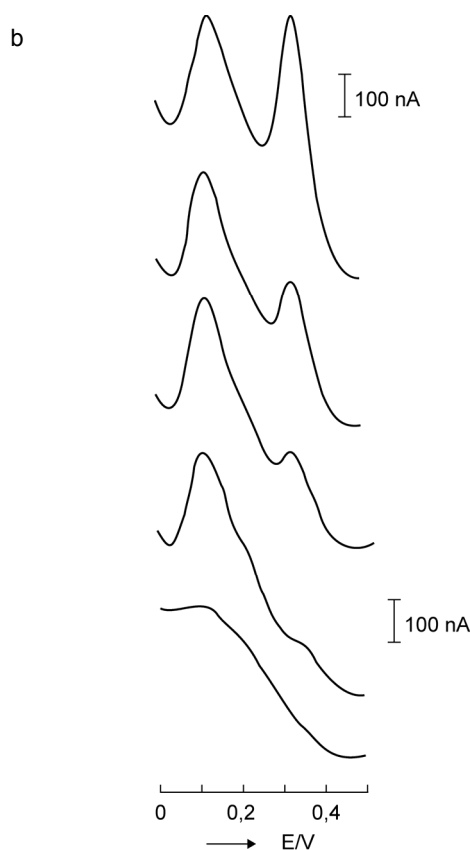
- Měl by poskytnout dostatečný (nikoli zbytečně velký) objem relevantní kvalitativní i kvantitativní informace v co nejkratším (mnohdy reálném) čase, co nejjednodušeji a co nejlevněji, s co nejmenším vynaložením lidské práce.
- Měl by být schopen kontinuálního (či alespoň periodického) měření, se zpětnou vazbou ke sledovanému systému – viz např. měření *in vivo* v lékařství a biologii (třebas monitorování úrovně důležitých iontů v krevním řečišti pacienta, který podstupuje dialýzu na umělé ledvině), sledování polutantů v přírodních vodách a v atmosféře či řízení kontinuálních průmyslových pochodů.
- Měl by poskytovat data o speciaci látek, to je o jejich rozdělení mezi různé chemické formy – typickým příkladem je rtuť, která v poslední době vzbuzuje až hysterický strach. Ve skutečnosti je kovová rtuť nepříliš nebezpečná. V přírodním prostředí se však vyskytuje i ve formě komplexů s organickými ligandy a ty jsou pro živé organismy toxické. Je tedy nezbytné identifikovat a stanovit tyto komplexy a určit distribuci iontů rtuti, především v přírodních vodách, v půdách a rostlinstvu.
- Měl by dodávat spolehlivá data o prostorovém složení látek, zejména např. v materiálových vědách a technologiích, při geologickém průzkumu apod.

Analytici mají nejmenší problémy s dosažením vysoké citlivosti měření. V současné době již lze postřehnout a určit i jednotlivé atomy (typickým příkladem je mikroskopie atomových sil, AFM – atomic force microscopy). Dosažení dostatečné selektivity měření a jednoznačná identifikace analytů jsou obtížnější, avšak různé kombinace experimentálních přístupů (viz např. hyphenated techniques), vtipné využívání rozdílů ve fyzikálně-chemických vlastnostech analytů, neobyčejně výkonné separační techniky, aplikace biospecifických interakcí a systematické užití výpočetních technik a databází většinou vede k přijatelným výsledkům. Nejméně uspokojivá situace je v „nejpřízemnějších“ stránkách analytických činností, jako jsou odběr a úprava vzorků materiálů, tak, aby vzorek skutečně reprezentoval mateřský materiál, dále nedostatek spolehlivých standardních materiálů, mnohdy i nedostatečné využívání „selského rozumu“, tj. nekritická důvěra v počítačová data, a konečně někdy i určitý úpadek manuální zručnosti při laboratorní práci. Hlavními důvody těchto problémů jsou nejen složitost reálných materiálů, reálných analytických podmínek i pracnost řešení konkrétních problémů a jejich generalizace, ale i jejich malá atraktivita z hlediska scientometrického posuzování pracovníků, a tudíž i malá ochota se jim věnovat.

Z výše uvedeného je zřejmé, že pole analytické chemie, rozsah a variabilita problémů i přístupů k jejich řešení jsou neobyčejně široké a je tedy nemožné podávat zde jakýsi systematický přehled. Uvádím proto na závěr jen pár typických konkrétních příkladů.



Obr. 1. Současné stanovení dopaminu (DA) a askorbové kyseliny (AA) na uhlíkové mikroelektrodě; a) směsný pík DA + AA před oxidací elektrody, b) oddělené píky při různých koncentracích analytů; (z výsledků K. Štulíka a spol.)

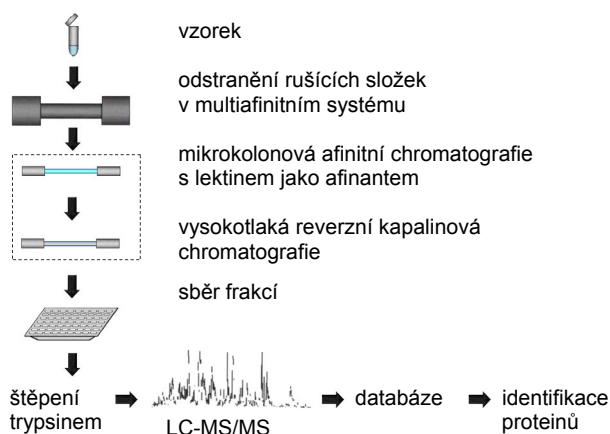


Příklad 1

Velmi jednoduché řešení důležitého problému pro biomedicínské studium a praxi je selektivní stanovení neurotransmiteru dopaminu a askorbové kyseliny, které jsou současně přítomny v buněčném materiálu. Mikroelektroda z uhlíkového vlákna se snadno zasune do vzorku, selektivního oddělení dvou signálů se dosáhne pulsní elektrochemickou oxidací uhlíkového vlákna – viz obr. 1.

Příklad 2

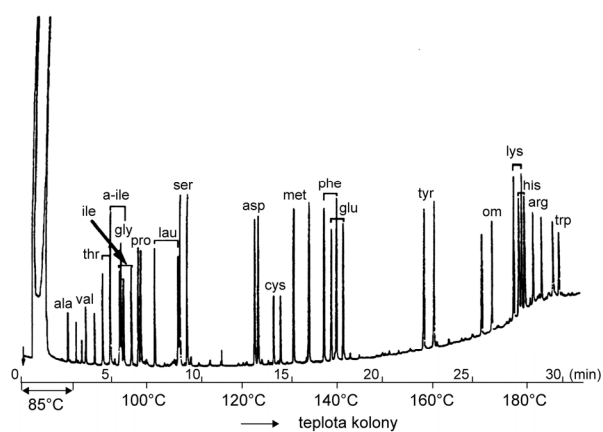
Tento příklad je opakem jednoduché analýzy uvedené v předchozím. Ilustruje využití složité kombinace měřicích technik a rozsáhlé databáze pro analýzu a jednoznačnou identifikaci početné skupiny vzájemně velmi podobných proteinů – viz obr. 2.



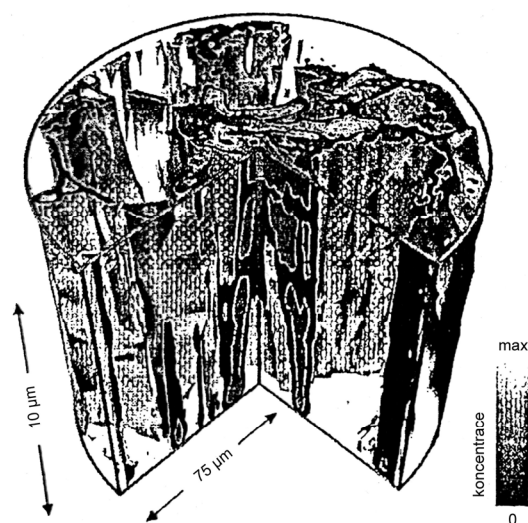
Obr. 2. Identifikace proteinů ve složité biologické matici s využitím afinitních separací, kombinace kapalinové chromatografie s tandemovou hmotnostní spektrometrií a porovnání s hmotnostně spektrometrickou databází (podle doktorské disertační práce M. Maděry, UK PĚF)

Příklad 3

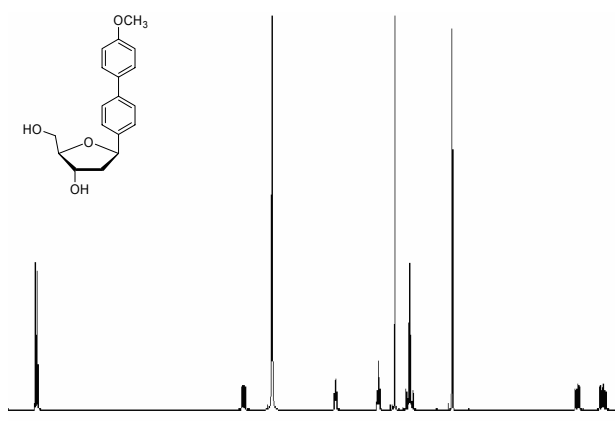
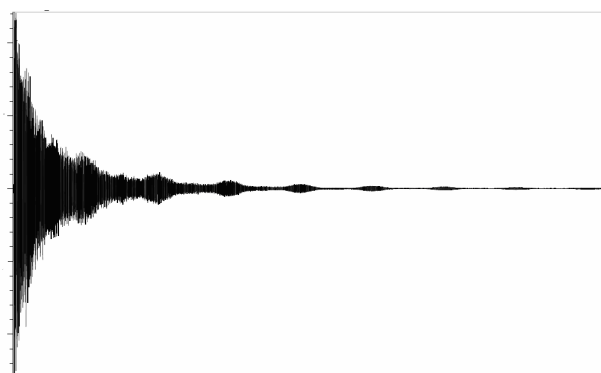
Při studiu biologických systémů je velice důležité rozlišovat enantiomery látek a pro tyto účely se výborně hodí vysokoúčinné chromatografické separace s enantio-selektivními stacionárními fázemi – viz obr. 3.



Obr. 3. Plynově chromatografická separace aminokyselin jako *N-(O,S)*-pentafluoro-propanoylesterů na koloně Chirasil-Val (podle skript Analytické separační metody, Učební texty Univerzity Karlovy v Praze, 2004)



Obr. 4. Trojrozměrné zobrazení distribuce vanadu v legované oceli pomocí metody hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů (SIMS), spojené s rozsáhlým zpracováním primárních dat získaných pro sérii paralelních vrstev (převzato z technické literatury)



Obr. 5. NMR-spektrum: nahoře FID, záznam v časové doméně, dole ^1H NMR spektrum po Fourierově transformaci, ve frekvenční doméně (spektra laskavě poskytl RNDr. Miloš Buděšínský, CSc.)

Příklad 4

Tento příklad obrací naši pozornost k další důležité oblasti, k materiálovému výzkumu. Pro posouzení vlastností ušlechtilé oceli je zapotřebí spolehlivě určit prostorovou distribuci legujících prvků. Tento náročný úkol lze řešit použitím vysoce selektivní analytické techniky, spolu s rozsáhlým počítačovým zpracováním signálu - viz obr. 4.

Příklad 5

Tento příklad ilustrovaný obr. 5 ukazuje obrovský potenciál počítačového zpracování primárního analytického signálu, zejména z hlediska zlepšení poměru signálu k šumu.

LITERATURA

1. Štulík K., Zýka J.: *Fresenius' J. Anal. Chem.* 343, 832 (1992).
2. WPAC/FECS, 1993.

K. Štulík (*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Science, Charles University, Prague*): **The Role of Analytical Chemistry in Contemporary Science and Practice**

The present state of science is briefly characterized and the definition of analytical chemistry is tentatively formulated. The principal tasks of analytical chemistry in research, technology, and everyday life are discussed. Some important approaches to the solution of analytical problems are pointed out and illustrated on specific examples.